

Institut für theoretische Physik  
der Universität Frankfurt a. M.  
Robert-Mayer-Str. 6-8

ÜBER DEN OBERFLÄCHENTERM DER GESAMTENERGIE  
DER ATOMKERNE NACH DEM FERMIGASMODELL

Eberhard Hilf

Institut für Theoretische Physik, Frankfurt/Main, Robert-Mayer-Str. 8-10

Frühjahr 1963

Oberflächenterm der Gesamtenergie der  
Atomkerne nach dem Fermigasmodell.  
E. HILF

# INHALTSVERZEICHNIS

EINLEITUNG UND ÜBERBLICK	2	
KAPITEL I		
a) die Halbraummethode von Swiatecki	7	
b) die Abzählmethode von Hill & Wheeler	13	
c) Vergleich beider Methoden	16	
KAPITEL II		
a) Einführung	22	
b) die Hypothese	25	
c) Methodik	29	
d) Ähnlichkeitstransformation	32	
e) Mittelwerte und Streuung	36	
f) allgemeine Eigenschaften	42	
KAPITEL III		
a) das Eigenwertspektrum für ein würfelförmiges Innengebiet		
b) Teilchenzahl und Energie	51	
c) Oberflächenterm	53	
KAPITEL IV		
a) Eigenfunktionen und Eigenwert für ein kugelförmiges Innengebiet	60	
b) Teilchenzahl und Energie	63	
c) Oberflächenterm	64	
KAPITEL V		
a) Eigenfunktionen und Eigenwerte für ein zylinderförmiges Innengebiet	66	
b) Teilchenzahl und Energie	67	
c) Oberflächenterm	68	
ZUSAMMENFASSUNG	70	
ANHANG 1	Mittlere Niveau- und Termdichte sowie Entartungsgrade für das Würfelspektrum	A 1
ANHANG 2	Algol-60-Programme und Ergebnisse der el.-numerischen Rechnungen	A 8
ANMERKUNGEN		
LITERATURVERZEICHNIS		

## EINLEITUNG und ÜBERBLICK

Die mittleren und schweren Atomkerne zeigen experimentell folgende gemeinsame Eigenschaften:

- 1). Im Innern der Kerne ist die Nukleonendichte  $\rho(\vec{x})$  nahezu konstant. Ihr Betrag ist dort für alle betrachteten Kerne nahezu gleich: diesen Wert nennen wir  $\rho_\infty$ .
- 2). An der Kernoberfläche fällt die Dichte steil ab; als "Oberflächenschicht" definiert man dasjenige Gebiet, in dem die Dichte  $\rho(\vec{x})$  von 90% auf 10% des Wertes im Innern des Kernes ( $\rho_\infty$ ) abfällt. Ihre Dicke sei  $t$ .
- 3). Die Bindungsenergie  $H$  der Kerne ist in erster Näherung dem Atomgewicht  $A$  proportional ("Sättigung"), ebenso wegen 1)., 2). das Volumen  $V$ ;  $V \approx A/\rho_\infty$ .

Es sind also  $\rho_\infty$ ,  $t$ ,  $H/A$  und  $V/A$  nahezu/unabhängig vom Atomgewicht. *(in erster Näherung)*

In formaler Analogie zum (kugelförmigen) Flüssigkeitstropfen vermuteten daher Gamow und v. Weizsäcker für die Kernbindungsenergie  $H$ , ( $\alpha$  und  $\beta$  seien von  $A$  unabhängige Faktoren),

$$(1) \quad H = \alpha \cdot A - \beta \cdot A^{2/3}$$

und deuteten den ersten Term (s. 1.) als volum-, den zweiten als oberflächenproportional (Oberflächenenergie). Fügt man in dem Ansatz (1) noch ~~je~~ einen Coulomb-, ~~[Symmetrie- und Paarungsterm]~~ hinzu,<sup>1)</sup> (Bethe - v. Weizsäckergleichung), so läßt sich der mittlere Verlauf der experimentell ermittelten Werte  $H(A)$  nach Anpassung der noch freien Faktoren ( $\alpha, \beta, \dots$ ) recht gut wiedergeben.

Um die Faktoren  $\alpha$  und  $\beta$  theoretisch zu bestimmen, betrachten wir als einfachste quantenmechanische Näherung der Kernstruktur das Fermigas-Modell, d.h. ein System von  $N$  identischen Fermionen ohne Wechselwirkung im Grundzustand, welches durch ein äußeres Potential  $V(\vec{x})$  gebunden wird. Es seien nur solche Potentiale zugelassen, für welche die Teilchendichte für genügend hohe Teilchenzahlen die Be-

<sup>1)</sup> R. Hofstadter (1956)<sup>++</sup> fand experimentell  $t=2,4$ fermi, sowie den Kernradius zu  $R_{1/2} = r_0 \cdot A^{1/3}$ ,  $r_0=1,1$ fermi, d.h. also  $\rho_\infty = (\frac{3}{4\pi} \cdot r_0^{-3})^{-1}$ .

<sup>++</sup>) Im Literaturverzeichnis (Anh. 4) sind die Zitate alphabetisch und nach Jahreszahl geordnet angegeben.

Alle weiteren Fußnoten sind fortlaufend nummeriert u. finden sich geschlossen als Anhang 3.

dingungen 1). u. 2). erfüllt; wir beschränken uns sogar auf Potentiale, welche null innerhalb, unendlich außerhalb eines konvexen Körpers  $\mathcal{L}$  sind. Es sei zudem zunächst  $N$  so groß gedacht, daß die speziellen "Schalenstruktureffekte", d.h. die individuellen Abweichungen der einzelnen Werte der Gesamtenergie  $H(N)$  gegenüber dem mittleren Verlauf von  $H(N)$  vernachlässigt werden können. In diesem einfachsten quantenmechanischen Modell können wir die Größen  $\rho_\infty$  und  $H(N)$  miteinander verknüpfen.

Ziel dieser Arbeit ist es nun, in diesem einfachen Modell die Abhängigkeit der Funktion  $H(N)$  bzw. genauer des Faktors  $\beta'$  - der Faktor  $\alpha$  ist schon von H. Weyl (1915) für beliebige Kerngestalt berechnet worden - von  $\rho_\infty$  und Eigenschaften der Kerngestalt festzustellen. Dabei werden wir eine Abhängigkeit von  $H(N)$  von der Kernoberfläche  $S$  von einer möglichen  $V^{2/3}$ -Abhängigkeit,  $V$  sei das Volumen des Kernes, zu trennen haben.

Da die Bethe - v. Weizsäcker-Gleichung den mittleren Verlauf der Bindungsenergien für relativ kleine Nukleonenzahlen ( $A=240$  entspricht  $N=60$ ) wiedergeben soll, müssen wir in unserem Modell bei so kleinen Teilchenzahlen auch noch den Einfluß der Schalenstruktureffekte auf den Verlauf von  $H(N)$  untersuchen (s. Kap. III-V).

Wegen der runden, kugelähnlichen Gestalt der wirklichen Atomkerne ist für diese das Verhältnis  $S/V^{2/3}$  nur sehr wenig unterschieden, - für alle Körper  $\mathcal{L}$ , die durch Ähnlichkeitstransformationen ineinander übergehen (insbesondere Kugel) ist es sogar fest. Man kann daher bei Funktionen, welche von Eigenschaften der Gestalt der Kerne abhängen, empirisch nur schwer zwischen  $S$ - und  $V^{2/3}$ -proportionalen Termen unterscheiden.

Anstatt nun im Modell die Gestaltabhängigkeit von  $H(N)$  etwa an Rotationsellipsoiden als Näherung der Gestalt wirklicher Kerne festzustellen, erscheint es daher praktischer, erst für Körper  $\mathcal{L}$  irgendeines bestimmten Typs <sup>1a)</sup> für verschiedene Proportionen die  $S$ -Abhängigkeit von  $H(N)$  bei festgehaltenem  $V$  zu untersuchen, und dann die Abhängigkeit von  $H(N)$  vom Typ von  $\mathcal{L}$  zu betrachten. Erweist sich also ein etwa für Quader gefundener oberflächenproportionaler Term als unabhängig vom Typ von  $\mathcal{L}$ , so wird er auch für die Gestalt wirk-

licher Kerne gelten.

Betrachten wir nun die Gestaltabhängigkeit von (1), so erweist sich der erste Term wegen  $V \propto N/\rho_\infty$  (s. auch 3), S. 2) als volumproportional, während der zweite sowohl oberflächen- wie  $V^{2/3}$ -proportional sein kann. Eine Oberflächenproportionalität vermutet man dabei in Analogie zum Tröpfchen, für welches  $\beta = \tilde{\beta} \cdot S/\sqrt{V}$  gilt. Dabei ist  $\tilde{\beta}$  eine von der Form des Tropfens unabhängige Materialkonstante von der Dimension einer Energie und  $\tilde{\beta} \cdot \rho_\infty$  die Oberflächenspannung.

In der Hoffnung einer zumindest teilweisen Oberflächenproportionalität von  $\beta \cdot N^{2/3}$  in (1) schreiben wir für die Gesamtenergie als Ansatz:

$$(2) \quad H(N, \mathcal{L}) = \tilde{\alpha} \cdot V + \tilde{\beta} \cdot S + R(\mathcal{L})$$

Dabei sei  $\tilde{\alpha} = \alpha_\infty$  eine von Volumen und Oberfläche unabhängige Konstante (von der Dimension einer Energie) und es gelte  $R(\mathcal{L}) = o(V)$ . In  $R(\mathcal{L})$ , dem Restglied, sei die gesamte von den beiden ersten Termen nicht erfaßte  $\mathcal{L}$ -Abhängigkeit von  $N$  enthalten, insbesondere also der  $V^{2/3}$ -proportionale Anteil.

In unserem Modell läßt sich neben  $\tilde{\alpha}$  in bestimmten Fällen ein  $\tilde{\beta}_M$  explizit berechnen, von dem wir jedoch nicht wissen, ob es schon die ganze  $S$ -Abhängigkeit enthält. Wir betrachten daher (2) in der Weise, daß wir für  $\tilde{\beta}$  den Modellwert  $\tilde{\beta}_M$  einsetzen. Der zugehörige Restterm  $R_M(\mathcal{L})$  ist dann, falls  $\tilde{\beta}_M$  nicht gleich  $\beta$  ist, auch noch oberflächenproportional.  $R_M(\mathcal{L})$  werden wir abschätzen. Den Index  $M$  lassen wir im folgenden fort. Den zweiten Term der Weizsäcker-Gleichung können wir nun genau dann mit  $\tilde{\beta} \cdot S$  vergleichen, wenn die Abschätzung des Restterms  $R(\mathcal{L}) = o(V^{2/3}) = o(S)$  ergibt.

Der Oberflächenterm  $\tilde{\beta} \cdot S$  und der Restterm  $R(\mathcal{L})$  entstammen in unserem Modell verschiedenen Sachverhalten:

Betrachten wir zunächst die zu den  $N$  tiefsten Eigenwerten gehörenden unbegrenzten Wellenfunktionen der "Kernmaterie", d.h. in einem Kasten (der Kastenlänge  $L$  und des Volumens  $V$ ) durch periodische Randbedingungen quantisierte und normierte ebene Wellen, welche den ganzen Raum erfüllen. Die Dichte  $\rho(\vec{x})$  dieser Kernmaterie ist dann im ganzen Raum konstant,  $\rho(\vec{x}) = \rho_\infty = N/V$ . Für die Energie

erhält man neben dem Volumeterm  $\tilde{\alpha} \cdot V$  einen Restterm  $R(\mathcal{Q})$ , welcher nicht verschwindet und  $R(\mathcal{Q})$  in (2) entspricht. Es ist  $R(\mathcal{Q}) \rightarrow 0(V)$  und die experimentelle Bewährung der Bethe-v. Weizsäcker-Gleichung läßt mindestens  $R(\mathcal{Q}) \rightarrow 0(V^{2/3})$  erhoffen.

Der Restterm ist eine Folge der endlichen Größe der Teilchenzahl  $N$ . Betrachtet man nämlich, wie in der "Theorie der Kernmaterie" üblich, den limes  $V \rightarrow \infty$  von (2), welcher bei festgehaltenem  $\rho$  den limes  $N \rightarrow \infty$  entspricht,

$$\lim_{V \rightarrow \infty} (\Pi/V) = \alpha \cdot \rho_{\infty},$$

so geht von (2) sowohl Restterm wie Oberflächenterm verloren, und man behält die für Kernmaterie bekannte lineare Beziehung:  $H = \tilde{\alpha} \cdot V = \alpha \cdot N$ .

Der Oberflächenterm ( $\beta \cdot S$ ) in (2) ist dagegen eine Folge der räumlichen Begrenzung der Wellenfunktionen durch  $\mathcal{L}$ , genauer eine Folge der Verschärfung der Randbedingungen: die Wellenfunktionen müssen wirklich null auf der Oberfläche von  $\mathcal{L}$  werden. Ein Oberflächenterm (ebenso wie  $R(\mathcal{L})$ ) tritt auch dann auf, wenn die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen gleich null ist. Der potentielle Anteil des Oberflächenterms verschwindet dann aber, weil stets entweder das Potential oder die Wellenfunktionen gleich null sind (wegen des speziellen Ansatzes für das Potential  $\mathcal{V}(\vec{x})$ ).

Die Analogie zwischen Atomkern und klassisch betrachtetem Flüssigkeitstropfen geht nicht sehr weit. Das klassische System hat keinen kinetischen Anteil der Oberflächenspannung. Bei Abschalten der Wechselwirkung und fehlender (äußerer) potentieller Energie verschwindet bei ihm also auch die Oberflächenspannung, im Gegensatz zum quantenmechanischen System (Kern), für das jedoch möglicherweise im Falle starker Wechselwirkung ("flüssigkeitsähnlich") der kinetische Anteil vernachlässigbar klein gegen den potentiellen ist.

In Kapitel I wird zunächst gezeigt, daß sich im Fermigas-Modell die nach verschiedenen Methoden (Hill & Wheeler bzw. Swiatecki) für quaderförmige Kerne (bzw. für "von einer Halbebene begrenzte Kernmaterie") berechneten Modelloberflächenterme nur durch die Definition der Lage der Kernoberfläche unterscheiden; diese ist in unserem Modell, im Gegensatz zu der Lage der Oberfläche von  $\mathcal{L}$  (der

"Potentialoberfläche"), noch in geringem Maße willkürlich.

Aus den von Hill & Wheeler bzw. Swiatecki angegebenen Ausdrücken werden wir dann einen Ausdruck für die Gesamtenergie  $H$  des Fermionensystems ableiten, welcher nur von der Teilchenzahl  $N$ , der Sättigungsdichte  $\rho_0$  und "Gestaltparametern" (z.B.  $S/V^{2/3}$ ) abhängt und somit im Falle konstant angenommener Sättigungsdichte das gesuchte Analogon zur v. Weizsäckerformel (1) darstellt. Der numerische Wert der spezifischen Oberflächenspannung unserer Formel wird dann mit dem (über die v. Weizsäckergleichung gewonnen) empirischen Wert verglichen. Dieser empirische Wert der spezifischen Oberflächenspannung ist jedoch aus den Bindungsenergien der bekannten Atomkerne bestimmt worden, welche näherungsweise kugelförmig sind und deren Massenzahlen endlich, sogar kleiner als 280 sind. Daher ist zu prüfen, ob die in unserem Modell für quaderförmige Kerne asymptotisch großer Teilchenzahl angegebene Formel für die Gesamtenergie  $H$  auch für kugelförmige Kerne endlicher Teilchenzahl verwendet werden kann. (Einer Massenzahl von z.B. 280 entspricht wegen der Spin- und Isospinentartung im Modell eine Teilchenzahl  $N = 70$ ).

In Kapitel II wird daher die Hypothese aufgestellt, daß für endliche (kleine) Teilchenzahlen und für Körper beliebiger Gestalt der mittlere Verlauf der Gesamtenergie des Modellkernes durch die in Kap. I angegebenen Formeln richtig wiedergegeben wird. Im Gegensatz zu der mathematischen Vermutung der Gestaltunabhängigkeit dieser Formeln für asymptotisch große Teilchenzahlen kann für endliche Teilchenzahlen die Hypothese nur numerisch und an einzelnen (möglichst verschieden gestalteten) Testkörpern geprüft werden, weil die einzelnen  $H$ -Werte natürlich in gestaltspezifischer Weise streuen. Nur der mittlere Verlauf von  $H$  ist möglicherweise gestaltunabhängig.

In den Abschnitten c) - f) wird das zur Untersuchung dieser Frage verwendete Verfahren angegeben.

In den Kapiteln III - V werden wir dann für drei Testkörper sehr verschiedener Gestalt den mittleren Verlauf der Gesamtenergie  $H$  für einen endlich großen Teilchenzahlbereich bestimmen und mit dem Verlauf der asymptotischen Ausdrücke des Kap. I vergleichen.

Das Ergebnis der Arbeit ist: Aus dem Fermigas-Modell läßt sich für asymptotisch große Teilchenzahlen - allerdings ohne genügend scharfe

Resttermabschätzung - ein Ausdruck für die Gesamtenergie eines in einem Körper von der Gestalt eines Quaders eingeschlossenen Fermigases ableiten, welcher von gleicher Struktur wie die für die Bindungsenergie der Atomkerne aufgestellte halbempirische v. Weizsäckerformel ist. Der Oberflächenterm von  $H(N)$  hängt nur von der Sättigungsdichte  $\rho_\infty$  und dem Verhältnis  $S/V^{2/3}$  des Quaders ab.

Für endliche (kleine) Teilchenzahlen wird an drei Testkörpern sehr verschiedener Gestalt (und verschiedenen Verhältnissen  $S/V^{2/3}$ ) gezeigt, daß der mittlere Verlauf der Gesamtenergie  $H$  in zweiter Näherung durch die für Quader gegebenen asymptotischen Formeln richtig wiedergegeben wird.

Der Restterm erweist sich als im Mittel numerisch klein gegen den Oberflächenterm mit einer relativ zum Oberflächenterm abnehmenden Tendenz. Dies legt die Vermutung nahe, daß asymptotisch  $R(\mathcal{Z}) = o(V^{2/3})$  sein müßte<sup>2)</sup>.

Damit ist aus dem Fermigas-Modell ein expliziter Ausdruck für die spezifische Oberflächenspannung der v. Weizsäckerformel angegeben.



## KAPITEL I

### a) Die Halbraummethode von Swiatecki

R. Hofstadter (1956) gibt als besten experimentellen Wert für den Faktor  $\beta$  in (1) (über die Methode der Berechnung s. Anmerkung 1)

$\beta = (4 r_0^2 \cdot \sigma) = 17,8 \text{ MeV}$ ,  $r_0 = 1,1 \text{ fermi}$  an.  $\sigma$  bezeichnet man als Oberflächenspannung,  $\rightarrow \sigma = 117 \text{ MeV/barn}$ . Der oberflächenproportionale Anteil der Kernbindungsenergie ist dann  $E_S = \beta A^{2/3} = \sigma S$ , wobei  $A$  das Atomgewicht und  $S$  die Kernoberfläche ist.

Eine richtige theoretische Ableitung einer Kernoberflächenspannung aus einem Kernmodell gelang zuerst Swiatecki (1951) im Fermigasmodell für die von einer Ebene begrenzte Kernmaterie, als einfachstem Fall einer Kernoberfläche. Gemeint ist ein Potential der Gestalt

$$V(\vec{x}) = V(x) = \begin{cases} 0 & x > 0 \\ \eta \cdot |x| & x \leq 0 \end{cases}, \quad \vec{x} = (x, y, z);$$

$\eta$  ist der Parameter der "Wandschräge" des Potentials:  $0 \leq \eta \leq \infty$ . Swiateckis Vorstellung war dabei, daß man in diesem Ansatz unsichere Annahmen über die Kernkräfte vermeidet, in der Hoffnung, daß die Kernoberflächeneffekte vor allem eine Folge des einseitigen Abfalls der Dichte und des verschieden raschen gleichsinnigen Abfalls der einzelnen Wellenfunktionsbeiträge sind, welche durch ein begrenzendes Potential simuliert werden können. Dabei wird die Oberflächenspannung abhängig von der Dichte im Innern ("Kernmateriedichte") und dem Parameter  $\eta$ . (Das Minimum von  $\sigma$  bezüglich  $\eta$  liefert zugleich eine theoretische Aussage über die Oberflächendicke  $t$ ).

Das Problem, die Bindungsenergie  $H$  eines  $N$ -Nukleonenkerns zu berechnen, sollte nach Swiatecki also näherungsweise gelöst werden durch folgende Zerlegung in Teilprobleme:

- 1). Bestimmung von  $\rho_\infty$  und  $H(V)/V$  für Kernmaterie. Hier geht der Kernkraftansatz entscheidend ein (Sättigungsproblem).
- 2). Bestimmung von Oberflächenspannung und Oberflächendicke  $t$  für eine von einer Halbebene  $\mathcal{L}$  begrenzte Kernmaterie bei Kenntnis von  $\rho_\infty$  und  $H(V)/V$  aus 1). Die Kernkräfte gehen über das äußere Potential  $V(x)$  ein und werden explizit nur in erster störungstheoretischer Näherung berücksichtigt. Diesen Schritt nennen wir die "Halbraummethode".

3). Bestimmung der Krümmungsabhängigkeit von  $\Pi$  für den Fall, daß  $\mathcal{L}$  eine Kugel ist, bei Kenntnis von  $\rho_{\infty}$ ,  $\Pi(V)/V$ ,  $\sigma$  und  $t$  aus 1). u.2). Kernkräfte gehen nur über das Potential  $\mathcal{V}(r)$  ein.

4). Höhere Näherungen.

Auf diese Weise sollte nach Swiatecki der Einfluß der Gestalt des Kernes auf die Bindungsenergie stufenweise immer besser berücksichtigt werden. Ausgeführt wurde von ihm nur der zweite Schritt. Die Eigenart der Swiatecki'schen Methode, die Oberflächenspannung durch unmittelbare Betrachtung des Abfalls der Wellenfunktionen am Rande zu gewinnen, gestattet, sie unabhängig von den Werten von  $V$  und  $N$  zu berechnen. Die Existenz des Restterms wird dabei von Swiatecki nicht bemerkt. Er betrachtete daher, ohne Restterm, Oberflächenspannung im limes  $N \rightarrow \infty$ . Für die Gesamtenergie würde sich bei gleicher limes-Bildung schlicht wieder  $\Pi(V)/V = \mathcal{E}$  ergeben.

Die "Halbraummethode", d.h. der zweite Schritt des Swiatecki'schen Programms, gibt nur im einfachsten Fall (d.h. wenn  $\eta = \infty$  ist und ohne Zweiteilchenwechselwirkungen) explizite 3) Lösungen:

Das Potential

$$(3) \quad \mathcal{V}(\vec{x}) = \mathcal{V}(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x > 0 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

beschränkt die  $N$  Wellenfunktionen  $\varphi(\vec{x})$  auf den Halbraum  $0 < x$ . Es sind ebene, in  $x$ -Richtung stehende Wellen (wegen  $\varphi(0, y, z) = 0$ ), welche in einem Würfel der Kantenlänge  $L$  quantisiert und normiert seien:

$$\varphi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \sqrt{2/L^3} \cdot \exp\{i(k_y y + k_z z)\} \cdot \sin(k_x x),$$

mit  $\vec{n} := \{n_i\}$ ,  $n_i$  ganzzahlig,  $n_i > 0$ ,  $i=1,2,3$ ;  $\vec{k} := \{k_i\} = (\pi/L) \cdot (n_1, 2n_2, 2n_3)$ . Jeder Vektor  $\vec{n}$  bzw.  $\vec{k}$  stellt einen möglichen Eigenzustand dar mit dem Eigenwert

$$(4) \quad h_{\vec{n}} := \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \epsilon_{\vec{n}} := \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \vec{k}^2$$

Im Grundzustand sind die  $N$  tiefsten Eigenwerte  $h_{\vec{n}}$  besetzt; der höchste von ihnen ist definitionsgemäß die Fermienergie  $h_f$ :<sup>4)</sup>

$$(5) \quad \sum_{\substack{\vec{n} \\ h_{\vec{n}} \leq h_f}} 1 := N$$

Eine in zweckmäßigen Einheiten gemessene Fermienergie ist  $\mathcal{E}_f = h_f \cdot 2m/\hbar^2$ . Die Endpunkte der Wellenzahlvektoren  $\vec{k}$  liegen innerhalb der "Fermi-

Halbkugel" vom Radius  $\sqrt{\epsilon_F}$  und bilden ein orthogonales Raumgitter. Um eine Halbkugel handelt es sich wegen der Voraussetzung  $k_x = n_x \pi / L > 0$ .

Zunächst sei die Dichteverteilung berechnet:

$$(6) \quad \rho(\vec{x}) = \sum_{\substack{\vec{k}^2 \leq \epsilon_F \\ n_x > 0}} |\varphi_{\vec{k}}(\vec{x})|^2 = \frac{2}{L^3} \cdot \sum_{\substack{\vec{k}^2 \leq \epsilon_F \\ n_x > 0}} \sin^2(k_x \cdot x) = \rho(x).$$

Ersetzt man die Summation durch Integration, was auf den Grenzübergang  $L \rightarrow \infty$  hinausläuft (über den genauen Übergang für endliche  $L$  siehe Abschnitt c)α)), so wird

$$(7) \quad \rho(x) = \frac{2}{L^3} \cdot (L^3 / 4\pi^3) \cdot \int_{\vec{k}^2 \leq \epsilon_F} d\vec{k} \cdot \sin^2(k_x \cdot x) \quad , \quad \text{d. h. mit } k_x := |\vec{k}| \\ = \frac{1}{2\pi^3} \cdot \int_0^{\sqrt{\epsilon_F}} dk \cdot k^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\vartheta \cdot \sin \vartheta \cdot \sin^2(x \cdot k \cdot \cos \vartheta),$$

und man erhält nach der Substitution  $\xi := 2 \cdot k \cdot x$ ,  $\eta := \xi \cos \vartheta$ ,  $\zeta := 2 \cdot \sqrt{\epsilon_F} \cdot x$

$$(8) \quad \rho(x) = \frac{1}{8\pi^2 \cdot x^3} \cdot \int_0^{\xi} d\xi \cdot \xi \cdot \int_0^{\xi} d\eta \cdot \sin^2(\eta/2) \quad \text{und mit } \sin^2(\eta/2) = (1 - \cos \eta) / 2 \\ \rho(x) = \frac{\epsilon_F^{3/2}}{6\pi^2} \cdot \left( 1 + \frac{3 \cos \zeta}{\zeta^2} - \frac{3 \sin \zeta}{\zeta^3} \right), \quad \zeta := 2 \cdot x \cdot \sqrt{\epsilon_F}.$$

Der Dichteabfall  $\rho(x)$  an der Potentialwand (3) (s. Abb. 1) hängt also in dieser Näherung selbstverständlich weder von  $L$  noch von  $N$  ab, solange diese Größen groß genug sind. Genauer: es soll

$$(9) \quad \lambda_F := \frac{1}{\sqrt{\epsilon_F}} \ll L,$$

sein, d. h. die kleinste vorkommende Wellenlänge  $\lambda_F = 2\pi \cdot \lambda_p$  soll klein gegen die Kantenlänge des Kastens bleiben. Dann wird nämlich für  $\xi \gg 1$  (d. h.  $x \gg \lambda_F / 2$ )  $\rho(x)$  im Innern des Kastens konstant und gleich der "Sättigungsdichte"  $\rho_\infty$ :

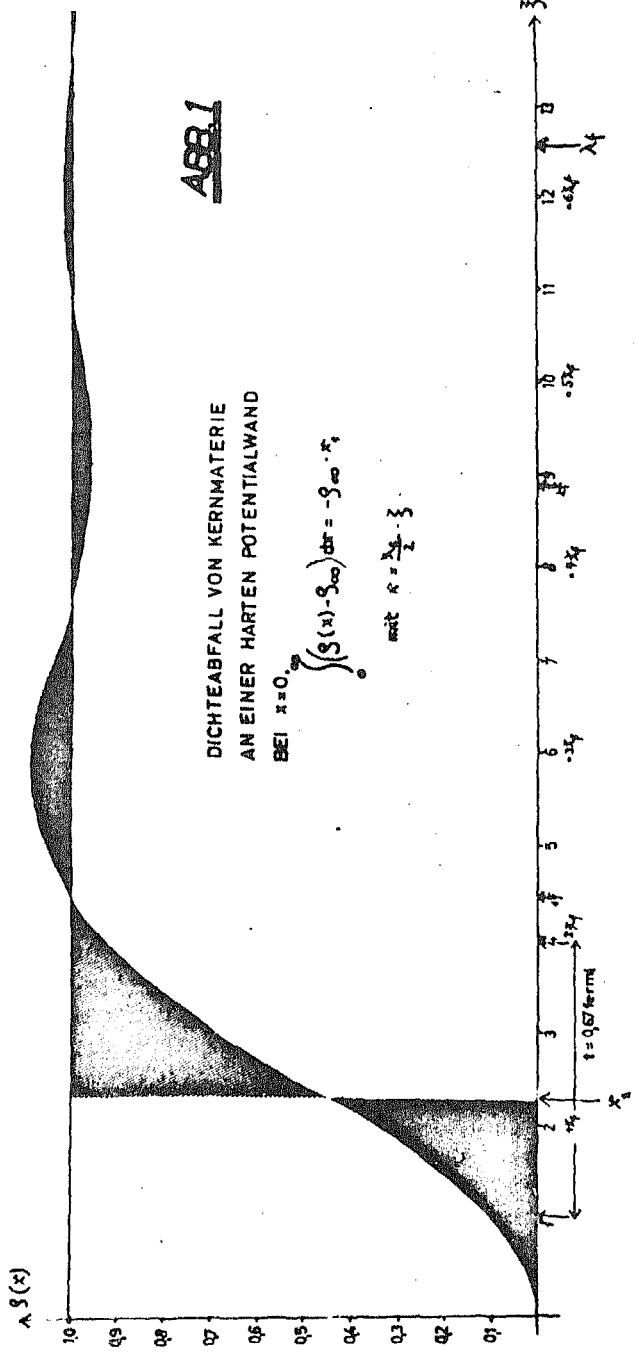
$$(10) \quad \left( \rho(x) \right)_{x \gg \lambda_F} = \rho_\infty := \frac{\epsilon_F^{3/2}}{6\pi^2} = \frac{1}{6\pi^2 \cdot \lambda_p^3}, \quad x \leq L/2.$$

Alle Kerne gleicher Sättigungsdichte  $\rho_\infty$  haben in diesem Modell also auch eine gleiche Fermigrenzenergie  $\epsilon_F$ .

Die Dichte fällt in einem recht schmalen Bereich der Größenordnung  $\lambda_F$  von  $\rho_\infty$  auf null ab. Das erkennt man aus (8);  $\rho(x)$  wird erst für  $\xi \approx 1$ , d. h. für  $x \approx \lambda_F$  merklich von  $\rho_\infty$  verschieden. Es ist

$$(11) \quad \left( \rho(x) \right)_{x \ll \lambda_F} = \frac{\epsilon_F^{5/2} \cdot x^2}{15 \pi^2},$$

woraus sich (bei Extrapolation) zufällig genau der Wert  $\lambda_F$  für die



**ABB. 1**

DICHTEABFALL VON KERNMATERIE  
AN EINER HARTEN POTENTIALWAND  
BEI  $x=0$ .

$$\int (S(x) - S_{\text{med}}) dx = -S_{\text{med}} \cdot x_0$$

mit  $x_0 = \frac{2}{3} \cdot \lambda_f$

"Oberflächendicke"  $t$  (d.h. der Strecke, auf der die Dichte von 90% auf 10% von  $\rho_\infty$  abfällt, s. Einleitg.) ergibt.

Die mittlere Dichte  $\rho_{av} := N/L^3 = N/V$  folgt aus (8) durch Integration:

$$\rho_{av} = \frac{1}{L/2} \cdot \int_0^{L/2} \rho(x) dx = \frac{\rho_\infty}{L/2} \cdot \int_0^{R_p L} \frac{d\zeta}{2 \cdot k_p} \cdot \frac{\rho(\zeta)}{\rho_\infty}$$

und wegen (9)  $\text{Si}(\infty) = \pi/2$  und  $\lim_{x \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{x^2} (x \cdot \cos x - \sin x) \right\} = 0$  wird <sup>7)</sup>

$$(12) \quad \rho_{av} \frac{L}{2} = \rho_\infty \cdot \left( \frac{L}{2} - x_1 \right), \quad x_1 = \frac{3\pi}{8} \cdot \lambda_p$$

Wollte man die berechnete Dichtefunktion  $\rho(x)$  durch eine Stufenfunktion  $\rho_\infty \cdot \Theta(x-x_1)$  ersetzen (bei gleicher Höhe  $\rho_\infty$ ), so müßte die Stufe bei festgehaltener Teilchenzahl  $N$  bei  $x_1$  liegen. Die Flächen unter den beiden Kurven in Abb. 1 sind gleich. Hätte man also kein begrenzendes Potential (3) und somit ebene Wellen  $e^{ikx}$  auch in  $x$ -Richtung, womit die Dichte überall konstant würde (Kernmaterie), so müßten, um bei gleichem  $N$  die Dichte  $\rho_\infty$  zu erhalten, die Wellenfunktionen im Gebiet  $x_1 \leq x \leq (L-x_1)$  quantisiert und normiert werden. Swiatecki diskutiert das folgendermaßen: Ein Würfel "Kernmaterie" vom Volumen  $\hat{V} = \hat{L}^3$  (d.h.: die Wellenfunktionen seien in diesem Würfel quantisiert und normiert) und der Dichte  $\rho_\infty$  sowie der Teilchenzahl  $N$  zeigt als Oberflächeneffekt bei Hinzunahme einer Potentialwand (3) bei  $x=0$  - einen stetigeren Übergang der Dichte zu null ( $\rho(x)$ ). Man geht also von einem Kern "ohne Oberfläche" mit den Ausmaßen  $\{ \hat{V} = \hat{L}^3, \hat{L} = L(L-2x_1), N, \rho_\infty \}$  aus; die Hinzunahme der "Oberfläche" (3) bei  $x=0$  und  $x=L$  verbreitert und verflacht die Dichteverteilung, so daß  $\{ V = L^3, N, \rho(x) \text{ mit } \rho(\frac{L}{2}) = \rho_\infty \}$  die neuen Ausmaße sind. Wir definieren als Lage der "Dichteoberfläche"  $x=x_1$  und als Lage der "Potentialoberfläche"  $x=0$  (entsprechend benutzen wir die Bezeichnungen "Dichtevolumen"  $\hat{V}$  und "Potentialvolumen"  $V$ ). Es sei nun die Oberflächenspannung berechnet.

Für die Gesamtenergie  $H$  erhält man, da die potentielle Energie null ist und der Grundzustand die Wellenfunktion

$$\Psi := \prod_{\substack{\vec{n}^2 \leq \epsilon_F \\ n_i > 0}} \varphi_{\vec{n}}(\vec{x})$$

hat, mit  $2L^2 = S$  folgenden Ausdruck:

$$(13) \quad H = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot S \cdot \int_0^{L/2} dx \left( \sum_{\substack{\vec{n}^2 \leq \epsilon_F \\ n_i > 0}} |\varphi_{\vec{n}}(\vec{x})|^2 \cdot \epsilon_{\vec{n}} \right)$$

Wir berechnen zuerst den Integranden <sup>5)</sup> analog zu (6)-(8):

$$\begin{aligned} \varepsilon(x) &:= \sum_{\substack{R^2 \leq \varepsilon_f \\ n_s > 0}} |\varphi_n(\vec{x})|^2 \cdot \varepsilon_n \\ &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\varepsilon_f} dR \cdot R^4 \cdot \int_0^{\pi/2} d\vartheta \cdot \sin \vartheta \cdot \sin^2(x \cdot R \cdot \cos \vartheta), \\ &= \frac{1}{24 \pi^2 \cdot x^5} \int_0^{\xi} d\xi \cdot \xi^3 \cdot \int_0^{\xi'} d\eta \cdot \sin^2(\eta/2), \text{ mit } \xi = 2x/\lambda_f \end{aligned}$$

$$(14) \quad \varepsilon(x) = \frac{\varepsilon_f^{5/2}}{10\pi^2} \cdot \left\{ 1 + \frac{5}{\xi^2} \cdot \left[ \left(1 - \frac{6}{\xi^2}\right) \cos \xi - \left(3 - \frac{6}{\xi^2}\right) \frac{\sin \xi}{\xi} \right] \right\}$$

Durch Integration (s. (13)) von  $\varepsilon(x)$  ergibt sich die "spezifische Energie", d.h. die Energie pro Flächeneinheit <sup>6)</sup> zu

$$(15) \quad H/S = \frac{h^2}{2m} \cdot \varepsilon_{av} \cdot \frac{L}{2} = \frac{h^2}{2m} \cdot \varepsilon_{av} \cdot \left(\frac{L}{2} - x_2\right)$$

mit

$$(15a) \quad \varepsilon_{\infty} := \lim_{x \rightarrow \infty} \varepsilon(x) = \frac{\varepsilon_f^{5/2}}{10\pi^2} = \left(10\pi^2 \cdot \lambda_f^5\right)^{-1}; \quad x_2 := \frac{5\pi}{16} \lambda_f$$

Dabei sind, wie auch in der Herleitung von (14), Terme, die für  $L \rightarrow \infty$  verschwinden, vernachlässigt.

Die Bezeichnungen  $\varepsilon_{av}$ ,  $\varepsilon_{\infty}$  entsprechen denen für die Dichte:  $\varepsilon_{av}$  ist die Gesamtenergie dividiert durch das Potentialvolumen  $V$ ,  $\varepsilon_{av} = \frac{2m}{h^2} \cdot \frac{H}{V}$ .  $\varepsilon_{\infty}$  ist die "Sättigungsenergiedichte", d.h. die spezifische Energie von Kernmaterie der Dichte  $\rho_{\infty}$ .

Die Differenz: spezifische Energie unseres Systems minus spezifische Energie von Kernmaterie der Dichte  $\rho_{\infty}$ , welche das ganze Potentialvolumen  $V$  ausfüllt, kann man als Oberflächenspannung bezeichnen (vgl. (15)):

$$(16) \quad \sigma_p := \frac{h^2}{2m} \cdot (\varepsilon_{av} - \varepsilon_{\infty}) \cdot \frac{L}{2} = -\varepsilon_{\infty} \cdot x_2 \cdot \frac{h^2}{2m}$$

Der Index  $p$  bezeichne den Bezug von  $H$  auf die Potentialparameter  $L$  und  $V$  (s. 15)).

Swiatecki bezeichnet nun als Oberflächenspannung die Größe  $\sigma_d$ . Sie ist die Differenz: spezifische Energie unseres Systems minus spezifische Energie von Kernmaterie der Dichte  $\rho_{\infty}$  und gleicher Teilchenzahl  $N$ , (d.h. dazu ist eine "Röhre" vom Querschnitt  $1 \text{ cm}^2$  nur von  $x=L/2$  bis  $x=x_1$  mit Kernmaterie anzufüllen (s. Abb.1)). Also ist mit (16)

$$\sigma_d := \frac{h^2}{2m} \cdot \left( \varepsilon_{av} \cdot L/2 - \varepsilon_{\infty} \cdot (L/2 - x_1) \right) = \sigma_p + \frac{h^2}{2m} \cdot \varepsilon_{\infty} \cdot x_1 = \frac{h^2}{2m} \cdot \varepsilon_{\infty} (x_1 - x_2),$$

und daraus folgt mit (12) und (15a)

$$(17) \quad \sigma_d = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \epsilon_\infty \cdot \frac{\pi}{16} \cdot \lambda_f$$

Der Index d bezeichne den Bezug auf Dichteparameter.  $\sigma_d$  ist allein eine Folge der veränderten Nullpunktsbewegung derselben N Teilchen. Das entspricht der exp. Vorstellung einer Oberflächenspannung. Daher werden wir beim Vergleich mit dem empirischen Wert der Oberflächenspannung von  $\sigma_d$  ausgehen.

Die physikalisch bedeutungslose Differenz

$$(18) \quad (\sigma_f - \sigma_d) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot (\epsilon_\infty \cdot \hat{L}/2 - \epsilon_\infty \cdot L/2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \epsilon_\infty \cdot x_1$$

ist also derjenige Beitrag  $\sigma_f - \sigma_d$ , welcher allein von dem Bezug der Oberflächenspannung eines N-Fermionensystems auf Kernmaterie anderer Teilchenzahl (welche ja für  $\sigma_f$  die "Röhre" bis  $x=0$  ausfüllt) herrührt, bzw., wie Swiatecki schreibt, der "willkürlichen Oberflächendefinition" (hier  $x=0$  statt  $x=x_1$ ) entstammt (s. Anmerkgen. 6) + 9)), kurz: "der Oberflächenterm (von Swiatecki) ist abhängig vom Bezugsvolumen".

Für das positive Vorzeichen von  $\sigma_d$  gibt Swiatecki einen anschaulichen Grund an. In einem äußeren Potential der Art (3) gelangen wechselwirkungsfreie Teilchen mit hohen Eigenwerten, vermöge der stärkeren Krümmung ihrer Wellenfunktionen mit größerer Wahrscheinlichkeit näher an die Potentialoberfläche ( $x=0$ ) als Teilchen mit niedrigeren Eigenwerten. "Sie erforschen größere Volumina" (Swiatecki). Daher haben an der Oberfläche die Teilchen im Mittel eine höhere kinetische Energie als im Kerninnern<sup>10)</sup>.

Substituiert man in (15)  $L/2 = \hat{L}/2 + x_1$ , so hat man  $H/S = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \epsilon_\infty \cdot (\frac{\hat{L}}{2} + (x_1 - x_1))$ . Daraus und aus (15) erhalten wir 8) für N und H mit  $V = \hat{V} + x_1 \cdot S$

$$(19) \quad N(\xi_f, V, S) = \left( \frac{\xi_f^{3/2}}{6\pi^2} \cdot V - \frac{\xi_f}{16\pi} \cdot S \right) = \frac{\xi_f^{3/2}}{6\pi^2} \cdot \hat{V} = N(\xi_f, \hat{V}, S),$$

mit  $\xi_f = (6\pi^2 g_\infty)^{2/3}$ .

$$(20) \quad H(\xi_f, V, S) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\xi_f^{5/2}}{10\pi^2} \cdot V - \frac{\xi_f^2}{32\pi} \cdot S \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\xi_f^{5/2}}{10\pi^2} \cdot \hat{V} + \frac{\xi_f^2}{160\pi} \cdot S \right) = H(\xi_f, \hat{V}, S),$$

und aus beiden

$$(21) \quad H(N, \hat{V}, S) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\hat{V}^{2/3}} \left( \frac{(6\pi^2 N)^{5/3}}{10\pi^2} + \frac{(6\pi^2 N)^{4/3}}{160\pi} \frac{S}{\hat{V}^{2/3}} \right)$$

Swiatecki suchte sein Ergebnis (21) für den Vergleich mit den Experimenten zu verbessern. Hierfür verwendete er ein nicht senkrecht, sondern schräg ansteigendes Potential (2), dessen Steigung dann als Parameter zum Minimalisieren von  $H$  benutzt werden kann. Swiatecki hoffte, damit den Einfluß der Kernkräfte auf die Dichteverteilung genügend berücksichtigt zu haben. Er benutzte sie nur störungstheoretisch in erster Näherung zur Berechnung der potentiellen Energie. Sein Ergebnis für die "spezifische Oberflächenspannung"  $\beta$  (dem zweiten Koeffizienten der v. Weizsäcker-Gleichung) war nicht sehr gut. Er fand für  $\beta = 4\pi r_0^2 \sigma_1$  55% des experimentellen Wertes. Er hatte jedoch die vor den Hofstadterexperimenten bekannten experimentellen Werte von  $r_0 = 1,4f.$ ,  $E_{vol}/V = 14,66$  MeV benutzt. Mit den Hofstadterwerten  $r_0 = 1,1f.$ ,  $E_{vol}/V = 15,75$  MeV ergibt die Rechnung von Swiatecki 66% der experimentellen spezifischen Oberflächenspannung (17,8 MeV), sie liefert also eine für ein so einfaches Modell ganz gute Näherung. Auch die Oberflächendicke  $t$  wird mit 3,8 f. statt 7 f. realistischer (s. aber (33)ff.).

#### b) Die Abzählmethode nach Hill & Wheeler

Während bei der Swiatecki-Methode zur Berechnung der Gesamtenergie nach (13) zuerst die Summation über die Zustände, danach die Ortsraumintegration auszuführen war - was ein Kenntnis sowohl der Eigenwerte als auch der Eigenfunktionen voraussetzte - vertauscht man bei der Abzählmethode in (13) Integration und Summation, führt also zuerst die Ortsraumintegration aus, welche die Norm ergibt und behält so nur eine Summation über die Eigenwerte übrig, deren Kenntnis man allein benötigt.

Da man bei dieser Methode weder die Eigenfunktionen noch den Umweg über die Hilfsfunktionen  $\xi(x)$  und  $\eta(x)$  benötigt, ist es mit ihr einfacher, die Abhängigkeit der Bindungsenergie von der Gestalt der Kerne zu studieren. Bei Verzicht auf eine (z.B. störungstheoretische) Berücksichtigung der Kernkräfte betrachten wir nur äußere Potentiale der Art ( $\mathcal{L}$  sei ein konvexer Körper):

$$(22) \quad V(x) = \begin{cases} 0, & \text{falls } \vec{x} \in \mathcal{L} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$



Während wir in Kap. II die Abzählmethode allgemein darstellen und sie dann in den Kap. III-V benutzen werden, behandeln wir in diesem Abschnitt das von Hill & Wheeler gerechnete Beispiel: ein ideales Fermigas in einem Quader.

Es sei also  $\mathcal{L}$  ein Quader mit den drei Kanten  $a_1, a_2, a_3$ ; dann ist  $V = a_1 a_2 a_3$  sein Volumen <sup>11)</sup>,  $S = 2(a_1 a_2 + a_2 a_3 + a_3 a_1)$  seine Oberfläche und  $L = 2 \cdot \pi \cdot (a_1 + a_2 + a_3)$  seine mittlere totale Krümmung <sup>12)</sup>, deren Einfluß hier gleich mitbehandelt wird. Nach (22) gelten also für die Wellenfunktionen die Randbedingungen

$$(23) \quad \varphi(0, y, z) = \varphi(a_1, y, z) = \varphi(x, 0, z) = \varphi(x, a_2, z) = \varphi(x, y, 0) = \varphi(x, y, a_3) = 0.$$

Die Eigenfunktionen sind daher stehende Wellen mit den Eigenwerten

$$(24) \quad h_{\vec{n}} =: \sum_{lm} \epsilon_{lm} =: \sum_{lm} \vec{k}^2 \quad \text{mit } \vec{k} = \pi(n_i/a_i); \quad \vec{n} = (n_i); n_i \text{ ganzzahlig, } > 0; i=1,2,3.$$

wie ersichtlich, bilden die Endpunkte aller Vektoren  $\vec{k}$  ein Gitter im Wellenzahlraum, welcher bis auf den Faktor  $\hbar^3$  mit dem Impulsraum übereinstimmt. Das Gitter bezeichnen wir als "reziprok" zu einem Gitter, welches unseren Quader  $\mathcal{L}$  als Element enthält. Das reziproke ( $\vec{k}$ -) Gitter hat die Gitterkonstanten  $\pi/a_i$ ; das Volumen der reziproken Gitterzelle ist  $V_k = (2\pi)^3/V$ . Das entspricht der für asymptotisch große Eigenwerte gültigen Aufteilung des Phasenraumes in Zellen der Größe  $\hbar^3$ ; hier gilt sogar exakt  $V \cdot \hbar^3 \cdot V_k = \hbar^3$ . Im Grundzustand (s.S.8) bedeutet eine Summation über alle besetzten Zustände eine Summation über alle  $N$  Gitterpunkte  $\vec{k}$  (des reziproken Gitters), welche innerhalb des Kugeloktanten ( $n_i > 0$ ) vom Radius  $\sqrt{\epsilon_f}$  liegen. Auszulassen sind dabei alle Gitterpunkte, für die mindestens ein  $n_i$  gleich null ist, denn die zugehörigen Wellenfunktionen ( $\sim \sin n_i \cdot \pi/a_i$ ) sind dann identisch null, folglich nicht normierbar und daher in (24) ausdrücklich ausgeschlossen ( $n_i > 0$ ). Es sind genau diejenigen Gitterpunkte, welche in den Koordinatenachsen ( $n_i = 0$ ) liegen.

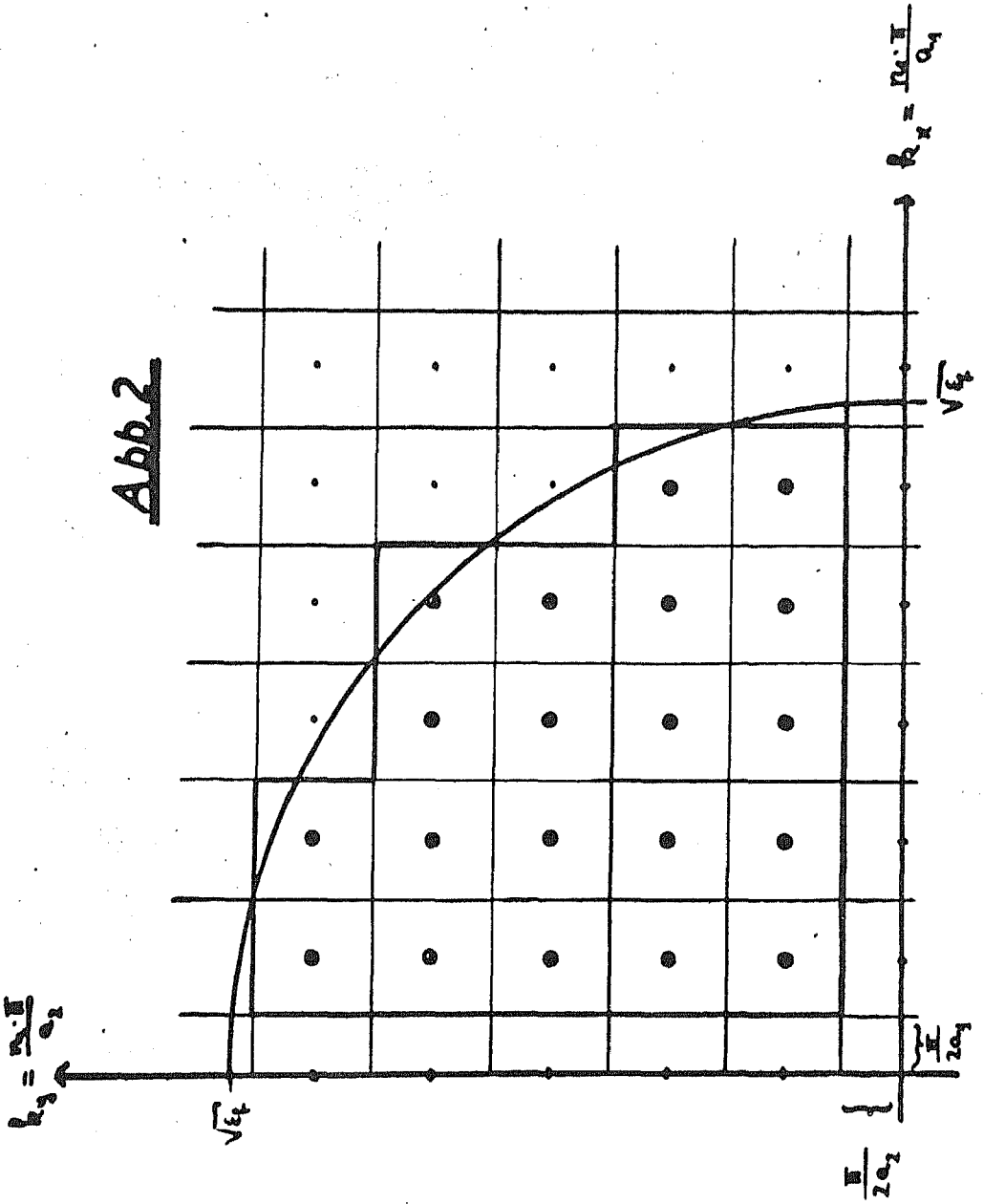
Die Wellenfunktionen seien orthonormiert, In der Bezeichnungsweise von S.10 wird aus

$$(25) \quad 1 = \langle \Psi | \Psi \rangle, \quad H = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

nach Ausführung aller Ortsraumintegrationen

$$(26) \quad N = \sum_{\substack{\vec{k}^2 \leq \epsilon_f \\ n_i > 0}} 1, \quad ,$$

Abb. 2



und es folgt wegen  $H = \sum_{i=1}^3 h_i$  :

$$(26a) \quad H = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \sum_{\substack{\vec{k}^2 \leq \xi_F \\ \vec{k} > 0}} \epsilon_{\vec{k}}$$

dabei bedeutet  $\vec{n} > 0$ ;  $n_1, n_2, n_3 > 0$ .

Denkt man sich jeden Gitterpunkt  $\vec{k}$  (s. Abb. 2) als Mittelpunkt einer Gitterzelle (welche ein Quader mit den Kanten  $V/a_i$  ist), so kann man die Summe (26) durch Integration über das Volumen des Kugeloktanten abschätzen. Die Zahl der besetzten Zustände multipliziert mit dem Volumen  $V_k$  einer Gitterzelle ist dann in etwa gleich dem Volumen des Kugeloktanten; abzuziehen sind dabei die Volumina der in den Oktanten hineinragenden Teile derjenigen Zellen, deren  $\vec{k}$  in den Koordinatenebenen (bzw. sogar in den Koordinatenachsen) liegen. Es handelt sich jeweils um die Hälfte (bzw. sogar nur um ein viertel) dieser Zellen. Sie werden berücksichtigt durch das Volumen der drei "Koordinatenebenenscheiben" (der Dicke  $\frac{1}{2} \frac{\pi}{a_i}$ ), vermindert um den dabei doppelt gezählten Beitrag der Achsenpunkte:

$$(27) \quad N = \frac{1}{\pi^3 a_1 a_2 a_3} \cdot \left\{ \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \xi_F^{3/2} - \frac{1}{4} \pi^2 \xi_F \cdot \left( \frac{\pi}{2a_1} + \frac{\pi}{2a_2} + \frac{\pi}{2a_3} \right) + \sqrt{\xi_F} \cdot \left( \frac{\pi^2}{4a_1 a_2} + \frac{\pi^2}{4a_2 a_3} + \frac{\pi^2}{4a_3 a_1} \right) \right\}$$

$$(28) \quad N = \frac{\xi_F^{3/2} \cdot a_1 a_2 a_3}{6\pi^3} - \frac{\xi_F}{16\pi} \cdot 2 \cdot (a_1 a_2 + a_2 a_3 + a_3 a_1) + \frac{\sqrt{\xi_F}}{8\pi^2} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot (4a_1 + 4a_2 + 4a_3)$$

$$(29) \quad N = \frac{V \cdot \xi_F^{3/4}}{6\pi^2} - \frac{S \cdot \xi_F}{16\pi} + \frac{L \cdot \sqrt{\xi_F}}{8\pi^2}$$

Analog erhält man die Gesamtenergie  $H$  des Systems durch Integration von  $\xi$  über den Fermikugeloktanten:

$$(30) \quad H = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left\{ \frac{V \cdot \xi_F^{5/2}}{10\pi^2} - \frac{S \cdot \xi_F^2}{32\pi} + \frac{L \cdot \xi_F^{3/2}}{24\pi^2} \right\}$$

Elimination von  $\xi_F$  liefert das Ergebnis von Hill & Wheeler:

$$(31) \quad H(N, V, S, L) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot V^{-2/3} \cdot \left\{ \frac{(6\pi^2 N)^{5/3}}{10\pi^2} + \frac{(6\pi^2 N)^{4/3} \cdot S}{32\pi \cdot V^{1/3}} + (6\pi^2 N) \cdot \left( \frac{1}{128} \left( \frac{S}{V^{1/3}} \right)^2 - \frac{1}{12\pi^2} \cdot \frac{L}{V^{1/3}} \right) \right\}$$

$S/V^{2/3}$  und  $L/V^{1/3}$  sind dimensionslose Gestaltparameter. Die Herleitung von (29) zeigt, daß der zweite Summand in (29)-(31) oberflächenproportional, nicht proportional zu  $V^{2/3}$  ist. Der Restterm wird bei Hill & Wheeler nicht diskutiert.

c). Vergleich beider Methoden

α) Der Restterm

Sowohl Swiatecki als auch Hill & Wheeler haben nicht bewiesen, daß sie mit ihren Näherungsergebnissen (21), bzw. (31) alle oberflächen- bzw.  $V^{2/3}$ -proportionalen Anteile von  $H(N)$  erfaßt haben. Bei beiden ist die einzige schwer überschaubare Näherung die Ersetzung der Summation (über die besetzten Zustände entsprechend den Gitterpunkten innerhalb der Fermifläche) durch ein Integral (über das Volumen des Fermikugeloktanten). Sie berücksichtigen zwar den von den Koordinatenebenen des Impulsraumes herrührenden Korrekturterm in erster Näherung (welcher bei Swiatecki null, wie wir auf S.18 sehen werden, bei Hill & Wheeler gerade den Oberflächenterm ergibt), schätzten aber nicht den von der Oberfläche des Fermikugeloktanten herrührenden Restterm ab.

Das Zustandekommen des Restterms sei zunächst für die Methode von Hill & Wheeler erläutert: Es sei wieder (s.S.15) jeder Gitterpunkt, der zu einem besetzten Zustand gehört, Mittelpunkt einer Zelle. Diese bilden ein "Zellengebilde"  $Z$ , vom Volumen  $V_Z = N \cdot V_k$ , von dem kleine Zipfelchen aus der Fermikugel herausragen (obwohl diese zu Zellen gehören, deren Mittelpunkte noch innerhalb der Kugel liegen). An anderen Stellen wird die Kugeloberfläche nicht ganz erreicht (s. Abb.2). Der Korrekturterm für (29) ist die Differenz der Volumina zwischen den überstehenden und den fehlenden Zipfelchen in Einheiten  $V_k$ . Seine Abschätzung durch eine Oberflächenschicht des Kugeloktanten etwa von der Dicke  $V_k^{1/3}$  ist sicher nicht sehr gut:

$$(32) \quad R \leq \left( \frac{1}{8} \cdot 4\pi \epsilon_f \cdot V_k^{1/3} \cdot \frac{1}{V_k} = \frac{1}{2\pi} \cdot \epsilon_f \cdot V^{2/3} \right) = O(V^{2/3})$$

Eine wirkliche Verschärfung der Abschätzung von  $R$  ist jedoch schwierig und gelingt nur zahlentheoretisch<sup>13)</sup>. Das gilt erst recht für die entsprechende Abschätzung des Restterms von  $H$ , für die der Gewichtungsfaktor  $\epsilon_f$  den Ausgleich der Zipfelbeiträge auf den ersten Blick noch zu erschweren scheint. Bei endlichen Teilchenzahlen ist nicht für alle  $N$  der Wert von  $\epsilon_f$  eindeutig bestimmt.  $\epsilon_f$  könnte noch beliebig zwischen zwei benachbarten Eigenniveaus gewählt werden:  $\epsilon_n \leq \epsilon_f < \epsilon_{n+1}$ . Aus Abb.2 ist dies unmittelbar anschaulich: Seien  $\sqrt{\epsilon_n}$  und  $\sqrt{\epsilon_{n+1}}$  die Radien benachbarter Kugelschalen, auf denen Gitterpunkte liegen, so ergibt jede Wahl von  $\epsilon_f$  zwischen  $\epsilon_n$  und  $\epsilon_{n+1}$  den gleichen Wert für  $N$  und  $H(N)$  (d.h. das gleiche "Zellengebilde"). Man könnte nun

erwarten, daß die Abschätzung (32) durch geeignete Definition von  $\epsilon_f$  verbessert werden könnte. Wir werden sehen (Kap. III b), daß es einige Werte von  $H$  gibt, für die sogar  $R(\epsilon_f)$  durch geeignete Wahl von  $\xi$  zu null gemacht werden kann. Trotzdem läßt sich auf diesem Wege die Abschätzung (32) nicht verbessern.

Betrachten wir statt stehender nun ebene Wellen  $e^{i\vec{k}\vec{x}}$  mit periodischen Randbedingungen ("Kernmaterie endlicher Teilchenzahl"), so sind alle Gitterpunkte innerhalb der ganzen Fermikugel zugelassen, auch die auf den Koordinatenebenen liegenden. Der Hill & Wheelersche Oberflächenterm verschwindet hier, der Zipfelterm aber bleibt. Der Restterm ist daher allein eine Folge der Endlichkeit der betrachteten  $N$  und zwar in dem Sinne, daß er mit wachsendem  $N$  relativ zum Volumenterm verschwindet (s. Einleitung S.5). Er ist unabhängig von der "physikalischen Oberfläche", welche als Randbedingung die Wellenfunktionen einschränkt. Das rechtfertigt nachträglich die Aufspaltung (2).

Auch für die Swiatecki-Methode ist unmittelbar ersichtlich, daß der Oberflächenterm eine Folge der Wahl der Eigenfunktionen ist; setzt man in (6) für die Wellenfunktionen ebene Wellen  $\varphi_n(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}}$  ein, so verschwindet der Oberflächenterm  $\sigma_d$ : Es wird  $\varphi(x) = \varphi_\infty$ .

Der Restterm bei Swiatecki verschwindet dabei sicher nicht. Gemeint ist der bei dem Übergang von der Zustandssumme zum Integral in (13) ff. nötige Korrekturterm. Bisher wurde gelegentlich die Vermutung geäußert, daß der Restterm von der Größenordnung des Oberflächenterms wäre. Das würde speziell für (14) einen Korrekturterm  $\sim \mathcal{V}_L = S/V$  bedeuten, der dann nach Übergang zu (15) eine Korrektur der Oberflächenspannung liefern würde. G. Lanzl (1962) glaubte dann, eine schärfere Abschätzung gefunden zu haben.

Der Beweis von Lanzl geht von einem Quader aus mit den Kantenlängen  $L_1, L_2$  und  $L_3$ . Läßt man dann in der Zustandssumme (6)  $L_2$  und  $L_3$  gegen unendlich gehen, so verbleibt nach Ausführung der Integration über  $dk_x, dk_y$  eine einfache Summe, welche man durch die Eulersche Summenformel in ein Integral umformen kann. Für den Korrekturterm (erster Ordnung)  $K$  erhält man

$$|K| = \frac{1}{2\pi \cdot L_1} \left\{ \sin^2(k_x \cdot x) \cdot (\epsilon_f - k_x) \right\}_{k_x=0}^{k_x=\sqrt{\epsilon_f} + \Delta k_x}$$

$$|K| = \frac{1}{2\pi L_1} \cdot \sin^2(k_x \cdot x) \cdot 2 \cdot \xi^{\frac{3}{2}} \cdot \Delta k_x$$

wobei  $\Delta k_x = \pi/L_1$  ist. Damit wird

$$K = o\left(\frac{1}{L_1}\right) = o\left(S/\sqrt{V}\right)$$

Somit ergäbe sich kein Korrekturterm zur Oberflächenspannung.

Wie verhält sich das zu unserer Fragestellung? Bei endlicher Mittelpunktsdichte  $\rho_\infty$ , von der ja die Oberflächenspannung abhängt, geht im limes  $L_2, L_3 \rightarrow \infty$  mit  $V$  auch  $N \rightarrow \infty$ , vergl. (21) mit (10). Somit hat Lanzl lediglich gezeigt, daß der Restterm für  $N \rightarrow \infty$  vernachlässigt werden kann (s. Einleitung, S. 3 und 4); er hat daher nicht gezeigt, mit welchem Tempo der Restterm asymptotisch verschwindet, sondern ihn einfach (durch Übergang zu  $N \rightarrow \infty$ ) gleich null gesetzt. Für endliche (wenn auch über alle Grenzen wachsende)  $L_1, L_2, L_3$ , d.h. für endliche Teilchenzahlen, für die wir uns in dieser Arbeit allein interessieren, da nur dann der Oberflächenanteil der Bindungsenergie im Verhältnis zum volumproportionalen Anteil nicht verschwindet, ist eine Abschätzung des Restterms im Vergleich zum Oberflächenterm ungleich schwieriger. Für die Abschätzung der  $L_1$ -Abhängigkeit von  $K$  ist der dimensionslose Faktor  $\sin^2(k_x \cdot x)$  irrelevant. An der oberen Grenze von  $k_x$  ersetzen wir ihn durch 1. Dadurch erhalten wir für endliche  $L_2$  und  $L_3$  gerade wieder die für den Restterm der Hill & Wheeler-Methode angegebene (zu schwache) Abschätzung. Resttermabschätzungen für große  $N$ , bis in die neueste Zeit in der mathematischen Literatur viel untersucht, sollen in einer weiteren Arbeit behandelt werden.

Für andere Typen von  $\mathcal{L}$  konnte  $R(\mathcal{L})$  bisher nicht befriedigend abgeschätzt werden.

### 3) Der Oberflächenterm

Hill & Wheeler geben  $H(N)$  in Abhängigkeit von Volumen, Oberfläche und Krümmung des Quaders  $\mathcal{L}$  an, d.h. in Potentialparametern (s. (31)) (im Unterschied zu den "Dichtegrößen" von Swiatecki). Damit haben sie nach Swiatecki (s. (16)) die auf Potentialgrößen bezogene Oberflächenspannung  $\sigma_p$  berechnet. Das Potential ist jedoch in unserem Modell lediglich Hilfsgröße zur Erzeugung des Dichteabfalls am Kernrand. Für nicht unendlich steile Potentialwände kann die Wahl der Lage der "Potentialoberfläche" recht willkürlich werden. Die La-

ge der Potentialoberfläche muß dann neu definiert werden; das ergibt möglicherweise auch einen neuen Zusammenhang zwischen Dichte- und Potentialoberfläche. Definieren wir die Kernoberfläche durch den Dichteverlauf am Kernrand <sup>14)</sup> wie bei Swiatecki, so wird für das Kernvolumen  $\hat{V}$

$$(32) \quad N = \frac{\epsilon_0^{3/2}}{6\pi^2} \cdot \hat{V} := \frac{\epsilon_0^{3/2}}{6\pi^2} \cdot V - \frac{\epsilon_0}{32\pi} \cdot S + \frac{\epsilon_0^{1/2}}{8\pi^2} \cdot L$$

Damit ist zugleich auch im Hill-Wheelerbild ein  $\hat{V}$  definiert und zwar ohne Kenntnis der Wellenfunktionen. Setzen wir (32) in (30) ein, so erhalten wir (ohne Berücksichtigung des Krümmungsterms) gerade (21), d.h. das gleiche Ergebnis wie das von Swiatecki. Die Übereinstimmung der Ergebnisse von Hill & Wheeler und von Swiatecki bei Bezug auf gleiches Kernvolumen ist eine gute gegenseitige Bestätigung beider Methoden.

Für Atomkerne genügend großer Teilchenzahl können wir annehmen, daß im Innern die Nukleonendichte ihren Sättigungswert wirklich erreicht. Diese Behauptung werden wir zudem in den Kap. III-V prüfen. Für diese Kerne ist es sinnvoll, neben N die theoretische Sättigungsdichte  $\rho_\infty$  in H als Parameter einzuführen und dafür die Variable Volumen zu eliminieren. Wir geben jetzt also H in Abhängigkeit von den Kernparametern N und  $\rho_\infty$  sowie von dimensionslosen Gestaltparametern (wie z.B.  $S/V^{2/3}$ ) an. Erst eine solche, weder von Swiatecki noch von Hill & Wheeler angegebene Darstellung der Energie in Abhängigkeit von Teilchenzahl, Mittelpunktsdichte und Gestaltparametern ist die genaue quantenmechanische Entsprechung der aus dem Tröpfchen-Modell abgeleiteten v. Weizsäckerformel (1), welche ja den mittleren Verlauf von H(A) unter der Annahme einer für alle Kerne gleichen Sättigungsdichte angibt <sup>15)</sup>.

Der Gestaltparameter  $S/V^{2/3}$  ist, bis auf Korrekturen höherer Näherungen, unabhängig von der Definition der Lage der Kernoberfläche, insbesondere ist  $S/V^{2/3} = \hat{S}/\hat{V}^{2/3}$ . Damit folgt aus (21) bzw. (31), d.h. als Ergebnis der Ableitungen sowohl von Swiatecki wie auch von Hill & Wheeler durch Umformung bzw. Substitution und Entwicklung

$$(33) \quad H(N, \rho_\infty, \text{Quader}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{3}{5} \cdot (6\pi^2 \rho_\infty)^{2/3} \cdot N + \frac{(6\pi^2)^{2/3}}{160\pi} (6\pi^2 \rho_\infty)^{1/3} \cdot \frac{S}{V^{1/3}} \cdot N^{2/3} + \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{30\pi} (6\pi^2 \rho_\infty)^{1/3} \cdot \frac{L}{V^{1/3}} \cdot N^{1/3} \right\}$$

Da der Fermigrenzimpuls  $k_F$  in diesem Modell gleich  $(6\pi^2 \rho_\infty)^{1/3}$  ist, so läßt sich (33) auch schreiben als

$$(33a) \quad H(N, \rho_\infty, \text{Quader}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{3}{5} \cdot R_p^2 \cdot N \cdot \left[ 1 + \frac{\pi}{16} \cdot \frac{S}{V^{1/3}} \cdot \frac{1}{(6\pi^2 N)^{1/3}} + \frac{1}{3} \cdot \frac{L}{V^{1/3}} \cdot \frac{1}{(6\pi^2 N)^{2/3}} \right] \right\}$$

Beachtung:  
 Jeweils der letzte Summand von (33) und (33a) ist falsch. Richtig müßte es heißen:  
 $(33) \quad H(N, \rho_\infty, \text{Quader}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{3}{5} \dots + \dots + (6\pi^2)^{1/3} \cdot (6\pi^2 \rho_\infty)^{2/3} \cdot N^{1/3} \cdot \left[ \frac{1}{640} \cdot \frac{S^2}{V^{2/3}} - \frac{1}{20\pi^2} \cdot \frac{L}{V^{1/3}} \right] \right\}$   
 $(33a) \quad \dots = \dots \left\{ \frac{3}{5} R_p^2 \cdot N \cdot \left[ 1 + \dots + \frac{1}{64} \cdot \frac{S^2}{V^{2/3}} - \frac{1}{3} \cdot \frac{L}{V^{1/3}} \right] \right\}$   
 Diese Beachtung ist zum folgenden noch weiter Gerüst, falls erfüllt

Wenn wir  $\rho_\infty$  als für alle Kerne gleich betrachten, d.h. für  $\rho_\infty = \text{const}$ , gibt uns (33) die nach dem Fermigas-Modell explizit berechneten Koeffizienten  $\alpha, \beta$  der v. Weizsäcker-Gleichung (1) für den Fall eines Quaders  $\mathcal{D}$  (als Kernform) an.

Numerisch erhält man, wenn man (33) versuchsweise auf ein kugelförmiges  $\mathcal{D}$  überträgt (dieses Vorgehen werden wir in Kap. IV rechtfertigen), mit der experimentellen Sättigungsdichte

$$\rho_\infty = \left( \frac{4\pi}{3} \cdot r_0^3 \right)^{-1}, \quad r_0 = 1,1 \text{ fermi,}$$

den Wert  $\beta = 14,35 \text{ MeV}$ , d.h. also 80% des empirischen Wertes der "spezifischen Oberflächenenergie"  $\beta_{\text{exp.}} = 17,8 \text{ MeV}$ . Für die Oberflächendicke  $t$  folgt aus der Dichteverteilung von Swiatecki (8)  $t = 0,67 \text{ fermi}$ , im Gegensatz zum empirischen Wert von  $t_{\text{exp.}} = 2,4 \text{ fermi}$ . Für den kinetischen Anteil der Gesamtenergie ergibt sich aus (33):

$\alpha_{\text{kin}} = +60,2 \text{ MeV}$ ; Es ist  $\alpha_{\text{gesamt, exp.}} = -15,75 \text{ MeV}$ . Für den Koeffizienten des Krümmungsterms in (33) erhalten wir als numerischen Wert  $20,6 \text{ MeV}$ .

Die sehr gute Übereinstimmung der empirischen, mit der aus dem Fermigas-Modell abgeleiteten spezifischen Oberflächenspannung besagt noch nicht, daß unser Modell für die betrachteten Potentiale mit senkrechten Wänden notwendig auch andere Kerngrößen besonders gut nähert, — das zeigt schon die sehr unrealistische Oberflächendicke  $t$  — (siehe aber die Verhältnisse bei abgeflachten Potentialen (s.u.)). Wir müssen das Modell mehr unter dem Gesichtspunkt betrachten, daß durch Einführung der Potentialwand (3) im Vergleich zur Kernmaterie ein Oberflächenterm in besonders einfacher Weise simuliert wird, welcher im Modell durch eine bestimmte Streckung des Eigenwertspektrums bei gleichem  $N$  (s. (31)) im Verhältnis zu einem in gleicher Weise erzeugten Kernmaterie-Spektrum, bzw. (und) durch einen unterschiedlich raschen Abfall der Wellenfunktionen in der Nähe der Potentialwand beschrieben wird.

Jedes Modell mit Einteilchenpotential, welches eine gleichartige (mittlere) Streckung des Spektrums zu erzeugen vermag, liefert auch eine gleiche Oberflächenspannung. So läßt sich z.B. mit einem rein quadratisch geschwindigkeitsabhängigen Potential durch geeignete Wahl des Koeffizienten ebenfalls eine geeignete Streckung des



Spektrums und damit der richtige Oberflächenterm gewinnen.

Auf der anderen Seite hat Swiatecki das äußere, rein ortsabhängige Potential  $V(x)$  (bei ebenfalls rein ortsabhängiger Zweiteilchenwechselwirkung, welche störungstheoretisch berücksichtigt wurde), als Näherung der Kernstruktur zu ernst genommen. Durch "realistischere" Wahl desselben, d.h. durch Abflachung der Wände, gelang ihm zwar eine ganz gute Simulierung des Volumeterms und der Oberflächendicke  $t$  (s.S.12), der Oberflächenterm wurde dabei aber schlechter. Er wird (nach Swiatecki) kleiner, für sehr flach ansteigende Potentiale sogar negativ.

Seyler & Blanchard (1962) kombinierten die beiden vorgenannten Effekte: sie wählten ein abgeflachtes äußeres rein ortsabhängiges Potential und ein rein quadratisch von der Relativgeschwindigkeit abhängiges Zweiteilchenpotential, welches störungstheoretisch berücksichtigt wurde. Durch passende Wahl der Koeffizienten erreichten sie eine ausgezeichnete Simulierung von Volumeterm, Oberflächendicke und Oberflächenspannung (letzterer ergab sich zu 80% des empirischen Wertes). Allerdings haben sie ihr Programm nur für  $N=1$ , d.h.  $A=4$  (Alpha-Teilchen) explizit mit einer elektronischen Rechenmaschine ausgeführt. Ein ähnlicher Weg könnte aber auch für  $N > 1$  beschrritten werden.

In unserem Modell ist nun noch ungeklärt, ob (33) unverändert auch für Kerne anderer Form und Gestalt (etwa für eine Kugel statt eines Quaders) gilt, d.h. vor allem, ob der zweite Koeffizient in (33) wirklich proportional zu  $S/V^{2/3}$  für alle denkbaren Kernformen ist, und nicht nur zufällig für den Quader die abgeleitete Abhängigkeit von  $(a_1 a_2 + a_2 a_3 + a_3 a_1) / (a_1 a_2 a_3)^{2/3}$  besteht, welchen Ausdruck wir dann lediglich  $S/V^{2/3}$  benannt haben. Ausserdem müssen wir prüfen, ob für kleine, den Massenzahlen der Atomkerne entsprechende Teilchenzahlen  $N$  die für das Fermigas-Modell in diesem Kapitel angegebenen Formeln wenigstens als Mittelwertaussagen gültig bleiben. Dies ist Gegenstand der folgenden Kapitel.

## KAPITEL II

### a). Einführung

In diesem Abschnitt geben wir zunächst eine kurze Hinführung auf die Fragestellung, von der wir in den folgenden Kapiteln ausgehen werden.

Ziel dieser Arbeit ist es, ausgehend vom Fermigasmodell, für die Oberflächenspannung einen expliziten Ausdruck anzugeben, dessen numerischer Wert nach Einsetzen experimentell zu bestimmender Kernparameter mit dem Betrag der empirisch bekannten Oberflächenspannung schwerer Atomkerne verglichen werden kann. Dieser ist dabei aus dem mittleren Verlauf der experimentell ermittelten Kernbindungsenergien mit Hilfe der Bethe-v. Weizsäckerformel gewonnen worden.

Im vorigen Kapitel hatten wir als einfachsten Fall einen Quader betrachtet, der als äußere räumliche Begrenzung unseres "idealen Fermigases ohne Spin" (d.h. eines Systems von identischen, untereinander wechselwirkungsfreien Fermionen) diente. Für den Grundzustand eines solchen Systems hatten wir für den Fall asymptotisch großer Teilchenzahlen je nach Wahl der abhängigen Variablen verschiedene explizite Ausdrücke für die Gesamtenergie  $H$  (und damit auch der Oberflächenspannung) angegeben. Von diesen Ausdrücken zeigt der durch (I(33)) gegebene die gleiche Art der Abhängigkeit von der Teilchenzahl  $N$  wie die halbempirische v. Weizsäckerformel I(1). Die Koeffizienten der Potenzen von  $N$  in I(33) und unter Ihnen der Ausdruck für die spezifische Oberflächenspannung des Systems hängen jedoch noch ab von seiner Sättigungsdichte  $\rho_\infty$  und von den Gestaltparametern ( $s = S/\sqrt{a_3}$ ,  $l = L/\sqrt{a_3}$ ) des Quaders. Versuchsweise hatten wir dann in I(33) anstelle der Gestaltparameter des Quaders diejenigen der Kugel und als Zahlenwert der Sättigungsdichte  $\rho_\infty$  den empirischen Wert für die Mittelpunktsdichte der Atomkerne eingesetzt (Für  $\rho_\infty$  ist im Modell kein bestimmter Wert ausgezeichnet, denn die Fermionen sollten ja nicht miteinander wechselwirken). Durch diese beiden Substitutionen erhielten wir aus dem Fermigas-Modell - hier genau aus I(33) - einen Zahlenwert für die spezifische

Modell-Oberflächenspannung, der von dem bekannten empirischen Wert der spezifischen Kernoberflächenspannung nur um 20% abwich.

Eine so gute Übereinstimmung muß bis jetzt reichlich zufällig erscheinen, weil wir bei dem beschriebenen Vorgehen eine Reihe von bisher unreflektierten Annahmen gemacht haben, nämlich:

- 1), daß die Gestaltparameter aller Kerne gleich denen der Kugel sind und alle Kerne gleiche Mittelpunktsdichte haben. Diese Annahmen betrachten wir hier in genügender Näherung als erfüllt. Sie wurden durch die Substitutionen in Kap. I bereits ausgenutzt.
- 2), daß der Ausdruck  $I(33)$  für asymptotisch große  $N$  die Gesamtenergie  $H$  in genügender Näherung auch dann richtig wiedergibt, wenn unser Fermionensystem von einer Kugel begrenzt wird. (Das würde bedeuten, daß für eine Kugel der Restterm gegenüber dem Oberflächenterm asymptotisch klein ist). Das ist eine sehr scharfe Annahme, denn wir haben  $I(33)$  zwar für den Quader angegeben, jedoch ohne eine genügend scharfe Resttermabschätzung, so daß es möglich erscheint, daß der Restterm des Quaders von gleicher Potenz in  $N$  wie der Oberflächenterm ist. Für die Kugel ist bisher weder eine Formel  $I(33)$  noch eine Resttermabschätzung hergeleitet worden.
- 3), eine Annahme über das Verhalten der Gesamtenergie  $H$  unseres Systems für kleine ("endliche") Teilchenzahlen: der empirische Wert der spezifischen Oberflächenspannung ist aus dem mittleren Verlauf der Kernbindungsenergien in Abhängigkeit von ihrer Nukleonenzahl gewonnen worden. Ein mit dem empirischen vergleichbarer theoretischer Wert für die Oberflächenspannung sollte in völlig gleicher Weise aus Modell-Systemen mit vergleichbaren endlichen Teilchenzahlen gewonnen werden, d.h.: um aus dem Fermigas-Modell für vergleichbare (kleine) Teilchenzahlen einen Wert für die Oberflächenspannung abzuleiten, dürfen nicht ohne weiteres für asymptotisch große Teilchenzahlen angegebene Ausdrücke (etwa  $I(33)$ ) benutzt werden. Vielmehr ist eine vergleichbare Oberflächenspannung aus dem mittleren Verlauf der Gesamtenergie  $H$  des Fermionensystems in Abhängigkeit von den gleichen Teilchenzahlen zu berechnen. Wir haben also die Annahme gemacht, daß der asymptotische Ausdruck  $I(33)$  den mittleren Verlauf von  $H$  für kleine (endliche) Werte von  $N$  mindestens in zweiter Näherung richtig wiedergibt.

4) eine Annahme über die Mittelpunktsdichte (Sättigungsdichte) des Fermionensystems für kleine Teilchenzahlen. Für den numerischen Vergleich hatten wir in I(33) für die theoretische Sättigungsdichte  $\rho_\infty$  von Systemen asymptotisch großer Teilchenzahlen den empirischen Mittelwert  $\rho_M$  der Mittelpunktsdichte der Atomkerne eingesetzt. I(33) ist jedoch, wie wir an der Herleitung von Swiatecki gesehen hatten, unter der Annahme abgeleitet, daß im Innern des Modellsystems die Sättigungsdichte  $\rho_\infty$  wirklich erreicht wird. Für Fermionensysteme geringer Teilchenzahlen muß dies geprüft werden. Aus der Annahme, daß  $\rho_\infty$  im Innern des Systems wirklich erreicht wird, folgte durch Integration über die Dichte der Fermionen - wie von Swiatecki angegeben - die asymptotische Formel für die Teilchenzahl  $N$  in Abhängigkeit von  $\rho_\infty$ , dem Volumen und den Gestaltparametern des begrenzenden Quaders. Daher ist die Annahme 4) identisch damit, daß die für asymptotisch große Teilchenzahlen (ohne Resttermabschätzung) angegebene Formel I(29) für  $N$  in Abhängigkeit von  $\rho_\infty, V, S$  und  $L$  des Quaders den mittleren Verlauf von  $N(\rho_\infty, V, S, L)$  für kleine Teilchenzahlen eines (von einer Kugel begrenzten) Fermionensystems richtig wiedergibt und zwar in mindestens zweiter Näherung.

Die drei letzten Annahmen fassen wir - etwas verallgemeinert - in zwei Hypothesen über das Fermigas-Modell zusammen.

Hypothese I: Die für den Fall, daß ein System von  $N$  identischen, untereinander wechselwirkungsfreien Fermionen von einem Quader nach außen hin begrenzt wird, asymptotisch für große Teilchenzahlen  $N$  angegebenen Formeln der Gesamtenergie und Teilchenzahl des Systems (I(29) - (33)) gelten für beliebig große und beliebig gestaltete Körper als Begrenzung des Fermionensystems und zwar in mindestens zweiter Näherung (d.h.: die Restterme aller vier Formeln sollen für beliebige Körper asymptotisch klein gegen den entsprechenden Oberflächenterm sein). Den Nachweis der Richtigkeit dieser Hypothese (oder eine Widerlegung) werden wir in dieser Arbeit nicht führen.

Hypothese II: Der mittlere Verlauf der Funktionen  $H$  bzw.  $N$  wird für beliebig gestaltete Körper durch die angegebenen asymptotischen Formeln auch für kleine (endliche) Werte der Variablen in zweiter Näherung richtig wiedergegeben, (d.h.: der jeweilige Restterm ist für kleine Teilchenzahlen wenigstens im Mittel klein gegen den ent-

sprechenden Wert des asymptotischen Ausdrucks).

In den folgenden Kapiteln soll nun die zweite Hypothese geprüft werden. Dazu müssen wir für möglichst verschieden gestaltete Testkörper Teilchenzahl und Energie für kleine Werte der unabhängigen Variablen berechnen und deren mittleren Verlauf mit den entsprechenden asymptotischen Ausdrücken vergleichen. Falls die Übereinstimmung beider für wachsende Werte der unabhängigen Variablen immer besser wird (und zwar nur relativ zur zunehmenden Größe des Oberflächenterms des asymptotischen Ausdrucks), so wird das einen starken Anhalt, wenn auch keinen Beweis dafür geben, ob die erste Hypothese anzunehmen sei.

Den genauen Weg der Prüfung und die genaue Formulierung der zweiten Hypothese geben wir jetzt an.

### b). Formulierung der Hypothese II

Zunächst werden wir die Abzählmethode für Körper beliebiger Gestalt formulieren, - sie wurde ja im ersten Kapitel nur speziell für den Fall eines Quaders angegeben-, um dann in deren Terminologie den Inhalt der Hypothese II genau zu präzisieren.

#### Die Abzählmethode für ein beliebiges Grundgebiet

Ein einfach zusammenhängendes Gebiet  $\mathcal{L}$  vom Volumen  $V$  sei begrenzt von der Oberfläche  $\mathcal{S}$  vom Inhalt  $S$ , welche aus höchstens endlich vielen Flächenstücken stetiger Krümmung bestehen soll. Als Beispiel nennen wir Kugel, Zylinder, Polyeder und Ellipsoid. In einem solchen Gebiet  $\mathcal{L}$  befinde sich ein "ideales Fermigas ohne Spin", d.h. ein System von  $N$  identischen wechselwirkungsfreien Fermionen. Dieses System sei durch das äußere Potential

$$(1) \quad V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } \vec{r} \in \mathcal{L} \\ +\infty & \text{für } \vec{r} \notin \mathcal{L} \end{cases}$$

gebunden. Die stationäre Schrödingergleichung dieses <sup>Systemes</sup> Gebietes zerfällt dann in  $N$  "freie Schwingungsgleichungen" für das Gebiet  $\mathcal{L}$ .

$$(2) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \varphi_{nv}(\vec{r}) = \epsilon_{nv} \cdot \varphi_{nv}(\vec{r})$$

$\vec{w} \in \mathcal{L}$  , mit den Nebenbedingungen

$$(3) \quad \varphi_{nv}(\vec{w}) = 0 \quad \text{für } \vec{w} \in \mathcal{Y} ,$$

d.h. das Potential (1) wirkt auf die Wellenfunktionen  $\varphi_{nv}$  genau so wie eine Dirichlet-Randbedingung (3).

Die Nummerierung (n) der Eigenwerte  $h_{nv}$  sei so gewählt, daß  $h_n < h_{n+1}$  ist. Der Index  $v=1,2,\dots,F$ ; unterscheidet die miteinander entarteten Eigenschwingungen, d.h.  $F(h_n)$  ist die Vielfachheit des n-ten Niveaus:  $h_n \approx h_{n,1} = h_{n,2} = \dots = h_{n,F(h_n)}$ .  $F(h_n)$  nennen wir auch den Entartungsgrad des Eigenwertes  $h_n$  (obgleich in der Literatur meist (F-1) als Entartungsgrad bezeichnet wird). Es gelte ferner

$$\langle nv | nv' \rangle = 0 \quad \text{für } v \neq v' .$$

Jeder Zustand  $|nv\rangle$  ist höchstens von einem Fermion unseres Systems besetzt. Wir beschränken uns auf den Grundzustand, d.h. den absoluten Temperatur-Nullpunkt unseres idealen Fermigases. Die Eigenwerte  $h_{nv}$  der N besetzten Zustände sind dann gerade die tiefstmöglichen. Der höchste <sup>besetzt</sup> Eigenwert ist gleich der "Fermigrenzenergie"  $h_f$ .

Die spezielle Gestalt irgendeines vorgegebenen Körpers äußert sich im Eigenwertspektrum durch "Schalenstruktureffekte", d.h. die genaue Lage und Entartung der einzelnen Eigenwerte sind bestimmt durch Gestalt und Größe des Körpers. Auch die genauen Werte der Fermigrenzenergie  $h_f$  und der Gesamtenergie  $H$  - wobei letztere als Summe der Eigenwerte der N besetzten Zustände definiert sei - hängen demnach nicht nur von N, sondern eben auch von der genauen Form des zugrundegelegten Körpers ab; auch der Verlauf von  $H(N)$  und  $h_f(N)$  zeigt für jeden bestimmten Körper Schalenstruktureffekte.

In der Hypothese II, die wir im vorigen Abschnitt aufgestellt hatten, behaupten wir nun aber, daß zwar nicht die einzelnen Werte, wohl aber der mittlere Verlauf von  $H$  bzw.  $h_f$  sich für beliebig gestaltete Körper durch Formeln beschreiben läßt, die nicht mehr von der genauen Gestalt, sondern nur noch vom Volumen und Gestaltparametern (z.B.  $s$  und  $l$ ) des Körpers abhängen, welche als Integrale über  $\mathcal{L}$  bzw. dessen Oberfläche  $\mathcal{Y}$  definiert, eben Eigenschaften von "ganz  $\mathcal{L}$ " darstellen.

Einige Funktionen, die wir jetzt aus dem Spektrum und der Definition von  $H$  und  $h_f$  ableiten, werden uns gestatten, die Hypothese II formelmäßig zu präzisieren. Wir hatten Gesamtenergie  $H$  und Fermi-

grenzenergie  $h_f$  definiert für ein System vorgegebener Teilchenzahl  $N$  in irgendeinem bestimmten Körper  $\mathcal{L}$ . Wir schreiben kurz  $H(N, \mathcal{L})$  bzw.  $h_f(N, \mathcal{L})$ .

Bei festem  $\mathcal{L}$  wirkt sich die Entartung des Eigenwertes  $h_N = h_f$  so aus, daß zwar  $H(N)$  eineindeutig ist, aber  $h_f(N)$  nur eindeutig.  $F(h_f)$  Werten von  $N$  ist derselbe Wert  $h_f$  zugeordnet. Daher ist die Umkehrung  $N(h_f)$  mehrdeutig (genau  $F$ -deutig). Da zu jedem  $N$  eineindeutig ein Wert  $H(N)$  gehört, können wir auch eine Zuordnung  $h_f(H)$  definieren, welche aus  $h_f(N)$  durch Einsetzen von  $N(H)$  entsteht.  $h_f(H)$  ist wie  $h_f(N)$  eindeutig, die Umkehrung dagegen mehrdeutig und zwar genau  $F(h_f)$ -fach. Die Funktionen  $H(N)$ ,  $H(h_f)$  und  $N(h_f)$  sind Zuordnungen konkreter Zahlenmengen; die Werte von  $h_f$  durchlaufen die Eigenwerte des ganzen Spektrums,  $N$  durchläuft alle natürlichen Zahlen und  $H$  die Partialsummen der Eigenwerte. In Abb. (3) haben wir für ein willkürlich festgelegtes Spektrum einen kleinen Ausschnitt der Zuordnungen  $N(h_f)$ ,  $H(h_f)$  und  $H(N)$  graphisch dargestellt.

In einer Klasse  $\mathcal{M}$  von solchen Körpern  $\mathcal{L}_i$ , welche aus irgendeinem vorgegebenen Körper  $\mathcal{L}$  durch alle denkbaren Ähnlichkeits-Transformationen hervorgehen, haben alle Körper gleiche Gestalt. Sie unterscheiden sich nur durch ihr Volumen. Jede Funktion, welche von der Wahl von  $\mathcal{L}$  abhängt, kann also geschrieben werden als Funktion von der Gestalt des gewählten  $\mathcal{L}$  und dessen Volumen; wir schreiben  $f(\mathcal{L}) = f(V, B)$ .  $B$  wählt dabei die (zur Gestalt von  $\mathcal{L}$  gehörige) Klasse  $\mathcal{M}(B)$  aus; die Angabe von  $V$  legt dann den Körper innerhalb seiner Klasse fest. So wird z. B. aus  $h_f(N, \mathcal{L}) \rightarrow h_f(N, V, B)$ . Die Umkehrung dieser Relation  $N(h_f, V, B)$  haben wir schon betrachtet. Eine andere Umkehrung, nämlich  $V(N, h_f, B)$ , stellt nun eine Beziehung zwischen den einzelnen Körpern einer Klasse dar: zu gegebenem  $N$  und  $h_f$  wird aus der Klasse  $\mathcal{M}(B)$  derjenige Körper herausgesucht, für den  $h_f$  die Fermigrenzenergie zur Teilchenzahl  $N$  ist. Substituiert man nun  $V(N, h_f, B)$  in  $H(N, V, B)$ , so erhalten wir  $H(N, h_f, B)$ . In dieser Zuordnung gehört zu jedem Wertepaar  $(N, h_f)$  ein eigener Wert von  $V$ . Wir haben die Werte von  $H(N, h_f, B)$  aus dem willkürlich für Abb. (2) gewählten Spektrum für ein festes  $h_f$  berechnet und diese Werte ebenfalls in Abb. (2) eingetragen. [Zur Berechnung muß das Spektrum nicht nur für  $\mathcal{L}$ , sondern für alle Körper der Klasse bekannt sein, siehe hierüber Abschnitt d)].

Bei vorgegebenem  $B$  haben wir also vier z. t. diskrete Variable, nämlich  $H, N, h_f$  und  $V$  sowie zwei (definierende) Verknüpfungen zwischen ihnen. (Beispiel: die Definition von  $H$  und  $h_f$  bei vorgegebenem  $N$  und  $v$ ). Damit haben wir, wenn wir Umkehrungen von Zuordnungen nicht gesondert zählen und annehmen, daß alle Zuordnungen drei Variable enthalten, nur  $\binom{4}{3} = 4$  verschiedene Funktionen. Von diesen vier sind je zwei unabhängig, d. h. aus irgend zwei von ihnen lassen sich die anderen beiden (über die zwei definierenden Verknüpfungen) herleiten. Diese vier möglichen verschiedenen Zuordnungen<sup>1)</sup> lauten in der eindeutigen Form (bei vorgegebenem  $B$ )

$$(4) \quad h_f(N), \quad h_f(H, V), \quad H(N, V) \quad \text{und} \quad h_f(N, V),$$

wir haben also als Darstellungen für Teilchenzahl und Energie

$$(4a) \quad H(N, h_f), \quad H(h_f, V), \quad H(N, V) \quad \text{und} \quad N(h_f, V).$$

Ein Vergleich dieser Zuordnungen (4) mit den Ausdrücken I (29)-(33) zeigt nun, daß wir in Kap. I genau für diese vier Zuordnungen explizite Ausdrücke angegeben hatten, welche für den Fall der Gestalt eines Quaders und für asymptotisch große Werte der Variablen die entsprechenden Funktionen (4) nähern sollten. Wir bezeichnen diese expliziten Ausdrücke aus Kap. I für das folgende kurz durch

$$(5) \quad \beta(N, h_f, s, l), \quad \beta(h_f, V, s, l), \quad \beta(N, V, s, l) \quad \text{und} \quad \alpha(h_f, V, s, l)$$

dabei seien zunächst  $s$  und  $l$  die Gestaltparameter eines Quaders.

Die Hypothese II besagt nun, daß der mittlere Verlauf der Funktionen (4) unabhängig von der genauen Gestalt von  $\mathcal{L}$  ist, sondern, daß er nur von den Gestaltparametern  $s$  und  $l$  abhängt und daß für beliebige  $B$  der mittlere Verlauf jeder der Funktionen (4) in mindestens zweiter Näherung gerade durch den entsprechenden Ausdruck (5) gegeben ist, wobei in (5) jetzt für  $s$  und  $l$  die Gestaltparameter der Gestalt von  $\mathcal{L}$  einzusetzen sind. Wir schreiben kurz<sup>1)</sup>

$$(6) \quad (a) \quad \overline{H} = \beta, \quad (b) \quad \overline{N} = \alpha,$$

wobei wir die Bestimmung des mittleren Verlaufes durch einen Querstrich andeuten (über die genaue Definition desselben siehe Abschnitte)).

Die Aufgabe, aus irgend zwei von den Ausdrücken (5) die beiden anderen herzuleiten, ist durch Substitution und daran anschließende



Reihenentwicklung für große Werte der (neuen) unabhängigen Variablen zu lösen. Auf diesem Weg hatten wir auch in Kap. I aus (29) und (30) die Ausdrücke (31) und (33) gewonnen.

Für die numerische Prüfung der Hypothese II in der Form (6) steht es uns nach dem gesagten nun frei, irgend zwei Funktionen aus (4) nach Mittelwertbildung mit den entsprechenden Ausdrücken aus (5) zu vergleichen. Das Ergebnis einer solchen Prüfung der Hypothese II entscheidet dann in jedem Falle auch die Frage der Verwendbarkeit von  $h_f(N, h_f, s, l)$  als Näherung für  $\bar{H}(N, h_f, B)$  für den Vergleich von Eigenschaften des Fermigas-Modells mit experimentell ermittelten Eigenschaften der Atomkerne. Wir hatten ja in Kap. I gesehen, daß allein die Zuordnung  $h(N, h_f, B)$  im Fermigas-Modell das Analogon zur Weizsäckerformel darstellt (15).

Als nächstes sei nun die Methodik der Prüfung der Hypothese II dargestellt.

### c) Methodik

Während man für asymptotisch große, (und das heißt für unendlich viele) Werte der Variablen erwarten kann, daß es möglich ist, die Hypothese II für beliebige Gestalt des Grundgebietes mathematisch zu beweisen, ist für kleine (endliche) Variablenwerte (und das bedeutet zugleich für endlich viele Werte) ein mathematischer Beweis prinzipiell unmöglich durch die gestaltspezifischen Schalenstruktureffekte der Spektren, über die willkürfreie (mathematische) Mittelwertaussagen eben erst asymptotisch gemacht werden können.

Für kleine (endliche) Teilchenzahlen (bzw. Variablenwerte) und damit notwendigerweise für ein Variablenintervall endlicher Länge, kann eine Prüfung der Hypothese II nur durch exemplarischen Vergleich an Beispielen erfolgen: für bestimmte ausgewählte Körper sind das Spektrum und aus ihm durch Summation die exakten Zuordnungen (4) zu berechnen und deren mittlerer Verlauf in einem Intervall mit dem Verlauf der zugehörigen Funktion aus (5) zu vergleichen.

Hat eine solche exemplarische Prüfung für einige Körper sehr verschiedener Gestalt zu einem gleichartigen Ergebnis geführt, so ist uns das ein Argument für die Vermutung, daß ein analoges Ergebnis

auch für Körper von beliebig anderer Gestalt zu erhalten ist, d.h., dass das Ergebnis i.w. gestaltungunabhängig ist.

Auf zwei Wegen werden wir für die Probekörper Würfel, Kugel und für einen speziellen Zylinder eine solche Prüfung durchführen. Die beiden Wege unterscheiden sich durch ihre Fragestellung:

a) Zunächst fragen wir, ob die Werte der asymptotischen Ausdrücke numerisch brauchbar sind als Näherung der exakten Werte. Dabei betrachten wir nur so kleine Variablenwerte, die ihrem Betrage nach Teilchenzahlen entsprechen, die mit denen der Atomkerne vergleichbar sind. Diese Frage werden wir für unsere drei Testkörper nach Betrachtung graphischer Darstellungen beantworten und zwar werden wir für  $N=60$  ( $\sim A=240$ ) alle Werte der exakten Zuordnungen (4) der drei Testkörper in mehreren Abbildungen darstellen sowie zum Vergleich den Verlauf der zugehörigen asymptotischen Ausdrücke (5) (mit den Gestaltparametern der Testkörper) eintragen. In diese Abb. wird ausserdem noch der Verlauf der einzelnen Summanden der asymptotischen Ausdrücke, nämlich Volum-, Oberflächen- und Krümmungsterm eingetragen. Aus einer Betrachtung dieser graphischen Darstellungen lässt sich (für das betrachtete Variablenintervall) gewinnen:

1. eine unmittelbare Veranschaulichung der Art der Schalenstruktureffekte, d.h. der Einwirkung der speziellen Gestalt eines Testkörpers auf die Zuordnungen (4),

2. eine Übersicht über die gegenseitigen Grössenverhältnisse der einzelnen Terme der asymptotischen Ausdrücke und

3. ein unmittelbarer Vergleich des Verlaufes der exakten Werte mit dem der asymptotischen Kurven. Damit lässt sich die Frage beantworten, ob es für die praktische Anwendung des Fermigas-Modelles (etwa als Näherung der Kernstruktur) sinnvoll ist, die asymptotischen Formeln in diesem Variablenbereich als numerische Näherung der exakten Werte zu verwenden. ("Kleinheit des Restterms gegenüber dem Betrag des exakten Wertes").

b) Nur rechnerisch ist die wesentlich präzisere Frage zu lösen, ob für kleine Beträge der Variablen der mittlere Verlauf der Zuordnungen genau durch die asymptotischen Formeln beschrieben wird, oder ob z.B. eine Änderung des Koeffizienten des Oberflächenterms eine bessere Übereinstimmung beider herbeiführen würde.

Der mittlere Verlauf selbst wird durch eine Ausgleichsrechnung bestimmt. Diese wird ausführlich in Abschnitt e) dargestellt werden. Wir geben hier nur einen Überblick. Als Gleichung für die Ausgleichskurve, welche den mittleren Verlauf der exakten Werte wiedergeben soll, benutzen wir den entsprechenden asymptotischen Ausdruck, jedoch mit noch unbestimmten Koeffizienten des zweiten und dritten Terms. Diese Koeffizienten werden dann nach der Gaußschen Methode der "kleinsten Abstandsquadratsumme" ermittelt.

Auf Grund der gestaltbedingten starken Streuungen der exakten Einzelwerte um ihren mittleren Verlauf ("Schalenstruktureffekte") und der (für eine numerische Ausgleichsrechnung notwendigerweise) endlichen Länge des Ausgleichsintervalls sind die Koeffizienten, die man für die Ausgleichskurve nach dieser Methode erhält, mit einer gewissen Zufälligkeit behaftet. Dies läßt sich (unter der Annahme der Normalverteilung der Abweichungen der exakten Werte von der Ausgleichskurve) durch Angabe eines mittleren statistischen Fehlers quantitativ erfassen. Dieser statistische Fehler ist also proportional zur Streuung der Einzelwerte, und umgekehrt proportional zur Zahl der zur Mittelung verwendeten Einzelwerte und damit auch zur Länge des Mittelungsintervalles. Daher werden wir, um eine möglichst genaue Antwort auf die zweite Frage zu erhalten, den Ausgleichsrechnungen möglichst große Intervalle zugrunde legen. Wir haben bei allen drei Testkörpern bis zu etwa  $N=1000$  ( $\sim \Lambda=4000$ ) gerechnet.

Der Vergleich der Ausgleichsfunktionskoeffizienten mit denen der asymptotischen Formeln wird dann eine Antwort liefern auf unsere Frage, in welcher Näherung und mit welcher statistischen Sicherheit die asymptotischen Formeln im berechneten Intervall den mittleren Verlauf der exakten Zuordnungen richtig wiedergeben. Zugleich bedeutet uns das Ergebnis einen Hinweis darauf, ob die asymptotischen Formeln für asymptotisch große Teilchenzahlen als numerische Näherung brauchbar sein könnten oder nicht (d.h.: ob der relative Fehler asymptotisch klein gegen den Oberflächenterm wird).

Theoretisch müßten wir, da die Funktionen (4) von B sowie von zwei weiteren Variablen  $(s, (4))$  abhängen, eine solche Prüfung der Hypothese II ..

1. für verschiedene Gestaltformen und
2. bei jeder vorgegebenen Gestalt für eine einfach unendliche Schar

von einparametrischen Kurven vornehmen.

Im folgenden Abschnitt werden wir jedoch zeigen, daß sich jede Funktion (4) in zwei einparametrische Funktionen separieren läßt, von denen jeweils eine bekannt ist. Für jede Gestaltform reduziert sich dadurch die Prüfung der Hypothese II auf den Vergleich von nur zwei einparametrischen Kurvenpaaren. Damit wird der für die Prüfung der Hypothese II erforderliche Aufwand an numerischer Rechnung überhaupt erst erträglich.

d) Ähnlichkeitstransformation

In diesem Abschnitt wird für vorgegebenes B (d.h. für eine vorgegebene Klasse von Körpern  $\mathfrak{L}$ ) gezeigt, daß sich die zweiparametrischen Zuordnungen (4) durch Größen faktorisieren lassen, die nur noch von je einer Variablen abhängen; es ist mit

(vgl. (4)):

$$y_f := \sqrt[2/3]{r_f} \cdot \frac{2m}{h}$$

(7) 
$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(a)} \quad r_f(N, H) = H \cdot \frac{1}{L(N)} \\ \text{(b)} \quad r_f(H, V) = \frac{1}{\sqrt[2/3]} \cdot y_f(H) \cdot \frac{h}{2m} \\ \text{(c)} \quad H(N, V) = \frac{1}{\sqrt[2/3]} \cdot K(N) \cdot \frac{h}{2m} \\ \text{(d)} \quad r_f(N, V) = \frac{1}{\sqrt[2/3]} \cdot y_f(N) \cdot \frac{h}{2m} \end{array} \right.$$

Zwischen den physikalischen Größen  $y_f, h_f, N, H, K$  und  $L$ , welche für unser System nur diskrete Werte annehmen, sollen also die Größengleichungen (vgl. (4a))

(8) 
$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(a)} \quad y_f := \sqrt[2/3]{r_f} \cdot \frac{2m}{h} \\ \text{(b)} \quad N = N \\ \text{(c)} \quad H = \frac{1}{\sqrt[2/3]} \cdot K \cdot \frac{h}{2m} \\ \text{(d)} \quad H = r_f \cdot L \end{array} \right. \quad \text{d. h. } N(r_f, V) = N(y_f)$$

gelten. Dabei hängen  $h_f$  und  $H$  von zwei Variablen; dagegen, wie wir sehen werden,  $N, K$  und  $L$  nur von einer Variablen (z.B.  $y_f$  oder  $N$ ) ab.

Zum Beweis werden wir (8b) und (8c) durch Ausführung einer

Ähnlichkeitstransformation bestätigen. Durch einfache Substitutionen erhalten wir dann auch (8d) sowie alle Relationen (7). Zugleich ergeben sich Darstellungen für die Größen  $K$  und  $L$ .

Sei  $d > 0$  eine noch wählbare dimensionslose Zahl und sei

$$(9) \quad \vec{q} := \vec{k} / d$$

so wird aus der freien Schrödingergleichung (2) nach Substitution von  $\vec{k}$  durch  $\vec{q}$  mit den Abkürzungen

$$(10) \quad \bar{\epsilon}_n := \frac{2m}{\hbar^2} \cdot h_n := \frac{2m}{\hbar^2} \cdot h_n \cdot d^2$$

(also  $\bar{\epsilon}_n = \epsilon_n \cdot d^2$  mit  $\epsilon_n$  aus Kap. I) die freie Schwingungsgleichung

$$(11a) \quad \frac{\partial^2}{\partial \vec{q}^2} \varphi_{nv}(\vec{q}) + \bar{\epsilon}_n \cdot \varphi_{nv}(\vec{q}) = 0$$

bzw. die freie Schrödingergleichung

$$(11b) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{q}^2} \varphi_{nv}(\vec{q}) + h_n \cdot \varphi_{nv}(\vec{q}) = 0$$

Es sei nun speziell

$$(12) \quad d^3 = V / v$$

gewählt, wobei  $v$  das Volumen eines beliebig aber fest vorgegebenen Körpers der Klasse  $\mathcal{M}(\mathcal{L})$  sei; wir werden diesen Körper z.B. in Kap. III so wählen, daß  $v = \pi$  wird. Dabei ist  $v$  jeweils mit dem gleichen Maß wie  $V$  zu messen.

Aus dem Körper  $\mathcal{L}$  vom Volumen  $V$  ist nach der Ähnlichkeitstransformation (9) mit (12) ein Körper  $\mathcal{L}_v$  vom Volumen  $v$  geworden, der natürlich zur gleichen Klasse wie  $\mathcal{L}$  gehört, also gleiche Gestalt wie  $\mathcal{L}$  hat. Die Gestaltparameter von  $\mathcal{L}_v$  und von  $\mathcal{L}$  sind gleich; sei  $\bar{s}$  der Inhalt und  $\bar{l}$  die mittlere/ totale Krümmung der Oberfläche von  $\mathcal{L}_v$ , so gilt demnach

$$(13) \quad s = S / v^{2/3} = \bar{s} / v^{2/3}; \quad l = L / v^{1/3} = \bar{l} / v^{1/3}$$

Die Eigenwerte der freien Schrödingergleichung (16) für das Innengebiet  $\mathcal{L}_v$  lauten nach (10)

$$(14) \quad h_n := h_n \cdot d^2$$

Mit (12) haben wir damit die Beziehung

$$(15) \quad v^{2/3} \cdot h_n = V^{2/3} \cdot h_n =: y_n \cdot \frac{\hbar^2}{2m}$$

Das Spektrum von  $\mathcal{L}$  geht also durch eine einfache Streckung (mit dem Faktor  $1/d^2$ ) aus dem von  $\mathcal{L}_v$  hervor. Aus den Zuordnungen (4) irgendeines vorgegebenen Körpers einer Klasse  $\mathcal{M}$  sind damit auch alle Zuordnungen (4) irgendeines Körpers der Klasse berechenbar.

Aus der Frage nach der Gesamtenergie  $H$  eines Systems von  $N$  Fermionen in einem Innengebiet  $\mathcal{L}$  wird nach der Transformation die äquivalente Frage nach der Gesamtenergie des gleichen Fermionensystems, welches sich jedoch jetzt im Innengebiet  $\mathcal{L}_v$  befindet (bzw. die äquivalente Frage nach der Summe der  $N$  tiefsten entarteten Eigenwerte der freien Schwingungsgleichung (11a)).

Wegen (14) gilt auch für die Summe  $H$  der  $N$  tiefsten (entarteten) Eigenwerte

$$(16) \quad H(N, V) = \frac{1}{d^2} \cdot H(N, v)$$

$v$  ist eine feste Zahl, also gilt mit (12) auch

$$(17) \quad V^{2/3} \cdot H(N, V) = v^{2/3} \cdot H(N, v) =: K(N)$$

Die Größe  $K$  muß unabhängig von  $v$  und  $V$  sein, weil (17) für beliebigen  $V$  bei festem  $v$  gilt. Also hängt  $K$  nur von  $N$  ab und wir haben (8c) bewiesen.

Im Spektrum von  $\mathcal{L}$  liegen unterhalb der Fermigrenzenergie  $h_f$  wegen (14) gleich viele entartete Eigenwerte wie unter der Fermikante  $h_f := \epsilon_f \cdot d^2$  im Spektrum von  $\mathcal{L}_v$ . Es ist also

$$(18) \quad \begin{cases} (a) & N(\epsilon_f, V) = N(h_f, v) \\ (b) & = N(\epsilon_f V^{2/3}, v) \\ (c) & = N(y_f) \end{cases}$$

Da  $v$  eine feste Zahl ist, (18b) aber für beliebiges  $V$  gilt, hängt die Teilchenzahl  $N$  offenbar nur von  $y_f$  ab. Damit ist auch die Relation (8b) abgeleitet (18c).

Durch Substitution erhalten wir aus (16) - (18) die übrigen Beziehungen (7) bzw. (8): setzen wir (18c) in (17) ein, so erhalten wir durch Übergang zu neuen unabhängigen Variablen einerseits

$$K(N) = \frac{2m}{k} V^{2/3} \cdot H(N(\epsilon_f, V), V) = V^{2/3} \cdot H(\epsilon_f, V) \frac{2m}{k}$$

andererseits

$$K(N) = K(N(y_f)) = K(y_f)$$

also

$$(19) \quad H(h_f, V) = \frac{1}{\sqrt{23}} \cdot K(y_f) \cdot \frac{h_f^2}{23}$$

Damit ist (8c) in anderen Variablen nochmals abgeleitet. Eine Umkehrung liefert (7b).

Zuletzt zeigen wir (8d): durch Ersetzen von  $V$  durch  $y_f$  und  $h_f$  mittels (15) auf beiden Seiten der Gleichung (19) erhalten wir zunächst

$$H(h_f, V) = H(h_f, y_f) = \frac{h_f}{y_f} \cdot K(y_f)$$

Durch Einsetzen der Umkehrung von (18c), d.h.  $y_f = y_f(N)$  ergibt sich

$$H(h_f, y_f(N)) = H(h_f, N) = h_f \cdot K(y_f(N)) / y_f(N)$$

also haben wir

$$(20) \quad H(h_f, N) = h_f \cdot \frac{K(N)}{y_f(N)} =: h_f \cdot L(N)$$

d.i. die Gleichung (8d). Damit haben wir nun zugleich Darstellungen von drei Größen, nämlich  $N, K$  und  $L$  angegeben, die nur von einer Variablen abhängen.

Um die Hypothese II für eine ganze Klasse von Gebieten numerisch zu prüfen, genügt es also, für irgendeinen ausgewählten Repräsentanten  $\mathcal{L}_v$  der Klasse den mittleren Verlauf von zwei der vier einparametrischen Zuordnungen  $N(y_f)$ ,  $K(y_f)$ ,  $K(N)$  und  $L(N)$  mit den entsprechenden asymptotischen Ausdrücken zu vergleichen. Diese gegen Ähnlichkeitstransformationen im Ortsraum invarianten Ausdrücke lauten:

$$(21) \quad \mathcal{N}(y_f, s, \ell) := \frac{y_f^{3/2}}{6\pi^2} - \frac{s \cdot y_f}{16\pi} + \frac{\ell \cdot y_f^{1/2}}{8\pi^2}$$

$$(22) \quad \mathcal{K}(y_f, s, \ell) := \frac{y_f^{5/2}}{10\pi^2} - \frac{s \cdot y_f^2}{32\pi} + \frac{\ell \cdot y_f^{3/2}}{24\pi^2}$$

$$(23) \quad \mathcal{K}(N, s, \ell) := \frac{(6\pi^2 N)^{5/3}}{10\pi^2} + \frac{s \cdot (6\pi^2 N)^{4/3}}{32\pi} + 6\pi^2 N \left( \frac{1}{128} s^2 - \frac{1}{24\pi^2} \ell \right)$$

$$(24) \quad \mathcal{L}(N, s, \ell) := \frac{\mathcal{K}(N, s, \ell)}{y_f(\mathcal{N}, s, \ell)} = \frac{3}{5} N + \frac{(6\pi^2 N)^{2/3}}{160\pi} \cdot s \cdot N^{2/3} + \frac{(6\pi^2)^{2/3}}{30\pi^2} \cdot \ell N^{1/3}$$

Bei der numerischen Prüfung der Hypothese II an den drei Testkörpern gehen wir daher wie folgt vor: für ein Gebiet von der Gestalt des Testkörpers und einem vorgegebenen Volumen  $v$  (bzw. in der Darstellung (20) für ein vorgegebenes  $h_f$ ) berechnen wir das Spektrum und daraus die Zuordnungen für die Teilchenzahl und Energie (4). Ihren mittleren Verlauf vergleichen wir mit den entsprechenden asymptotischen Ausdrücken.

Auf Grund der Gleichungen (18) - (20) ist damit auch der mittlere Verlauf der Größen  $N, K$  und  $L$  mit den Ausdrücken (21)-(24) verglichen und daher der Vergleich auch schon für alle Körper der Klasse des Testkörpers ausgeführt.

### e) Mittelwerte und Streuung von $N$ und $H$

Der mittlere Verlauf der Größen  $N$  und  $H$  soll (für kleine Werte der unabhängigen Variablen) mit dem Verlauf der Werte der expliziten Ausdrücke  $\mathcal{N}$  und  $\mathcal{H}$  (die für asymptotisch große Variablenwerte angegeben worden waren) verglichen werden.

Dazu benötigen wir ein Ausgleichsverfahren, welches aus den streuenden Einzelwerten von  $N$  und  $H$  eine Ausgleichsfunktion (-Kurve) zu berechnen gestattet, die wir dann als mittleren Verlauf  $\bar{N}$  bzw.  $\bar{H}$  der Größen  $N$  bzw.  $H$  definieren können.

Sowohl das Verfahren wie auch der Typ der Ausgleichsfunktion sind mathematisch nicht eindeutig festgelegt: der "mittlere Verlauf" einer beschränkten Menge von Punkten, die in einem endlichen Bereich liegen, ist mathematisch nicht willkürfrei definierbar.

Für eine "natürliche" Definition des mittleren Verlaufes endlich vieler streuender Werte in einem endlich langen Intervall stellen wir das Ausgleichsverfahren für einen speziellen Typ der Ausgleichsfunktion dar. Es wird anschließend verglichen mit einigen anderen vorgeschlagenen Mittelungsverfahren, die in unserem Falle i. a. als Näherungen des "natürlichen" Verlaufes betrachtet werden können. In bestimmten Fällen jedoch können die mit verschiedenen Verfahren gewonnenen Ergebnisse erheblich voneinander abweichen. Die Durchführung des Vergleiches wird einige allgemeine Eigenschaften der Größen  $N$  und  $H$  ergeben, die zur Bewertung der Ergebnisse nützlich sind.

### Ausgleichsrechnung

Allgemeines Verfahren:

Gegeben seien  $m$  Wertepaare  $z(x_n)$ ,  $n=1,2,3,\dots,m$ ; alle  $m$  Werte  $x_n$  sollen in einem Intervall  $I=(x_e, x_r]$  endlicher Länge liegen, also  $x_e \leq x_n \leq x_r$ ,  $|x_e - x_r| < \infty$ .

Der mittlere Verlauf der Zuordnungen  $z(x_n)$  im Intervall  $I$  sei durch die Ausgleichsfunktion  $\bar{z}(x)$  repräsentiert. Die Wahl der funktionalen Abhängigkeit (d.h. des Typs der Funktion)  $\bar{z}(x)$  ist freige-



stellt, soll aber mindestens einen freien, noch unbestimmten Parameter enthalten. Diese Parameter sollen nun nach der Gauß'schen Methode der "kleinsten Quadrate" gewonnen werden, d.h. aus der Bedingung, daß die Summe der Quadrate der Differenzen von  $z(x_n)$  und  $\bar{z}(x_n)$  für das Intervall zum Minimum gemacht wird.

Benutzen wir die in der mathematischen Statistik übliche Bezeichnung

$$(25) \quad [A] := \sum_{\substack{x_i \in I \\ i=1}}^m A(x_i)$$

so ist also das Minimum von

$$(26) \quad M := [z - \bar{z}]^2$$

aufzusuchen. Enthält  $\bar{z}(x)$  z.B. zwei freie Parameter  $a$  und  $b$  (d.h. zwei "Freiheitsgrade"), so folgen die Bestimmungsgleichungen

$$(27) \quad \frac{\partial M}{\partial a} = 0 = \frac{\partial M}{\partial b}$$

Sei speziell  $\bar{z}(x)$  eine Gerade

$$(28) \quad \bar{z}(x) := ax + b$$

so ergeben sich aus (26)-(28) die sogenannten "Normalgleichungen"

$$(29a) \quad m \cdot b + [x] \cdot a = [z]$$

$$(29b) \quad [x] \cdot b + [x^2] \cdot a = [x \cdot z]$$

Nach der Cramerschen Regel wird daraus

$$(30) \quad a = D_a / D, \quad b = D_b / D$$

mit den Determinanten

$$(31) \quad D_a := \begin{vmatrix} m & [z] \\ [x] & [x \cdot z] \end{vmatrix}; \quad D_b := - \begin{vmatrix} [x] & [z] \\ [x^2] & [x \cdot z] \end{vmatrix}; \quad D := \begin{vmatrix} m & [x] \\ [x] & [x^2] \end{vmatrix}$$

Sind die Differenzen  $(z - \bar{z})$  normal (um null) verteilt, so läßt sich für die Größen  $a$  und  $b$  ein mittlerer Fehler - d.h. eine mittlere statistische Unsicherheit - angeben:

$$(32) \quad p_a = p \cdot \sqrt{\frac{m}{D}}, \quad p_b = p \cdot \sqrt{\frac{[x^2]}{D}}, \quad p = \sqrt{\frac{M}{m-2}};$$

$p$  ist dabei die mittlere Streuung der Einzelwerte  $z(x_n)$  um  $\bar{z}(x)$

Die Anwendung dieses Verfahrens auf die Zuordnungen (4) ist einfach: die Darstellungen (5) für  $\mathcal{Z}$  und  $\mathcal{Y}$  sind sämtlich Polynome

der Gestalt

$$(33) \quad \mathfrak{z}(x) = (a_1 \cdot x^2 + a_2 \cdot x + a_3) \cdot x^\nu$$

mit

$$(34) \quad x = \sqrt{y_f} \quad \text{bzw.} \quad N^{1/3}$$

Den Koeffizienten  $a_1$  hat H. Weyl (1915) für asymptotisch große  $x$  berechnet. Er ist unabhängig von der Gestalt  $B$  von  $\mathfrak{L}$ . Wir erwarten, daß es auch für die (relativ kleinen) Werte  $x_n$  der von uns verwendeten Mittelungsintervalle günstig ist, den ersten Term von (33) in die noch anzugebende Ausgleichsfunktion zu übernehmen. Wir setzen also als Ausgleichsfunktion für die exakten Zuordnungen  $N$  bzw.  $H$  an:

$$(35) \quad \bar{\mathfrak{z}}(x) := (a_1 \cdot x^2 + \bar{\alpha} \cdot x + \bar{\beta}) \cdot x^\nu$$

mit noch zu bestimmenden Koeffizienten  $\bar{\alpha}$  und  $\bar{\beta}$ . Wir bekommen Ausgleichsgeraden, wenn wir zu den Funktionen

$$(36a) \quad Y(x_n) := (\bar{\mathfrak{z}}(x_n) - \mathfrak{z}(x_n)) \cdot x^{-\nu}$$

$$(36b) \quad \bar{Y}(x) := (\bar{\mathfrak{z}} - \mathfrak{z}) \cdot x^{-\nu} = \alpha x + \beta$$

übergehen mit  $\alpha = \bar{\alpha} - a_2$ ,  $\beta = \bar{\beta} - a_3$ . Durch Steigung und Ordinatenabschnitt dieser Ausgleichsgeraden, die über (26)-(31) zu bestimmen sind, sind für das Intervall  $I$  die Abweichungen des mittleren Verlaufes der Werte  $\bar{\mathfrak{z}}(x_n)$  von der Funktion  $\mathfrak{z}(x)$  gegeben.

Für das Beispiel  $N(y)$  haben wir die Abweichungen  $(Y - \bar{Y})$  auf Normalverteilung (um null) geprüft. Das Ergebnis ist in Abb. 4 auf Wahrscheinlichkeitspapier eingetragen. Die eingezeichneten Punkte liegen (näherungsweise) auf einer Geraden, also liegt Normalverteilung vor. Die eingezeichnete Gerade soll den mittleren Verlauf der Punkte wiedergeben. Damit sind wir sicher, daß wir das oben angegebene Verfahren für unser Problem verwenden dürfen.

Damit ist ein Verfahren angegeben, um den mittleren Verlauf von  $N$  bzw.  $H$  durch numerische Rechnung mit den Ausdrücken  $\bar{N}$  bzw.  $\bar{H}$  zu vergleichen.

Die endliche Länge des zur Ausgleichsrechnung verwendeten Intervalls  $I$  bzw. die endliche Anzahl  $m < \infty$  der zur Mittelung herangezogenen Werte bewirkt, daß das Ergebnis des Vergleiches auf zweifache Weise unsicher ist:

- 1) der mittlere statistische Fehler  $p_{\alpha}$  bzw.  $p_{\beta}$  gibt bei vorgegebenem Typ der Ausgleichsfunktion ein Maß für die Unsicherheit des Ergebnisses der Ausgleichsrechnung. Für den Fall einer konstanten (oder nicht zu stark mit  $x$  wachsenden) Streuung  $p$  werden  $p_{\alpha}$  und  $p_{\beta}$  erst dann gleich null, wenn  $m$  (bzw. hier auch  $|B|$ ) über alle Grenzen wächst.
- 2) die Auswahl des genauen Typs der Ausgleichsfunktion hat bei endlichen Intervallen Einfluß auf die Koeffizienten: enthält der "wahre mittlere Verlauf" (Def. s. u.) von  $z(x_n)$  z. B. einen Term  $\sim x^f$ , der asymptotisch klein gegen den Oberflächenterm sein soll, und enthält die gewählte Ausgleichsfunktion keinen solchen Term (mit noch offenem Parameter), so bewirkt diese  $x^f$ - "Beimischung" eine Verfälschung des Koeffizienten  $\alpha$ ; sie ist um so geringer, je größer das Mittelungsintervall  $B$  ist. (Abklingen der Störung für große  $x$ ).

#### Näherungsverfahren

Wir geben nun vier Vorschläge an, um das oben angegebene Verfahren zu verbessern bzw. so zu vereinfachen, daß eine Erleichterung der numerischen Rechnung erreicht wird.

1 Berücksichtigung der Änderung der Streuung. Die mittlere Streuung  $p$  ist bei den hier betrachteten Zuordnungen (schwach) abhängig von der Lage des Mittelungsintervalles  $B(x)$ , d. h. von  $x$ . Diese Tatsache kann im Ausgleichsverfahren durch Anbringen eines Gewichtungsfaktors an die einzelnen Summanden  $(z - \bar{z})$  in  $M$  (s. (26)) berücksichtigt werden; der Faktor sollte umgekehrt proportional zur mittleren Streuung  $p(x)$  sein. Ein solches Vorgehen ist in der mathematischen Statistik für die Ausgleichung von Meßwerten ungleicher Genauigkeit üblich. Wir betrachten jedoch alle Werte  $z(x_n)$  als von gleichem Informationsgehalt.

2 Gewichtete Ausgleichung repräsentativer Werte. Es seien nun die  $x_n$  wie die Eigenwerte  $h_{nv}$  (s. Kap. I) durchnummeriert: alle  $x_{nv}$ ,  $v=1,2, \dots, F(x_n)$  entstammen dem gleichen (entarteten) Eigenwert  $h_n$ ,  $F$  ist sein Entartungsgrad. Das Verfahren besteht nun darin, daß die Mittelung über alle  $x_{nv}$  des Intervalles zerlegt wird in zwei Schritte: zuerst werden die  $F(x_n)$ -Werte  $z(x_{nv})$  gemittelt - der Mittelwert sei  $z_r$  -, anschließend wird die Ausgleichsrechnung mit diesen "repräsentativen Werten"  $z_r(x_n)$  ausgeführt. Sei also

$$(37) \quad x_{nv} := \frac{1}{F} \cdot \sum_{v=1}^F x_{nv}, \quad (38) \quad z_r(x_n) := \frac{1}{F} \cdot \sum_{v=1}^F z(x_{nv}), \quad (39) \quad m := \sum_{n=1}^N F(x_n),$$

dann ist statt des Ausdrucks M in (26) hier nun

$$(40) \quad M^1 := \frac{1}{m} \cdot [ (z_r - \bar{z})^2 \cdot F ]$$

zum Minimum zu machen, wobei nur die  $m^1$  repräsentativen Summanden addiert werden. Jeder repräsentative Wert trägt also mit einem Gewicht zur Ausgleichsrechnung bei, dessen Betrag gleich der Zahl F der Werte ist, für die er Mittelwert ist. Für die Zuordnung  $N(h_f)$  werden die Gl'n. (37) und (38) besonders einfach: es ist  $x_{nv} = h_{nv}$  und wegen der Entartung  $h_n = h_{nv}$ . Damit wird aus (38)

$$(41) \quad N_r(h_f) = \frac{1}{F} \cdot \left\{ \sum_{n=1}^F \left( i + \frac{h_{n+1} - h_n}{n} \right) F(h_n) \right\} = \sum_n \frac{h_n \cdot h_{n+1}}{n} F(h_n) - \frac{1}{2} F(h_f) + \frac{1}{2}.$$

Diese Methode der Vermittlung der zu gleichem Eigenwert gehörigen Werte vereinfacht die numerische Rechnung. Sie ist i.w. der "natürlichen" Methode (26)-(30) äquivalent. Der einzige Unterschied ist, daß in (38) die F Abweichungen  $(z - \bar{z})$  für gleiches n linear und nicht wie in (26) quadratisch gemittelt sind:

$$(42) \quad \sum_{v=1}^F (z(x_{nv}) - \bar{z}(x_{nv}))^2 + F \cdot (z_r(x_n) - \bar{z}(x_n))^2 = F \cdot \left\{ \frac{1}{F} \cdot \sum_{v=1}^F (z(x_{nv}) - \bar{z}(x_{nv})) \right\}^2$$

3 Ungewichtete Ausgleichung repräsentativer Werte. Es werden die repräsentativen Werte  $z_r$  als neue Grundgesamtheit betrachtet und für sie die gleiche Ausgleichsrechnung durchgeführt. Für die Koeffizientenbestimmung wird also

$$(43) \quad M^u := [ (z_r - \bar{z})^2 ]$$

zum Minimum gemacht. Dieses Verfahren geht von der Annahme aus, daß eine Ausgleichsfunktion, die dem mittleren Verlauf der  $z_r$  angepaßt ist, auch gut den mittleren Verlauf aller  $z(x_n)$  wiedergibt. Der Vergleich von (43) mit (40) zeigt, daß diese Annahme nur dann gerechtfertigt ist, wenn die Streuung der Werte der Funktion  $F(x_n)$  nicht zu groß ist.

4 Ungewichtete Ausgleichung verallgemeinerter repräsentativer Werte. Dieses Verfahren unterscheidet sich von dem unter 3 angegebenen nur durch eine willkürliche Festsetzung des Betrages der repräsentativen Werte  $z_r$ : Für  $z_r$  darf irgendein Wert zwischen  $z(x_{n1})$  und  $z(x_{nF})$  eingesetzt werden. Wir schreiben

$$(44) \quad z_r(x_n) := (1-r) \cdot z(x_{n1}) + r \cdot z(x_{nF}) \quad \text{mit } 0 \leq r \leq 1$$

Speziell für die in dieser Arbeit betrachteten  $x_{nv}$  bzw.  $z(x_{nv})$  für gleiches  $n$  zeigen wir in Abschnitt f) die Äquidistanz

$$(45) \quad \begin{aligned} z(x_{n,v+1}) - z(x_{n,v}) &= \text{const}(z_n) \\ x_{n,v+1} - x_{n,v} &= \text{const}(x_n) \end{aligned} \quad \text{für } 1 \leq v < F$$

Damit erhalten wir (38) aus (44) gerade durch  $r = \frac{1}{2}(1-F) \approx \frac{1}{2}$ . Als Beispiel sei (44) für  $N(h_f, V)$  und  $H(h_f, V)$  bei konstantem  $V$  angegeben:

$$(46) \quad N_r(h_f) := \sum_{h_n \leq h_f} F(h_n) - r \cdot F(h_f) = (1-r) \cdot N(h_f+0) + r \cdot N(h_f-0);$$

$$(47) \quad H_r(h_f) := \sum_{h_n \leq h_f} h_n \cdot F(h_n) - r \cdot h_f \cdot F(h_f) = (1-r) \cdot H(h_f+0) + r \cdot H(h_f-0).$$

Wir werden zeigen, daß der "Oberflächenterm" der Ausgleichsfunktionen der hier betrachteten Zuordnungen durch die Wahl von  $r$  nicht beeinflusst wird. Damit unterscheiden sich die Verfahren 3 und 4 für uns nicht wesentlich.

#### Bewertung der verschiedenen Ausgleichsverfahren

Wir betrachten ein Verfahren zur Ausgleichung der  $n(x_{nv})$  als um so geeigneter, je besser es den "wahren mittleren Verlauf" der  $z(x_{nv})$  annähert. Als "wahren mittleren Verlauf" einer Zuordnung  $z(x_{nv})$  definieren wir diejenige Funktion aus der Menge aller zu einer vorgegebenen Zahl von Freiheitsgraden denkbaren Ausgleichsfunktionen, für die die mittlere Streuung  $p$  am kleinsten ist. Je kleiner also die mittlere Streuung, um so geeigneter bewerten wir das zugehörige Näherungs-Ausgleichsverfahren.

Für die Berechnung des Koeffizienten  $\alpha$  der Ausgleichsfunktion (36b) unterscheiden sich nur die Verfahren 2 und 3 (4 ist von 3 nicht wesentlich verschieden) voneinander. Mit diesen beiden Verfahren haben wir für einen Testkörper (Kugel) den mittleren Verlauf der Zuordnungen  $H(N_{nv}, V)$  und  $H(h_{nv}, V)$  für ein festes Volumen mit dem Ansatz (36b) in einem Intervall, welches 1065 Werte enthielt, berechnet:

Verfahren No:		3	2
$H(h_f, V)$	P	24,9	24,3
	R	0,49	0,16

Verfahren No:		3	2
$H(N, V)$	P	0,94	0,87
	R	0,011	0,003

bzw.  $H$  mit  $\mathcal{N}$  bzw.  $\mathcal{G}$  geeigneter.

Für die numerische Ausführung der Ausgleichsrechnungen wurde daher für die Testkörper Kugel und Zylinder mit dem Verfahren 2 gerechnet. Lediglich für den Testkörper Würfel haben wir das Verfahren 3 angewandt, weil die Entartungsgrade  $F(h_f)$  des Würfelspektrums weitaus geringer streuen, als die des Kugel- und Zylinderspektrums, und wir erwarten dürfen, daß bei geringer Streuung der  $F$ -Werte das Verfahren 3 eine gute Näherung für 2 darstellt.

f) Allgemeine Eigenschaften der Größen  $N$  und  $H$

Einige Eigenschaften der Zuordnungen  $F(y_n)$ ,  $N(y_n)$ ,  $K(y_n)$ ,  $K(N)$  und  $L(N)$  ( $y_n$  sei wieder gleich  $(\sqrt[3]{\frac{2}{3} \cdot \frac{4}{3} \cdot h_n})$ ) vor allem solche, welche die "Morphologie der Punktwolken" in den graphischen Darstellungen der Abb. 3 betreffen, werden wir anhand des dort willkürlich gewählten Spektrums erklären.

1. Über das Spektrum irgendeines vorgegebenen Körpers sei zunächst ein asymptotisch gültiger Zusammenhang zwischen mittlerem Entartungsgrad  $\overline{F(h_n)}$  und mittlerem Niveauabstand  $\overline{\Delta h_n}$  abgeleitet: wir behaupten zunächst

(48) 
$$\overline{F(y_n)} = o(y_n)$$
 *Es können aber asymptotische  
Veränderungen von  $y_n$  mit  $\overline{F} = O(y_n)$   
existieren.*

$F(y_n) =: \Delta N(y_n)$  ist zugleich Änderung von  $N(y_n)$  im Intervall  $\Delta y_n = [\frac{y_n + y_{n+1}}{2}, \frac{1}{2}(y_n + y_{n+1})]$ . Für asymptotisch große  $y_n$  bewies nun H. Weyl (1915), daß

(49) 
$$N(y_n) = \frac{1}{6\pi^2} y_n^{3/2} + o(y_n^{3/2})$$

ist. Gilt (49) wenigstens in erster Näherung in  $y_n$  auch für den Mittelwert  $\overline{N}(y_n)$  für kleine, endliche Werte von  $y_n$ , so haben wir in erster Näherung

(50) 
$$\frac{\overline{\Delta N}}{\Delta y_n} \approx \frac{dN}{dy_n} \approx \frac{1}{4\pi} y_n^{1/2} = O(y_n^{1/2})$$

Setzen wir (48) in (50) ein, so folgt aus der Behauptung über den mittleren Entartungsgrad (48) eine Behauptung über den mittleren Niveauabstand  $\overline{\Delta y_n}$

(51) 
$$\overline{\Delta y_n} = \overline{\Delta N} \cdot y_n^{-1/2} = \overline{F} \cdot y_n^{-1/2} = o(y_n) \cdot y_n^{-1/2}$$
  

$$\overline{\Delta y_n} = o(y_n^{1/2})$$

Diese Behauptung kann nun unmittelbar exemplarisch geprüft werden: für Körper sehr symmetrischer Gestalt ist die Entartung  $F$  oft groß, daher sollte für diese die Aussage (48) und damit (51) am ehesten verletzt sein. Es ist aber für den

räumlichen harmonischen Oszillator:	$\overline{\Delta y_n} = \text{const.},$
dreidimensionalen Kasten :	$= \text{const.} + \text{eine abklin-}$ $\text{gende Funktion (s.}$ $\text{Anhang 1)}$
vierdimensionalen Kasten :	$= \text{const.},$
dreidimensionale Kugel :	$= o(1).$

Die Gestalt aller übrigen dankbaren Körper erscheint als von geringer Symmetrie, ihre Eigenwerte werden daher im Mittel geringer entartet sein. Für sie gilt dann (48) und (51) erst recht. Also sind beide Behauptungen immer erfüllt.

Aus (48) folgt nun unmittelbar der Beweis der Behauptung, daß bei der (in Abschnitt (e)4) beschriebenen ungewichteten Ausgleichung der repräsentativen Werte irgendeiner der hier betrachteten Zuordnungen die Wahl der Definition derselben (d.h. der Wahl von  $r$  in (44)) in gewissen Grenzen ( $0 \leq r \leq 1$ ) freigestellt ist, so lange man sich nur für den Oberflächenterm der Ausgleichsfunktion interessiert. Zum Beweis bilden wir zunächst für  $N(y_n)$  die Differenz zweier verschiedener Definitionen ( $r, r'; r+r'$ ) der repräsentativen Werte

$$(52) \quad \overline{N_r - N_{r'}} = \overline{(r - r') \cdot F(y_n)} \leq 1 \cdot \overline{F(y_n)} = o(y_n).$$

In der Ausgleichsfunktion  $\bar{N}(y_n)$  ist der Oberflächenterm proportional zu  $y_n$ , also von größerer Potenz in  $y_n^{1/2}$  als (52). Da wir (49) ausgenutzt haben, gilt (52) zunächst nur für asymptotisch große  $y_n$ . Für die anderen Zuordnungen (K und L) folgt der Beweis vollkommen analog. Diese Mittelwertaussagen sagen jedoch nichts über den Betrag einzelner Werte aus. So gibt es z.B. im Spektrum der Kugel Untermengen von Eigenwerten, für die  $F(y_n) \sim y_n$  ist.

2. Die Zuordnung  $N(y_n)$  ist zu jedem  $y_n$  genau  $F(y_n)$ -fach mehrdeutig.  $N$  durchläuft alle ganzen Zahlen, also wird aus (45) für  $1 \leq v \leq F$

$$(53) \quad \begin{cases} N(y_{n, v+1}) - N(y_{n, v}) = 1 \\ y_{n, v+1} - y_{n, v} = 0 \end{cases}$$

Dies ist auch unmittelbar der Abb. (3) zu entnehmen.

3. Die Zuordnung  $K(y_n) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} H(y_n)$  ist von gleicher Struktur wie  $N(y_n)$ . Statt (53) haben wir jedoch

$$(54) \left\{ \begin{array}{l} K(y_{u,v+1}) - K(y_{u,v}) = y_u \\ y_{u,v+1} - y_{u,v} = 0 \end{array} \right.$$

Ein Beispiel ist in Abb.(3) dargestellt. Ersichtlich wird die mittlere Streuung von der Größe der Entartungsgrade sehr stark abhängen.

Die Zuordnung  $K(N) = V^{2/3} \cdot H(N, V)$  ist eindeutig. Aus (45) wird nämlich

$$(55) \left\{ \begin{array}{l} K(N_{u,v+1}) - K(N_{u,v}) = y_u \\ N_{u,v+1} - N_{u,v} = 1 \end{array} \right.$$

In der Abb.(3) liegen daher die zu dem Eigenwert  $y_n$  gehörigen F Punkte äquidistant auf einer Geraden der Steigung  $y_n$ . Aus (23) erhalten wir für die Steigung der as. für große N behaupteten Kurve  $\bar{\alpha}(N)$  (N)

$$(56) \quad \frac{d\bar{\alpha}(N)}{dN} \approx 6\pi^2 N^{2/3} \approx y_u$$

Da der erste Term der Ausgleichsfunktion  $\bar{K}(N)$  schon durch den Ansatz gegeben ist durch (23), weichen also die einzelnen Werte  $K(N)$  nur in zweiter Näherung von  $\bar{K}(N)$  ab (im Gegensatz zu  $K(y_u)$ ,  $N(y_u)$ ). Wir erwarten daher, daß die mittlere Streuung und die statistischen Fehler der Ausgleichskoeffizienten für diese Zuordnung besonders klein sind, d.h. daß der mittlere Verlauf von  $K(N)$  mit besonders geringen Unsicherheiten bestimmt werden kann.

Für die Zuordnung  $L(N) = K(N)/y(N) = h_n \cdot H(h_n, V)$  gilt

$$(57) \left\{ \begin{array}{l} L(N_{u,v+1}) - L(N_{u,v}) = 1 \\ N_{u,v+1} - N_{u,v} = 1 \end{array} \right.$$

In der Abb.(3) liegen daher die zu dem Eigenwert  $y_n$  gehörigen F Punkte äquidistant auf einer Geraden der Steigung 1. Im Gegensatz zu den Zuordnungen (1. - 4.) ist  $L(N)$  jedoch nicht überall isoton. Es ist zwar

$$(58) \left\{ \begin{array}{l} N(y_{u+1,1}) - N(y_{u,1}) = 1 > 0, \\ K(y_{u+1,1}) - K(y_{u,1}) = y_{u+1} > 0, \\ K(N_{u+1,1}) - K(N_{u,1}) = y_{u+1} > 0, \end{array} \right.$$

über  $L(N)$  läßt sich aber keine solche Aussage machen, denn es ist



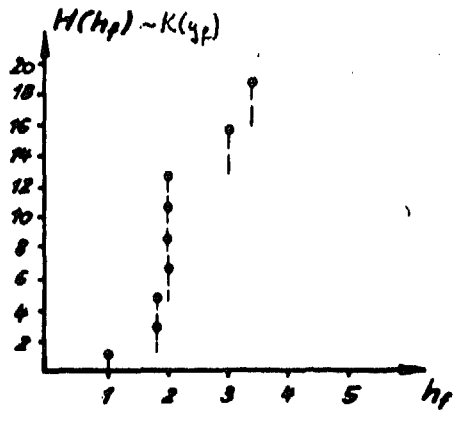
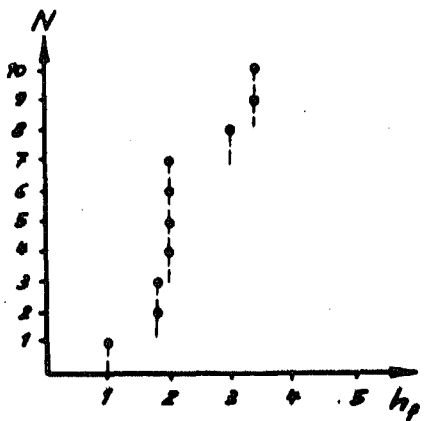
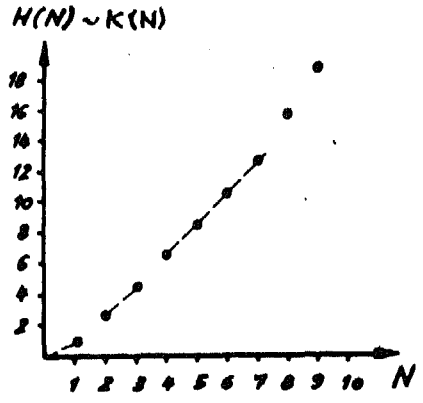
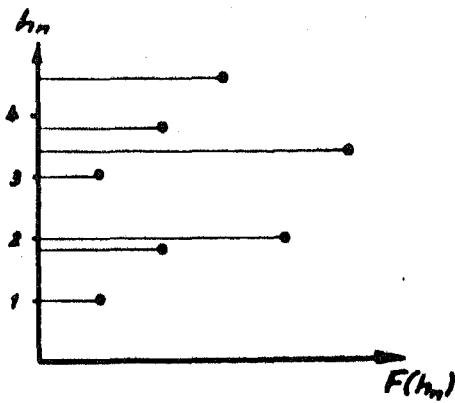
$$(59) \quad L(N_{n+1,1}) - L(N_{n,F}) = 1 - K(N_{n,p}) \cdot \frac{y_{n+1} - y_n}{y_{n+1} \cdot y_n}$$

größer oder kleiner als null je nach der genauen Größe der Eigenwerte  $y_n$  und  $y_{n+1}$ . Bei festgehaltener Mittelpunktsdichte erniedrigt sich also die Gesamtenergie für einige (wenige) Modellkerne, wenn ein Nukleon angelagert wird (und der neue Kern wieder im Grundzustand ist). Dieser Schalenstruktureffekt ist auch für die wirklichen Atomkerne bekannt.

Nachdem wir uns in diesem Kapitel einen ersten Überblick über Struktur und Eigenschaften von Teilchenzahl und Energie eines wechselwirkungsfreien Fermionengases in einem beliebig gestalteten Hohlkörper verschafft und die Methodik des Vergleiches ihres mittleren Verlaufes mit den für diese aufgestellten Hypothesen ("II") geschildert haben, werden wir jetzt in den folgenden Kapiteln für drei Testkörper Werte der Zuordnungen berechnen und die Ergebnisse des Vergleiches ihres mittleren Verlaufes mit den zugehörigen asymptotischen Ausdrücken mitteilen.

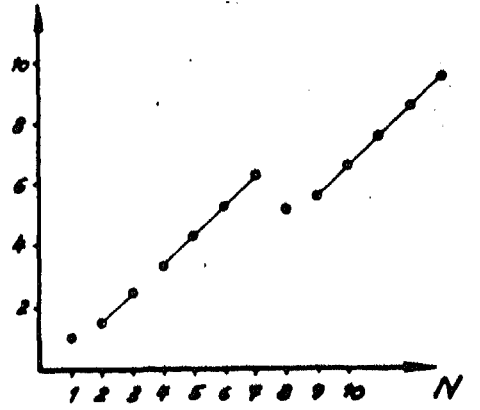
Gesamtenergie  $H$  und Teilchenzahl  $N$  für ein willkürlich gewähltes Spektrum

$B, V = \text{const.}$

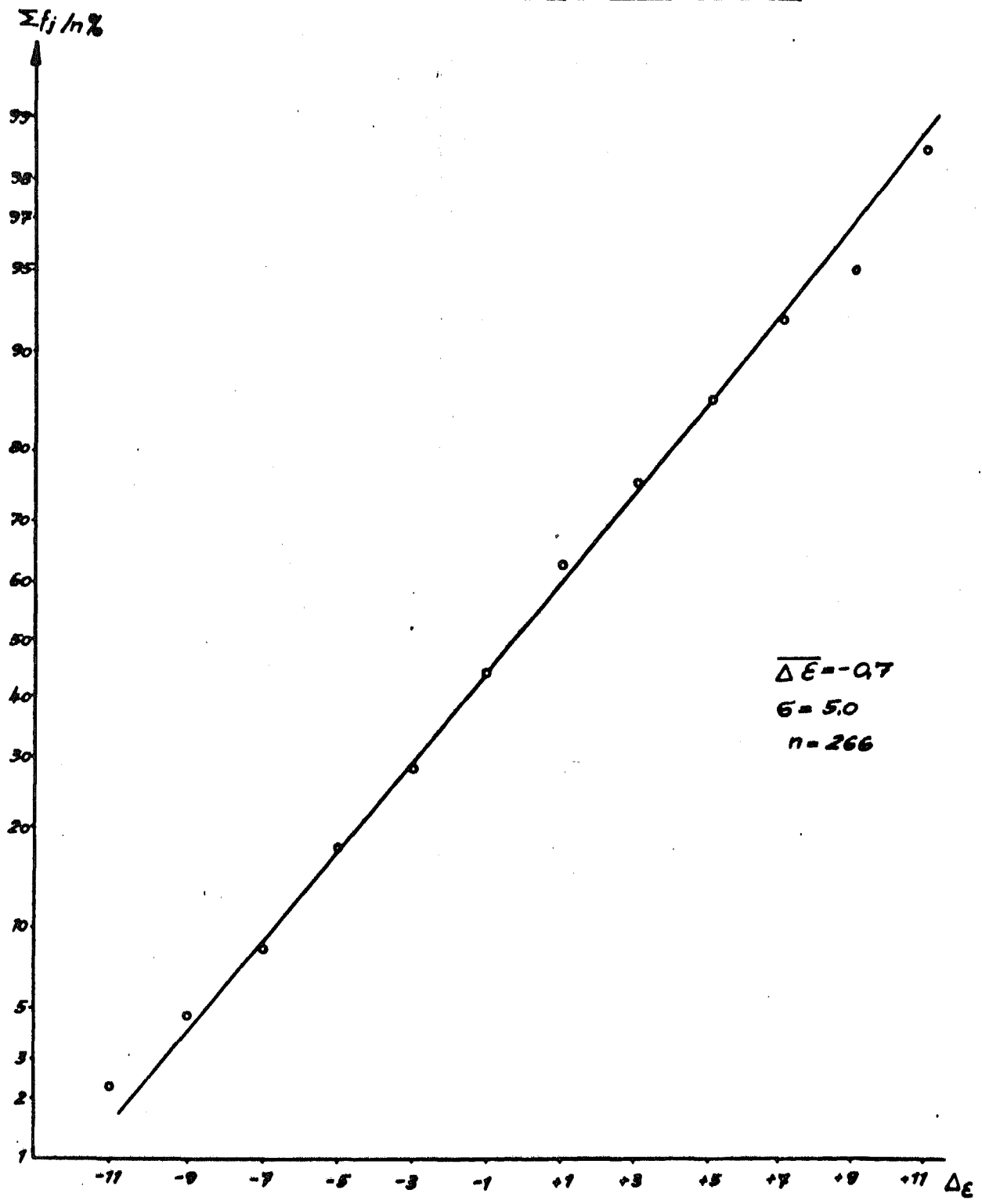


$\text{const.} \cdot H(N) \sim Z(N)$

$B, h_p = \text{const.}$



Prüfung der Streuung auf Normalverteilung



### KAPITEL III

In diesem Kapitel prüfen wir die Hypothese II für Testkörper von der Gestalt eines Würfels. Wir gehen also aus von der stationären freien Schrödingergleichung für ein würfelförmiges Innengebiet  $\mathcal{L}$ .

Aus dem Eigenwertspektrum werden wir für einen endlichen Bereich der unabhängigen Variablen die numerischen Werte für Teilchenzahl und Energie in Abhängigkeit von den verschiedenen Variablen berechnen und den mittleren Verlauf dieser Zuordnungen vergleichen mit dem Verlauf der entsprechenden zunächst für asymptotisch grosse Variablenwerte behaupteten expliziten Ausdrücke für  $\mathcal{N}$  bzw.  $\mathcal{E}$ .

Definieren wir als Restterm die Differenz zwischen dem Wert irgendeiner Grösse des Systems und dem Wert des zugehörigen asymptotischen Ausdrucks, also z. B.

$$(1) \quad R_N := N - \mathcal{N} ; \quad R_H := H - \mathcal{E} ; \quad R_L := L - \mathcal{L}, \quad \dots$$

so betrachten wir die Hypothese II genau dann für den Testkörper Würfel als bestätigt, wenn für den mittleren Verlauf von  $R$  gilt:

$$(2) \quad \bar{R} \text{ (Oberflächenterm)} = o(1).$$

Zur Rechtfertigung der Verwendung von  $\mathcal{N}$  und  $\mathcal{E}$  in numerischen Rechnungen als Näherung von  $N$  bzw.  $H$  prüfen wir, ob in dem hier zugrundegelegten Intervall

$$(3) \quad \bar{R} \ll \text{(Oberflächenterm)}$$

ist, d.h. ob für die berechneten Werte der Oberflächenterm der expliziten Ausdrücke ( $\mathcal{N}$  bzw.  $\mathcal{E}$ ) überhaupt eine Verbesserung der bisherigen näherungsweise Beschreibung des mittleren Verlaufes der Zuordnungen  $N$  bzw.  $H$  durch den Volumenterm von  $\mathcal{N}$  bzw.  $\mathcal{E}$  darstellt.

Im Abschnitt  $\infty$ ) werden wir zunächst das Eigenwertspektrum  $y_n$  des Würfels von 0 bis  $350 \cdot \pi^2$  berechnen und durch Tabellierung der Zuordnung  $F(y_n)$  (dem »Entartungsgrad«) angeben sowie einige Eigen-

schaften von  $F(y_n)$  diskutieren. Bei Kenntnis des Eigenwertspektrums können dann die Wertepaare aller übrigen Zuordnungen (II(4)) durch einfache Summationen erhalten werden.

Im Abschnitt  $\beta)$  geben wir den Verlauf von  $N$  und  $H$ , bzw. von  $N, K$  und  $L$  für kleine Variablenwerte ( $\sim N \leq 90$ ) an und vergleichen diese graphisch mit dem Verlauf von  $\mathcal{N}$  und  $\mathcal{H}$ , bzw.  $\mathcal{N}$ ,  $\mathcal{K}$  und  $\mathcal{L}$ .

Der Abschnitt  $\gamma)$  ist dann einer Ausgleichsrechnung zur Bestimmung quantitativer Mittelwertaussagen über die betrachteten Zuordnungen gewidmet.

### a) das Eigenwertspektrum für ein würfelförmiges Innengebiet

Dem Eigenwertspektrum der freien Schrödingergleichung für irgendein Innengebiet  $\mathcal{B}$  ist eineindeutig zugeordnet eine Funktion  $F(h_n)$ , welche die Vielfachheit (den Entartungsgrad) des Eigenwertniveaus  $h_n$  angeben soll. Für  $h \neq h_n$  ist  $F(h)$  noch nicht definiert. Wir setzen willkürlich  $F(h \neq h_n) = 0$ .

Speziell für ein würfelförmiges Innengebiet kann nach (Kap. I (24))  $F(h)$  geometrisch veranschaulicht werden als Anzahl der Gitterpunkte eines (kubischen) Einheitsgitters, welche auf der Oberfläche des Kugeloktanten vom Radius  $\sqrt{\xi}$  mit

$$(4) \quad \xi = \frac{1}{\pi^2} \cdot y = \frac{V^{2/3}}{\pi^2} \cdot h$$

liegen, jedoch nicht gleichzeitig Punkt einer Koordinatenebene sind (s. Abb. 2). Dies ist genau die Veranschaulichung der zahlentheoretischen Darstellung von  $F(h)$ , welche  $F(h)$  angibt als Zahl der Möglichkeiten, die Zahl  $\xi$  als Quadratsumme der Glieder eines geordneten Tripels  $(n_1, n_2, n_3)$  natürlicher Zahlen darzustellen:

$$(5) \quad F(\xi) = \sum_{\substack{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \xi \\ n_1, n_2, n_3}} 1 \quad ; \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots ;$$

alle  $\xi_n$  sind also ebenfalls natürliche Zahlen. Als Beispiel geben wir  $F(38)$  an: die Zahl 38 kann dargestellt werden als Summe der Quadrate der Glieder folgender geordneter Tripel

$(1, 1, 6), (1, 6, 1), (6, 1, 1), (2, 3, 5), (2, 5, 3), (3, 2, 5), (3, 5, 2), (5, 3, 2), (5, 2, 3)$ . Also ist  $F(38) = 9$ .

Ziel dieses Abschnittes a) ist es, die zahlentheoretische Funktion  $F(\xi)$  für alle  $\xi$  des Intervalles  $[0, 350]$  zu berechnen. Einige Eigenschaften des zugehörigen Würfelspektrums sind dann in Anhang 1 angegeben.

1.) zahlentheoretische Berechnung von  $F(\xi)$

für bestimmte ausgewählte  $\xi$

Ein geschlossener zahlentheoretischer Ausdruck, der für jedes beliebig vorgegebene  $\xi_n$  den Wert von  $F(\xi_n)$  angibt, ist bisher nicht bekannt. Für sehr viele  $\xi_n$  kann  $F(\xi_n)$  nur aus (2) durch systematisches Durchprobieren aller denkbaren geordneten Tripel natürlicher Zahlen berechnet werden. Für  $\xi_n \gg 1$  ist dieses Vorgehen sehr mühsam. Für einige bestimmte  $\xi_n$  jedoch lässt sich  $F(\xi_n)$  zahlentheoretisch und ungleich einfacher als über (2) berechnen.

1. Für alle  $\xi = 4^m(8n+7)$ ;  $m, n=0, 1, 2, \dots$ ; ist  $F(\xi) = 0$ .

Ein Beweis wird in Anhang 1 angegeben.

2. Für  $\xi = 4m+1$  und  $\xi = 4m+3$  lässt sich für  $F(\xi)$  eine zahlentheoretische Darstellung ableiten:

Die bekannten zahlentheoretischen Funktionen

$$(6) \quad \widetilde{F}_\nu(\xi) = \frac{\sum_{\substack{m_\mu^2 = \xi \\ \mu=1,2,\dots,\nu}} 1}{\sum_{\substack{m_\mu = 1,2,\dots,\nu}} 1} \quad ; \quad \nu=1,2,3,\dots; m_\mu = 0,1,2,\dots; \mu=1,2,3,\dots,\nu;$$

geben geometrisch veranschaulicht die Anzahl der Gitterpunkte eines Einheitsgitters an, welche auf der Oberfläche einer  $\nu$ -dimensionalen Vollkugel vom Radius  $\sqrt{\xi}$  liegen. Damit ergibt sich elementargeometrisch für  $F(\xi)$

$$(7) \quad F(\xi) = \frac{1}{8} \widetilde{F}_3(\xi) - \frac{3}{8} \widetilde{F}_2(\xi) + \frac{3}{8} \widetilde{F}_1(\xi)$$

Für  $\widetilde{F}_3(\xi)$  falls  $\xi = 4m+1$  und  $\xi = 4m+3$ , sowie für  $\widetilde{F}_2(\xi)$  und  $\widetilde{F}_1(\xi)$  sind aber zahlentheoretische Darstellungen schon bekannt, Es ist

$$(8) \quad \widetilde{F}_1(\xi) = 2 \cdot \delta_{\sqrt{\xi}, [\sqrt{\xi}]} = 2 \cdot \begin{cases} 1 & \text{falls } \sqrt{\xi} \text{ ganzzahlig} \\ 0 & \text{falls } \sqrt{\xi} \text{ nicht ganzzahlig} \end{cases} ;$$

d.h.: ist  $\xi$  eine Quadratzahl, so ist  $\widetilde{F}_1(\xi)$  gleich zwei, sonst gleich null. Ferner ist nach Glaisher (1907) und Ramanujan (1918)

$$(9) \quad \widetilde{F}_2(\xi) = 4 \cdot \left\{ \sum_{d|\xi} 1 - \sum_{d''|\xi} 1 \right\} ;$$

dabei sind die Summationen über alle Teiler  $d'$  bzw.  $d''$  von  $\xi$  zu erstrecken, für die

$$(10) \quad d' \equiv 1 \pmod{4}; \quad d'' \equiv 3 \pmod{4};$$

gilt. Diese Teiler können leicht aus der Primzahlzerlegung von  $\xi$  gewonnen werden. Schliesslich ist nach Eisenstein (1847)

$$(11) \quad \widetilde{F}_3(4m+1) = 24 \cdot \sum_{\ell=1}^m \left( \frac{\ell}{4m+1} \right),$$

$$(12) \quad \widetilde{F}_3(4m+3) = 8 \cdot \sum_{\ell=1}^{2m+1} \left( \frac{\ell}{4m+3} \right),$$

dabei sei  $\left( \frac{\ell}{n} \right)$  das bekannte Legendre-Jacobi-Symbol<sup>1)</sup>.

Durch Einsetzen von (8), (9) und (11) bzw. (12) in (7) erhalten wir die gesuchte Darstellung für  $F(\xi)$ , falls  $\xi=4m+1$  bzw.  $\xi=4m+3$  ist.

Als Beispiel berechnen wir  $F(21)$ . Nach (11) ist zunächst

$$\begin{aligned} \widetilde{F}_3(21) &= 24 \cdot \left\{ \left( \frac{1}{3} \right) \cdot \left( \frac{1}{7} \right) + \left( \frac{2}{3} \right) \cdot \left( \frac{2}{7} \right) + \left( \frac{3}{3} \right) \cdot \left( \frac{3}{7} \right) + \left( \frac{4}{3} \right) \cdot \left( \frac{4}{7} \right) + \left( \frac{5}{3} \right) \cdot \left( \frac{5}{7} \right) \right\}, \\ &= 24 \cdot \left\{ 1 + 1 + 0 + 1 - 1 \right\} = 48; \end{aligned}$$

Ferner ist wegen  $(d' | 21) = 1, 21; (d'' | 21) = 3, 7;$

$$\widetilde{F}_2(21) = 4 \cdot \left\{ 2 - 2 \right\} = 0.$$

Schliesslich ist 21 keine Quadratzahl, somit  $\widetilde{F}_1(21) = 0$  und damit nach (7)  $F(21) = 6$ .

Für grosse  $\xi$  ist die Berechnung von  $F(\xi)$  aus (7)-(12) nur wenig einfacher als aus (2). Durch Sortierung von Zahlentripeln (2) lässt sich aber ausserdem zu jedem vorgegebenen  $\xi$   $F(\xi)$  berechnen.

## 2.) numerische Berechnung von $F(\xi)$ für $\xi \in (0, 350)$ .

Die Berechnung von  $F(\xi)$  aus (2) kann einer elektronischen Rechenmaschine übertragen werden. Diese muss dazu für jedes vorgegebene  $\xi$  aus allen denkbaren geordneten Tripeln natürlicher Zahlen diejenigen heraussuchen, deren Quadratsumme gerade  $\xi$  ergibt;  $F(\xi)$  ist dann gleich der Anzahl dieser Tripel.

Für die praktische Lösung dieser Aufgabe sind eine Vielzahl von numerischen Verfahren denkbar.

Der Aufwand an numerischer Rechnung zur Bestimmung von  $F(\xi)$  zu vorgegebenem  $\xi$  wird mit wachsendem  $\xi$  bei allen Verfahren natürlich stark ansteigen. Wir erwarten aber, dass dies bei den einzelnen Verfahren in unterschiedlicher Weise der Fall ist, dass also jedes

Verfahren sein ihm eigenes  $\xi$ -Gebiet hat, in dem es allen anderen bekannten Verfahren überlegen ist. Dieses Gebiet kann auch leer sein.

Die Auswahl des Verfahrens wird aber mitbestimmt von den Eigenschaften der verwendeten el. Rechenmaschine. Mit wachsendem  $\xi$  benötigen nämlich manche Verfahren einen immer grösseren Speicherplatzbedarf (z.B. zur Speicherung von aussortierten, aber noch nicht gezählten Tripeln), der von jeder Maschine nur bis zu einer ihr eigenen gegebenen Grenze befriedigt werden kann.

Für zwei Verfahren zur Berechnung von  $F(\xi)$  aus (2) geben wir im Anhang 2 das Algol-60-Programm an:

1. Ein Verfahren, für das man zwar nur eine sehr geringe und von  $\xi$  unabhängige Anzahl von frei verfügbaren Speicherplätzen benötigt, dass dafür aber relativ grossen (und natürlich mit wachsendem  $\xi$  ansteigenden) Rechenaufwand erfordert. Bei diesem Verfahren werden zu jedem  $\xi$  alle Tripel, welche nicht durch einfache Kriterien ausgeschieden werden können, darauf geprüft, ob  $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \xi$  ist oder nicht. Es berechnet also jeden Wert von  $F(\xi)$  einzeln.

2. Ein Verfahren, mit welchem  $F(\xi)$  immer zu mehreren benachbarten  $\xi$ , (z.B. für 100), zugleich berechnen lässt. Es erfordert zwar eine mit  $\xi$  stark wachsende Zahl von Speicherplätzen, dafür ist aber der numerische Aufwand pro errechnetem  $F(\xi)$ -Wert im Mittel viel geringer als beim ersten Verfahren. (Es werden weniger Tripel mehrfach berechnet). Solange die Anzahl der verfügbaren Speicherplätze ausreicht, d.h. für nicht zu grosse  $\xi$ , ist es dem ersten Verfahren also überlegen, zumal wir  $F(\xi)$  nicht für irgendwelche einzelnen  $\xi$ , sondern für alle  $\xi$  eines Intervalles berechnen möchten.

Das Verfahren sei jetzt kurz erläutert:

Für ein gewünschtes  $\xi$ -Intervall  $J = (\xi_1, \xi_2]$ , z.B.  $|J| = 100$ , werden zunächst alle Tripel, für die  $\xi_1 < n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \leq \xi_2$  ist, lexikographisch mit ihren zugehörigen  $\xi = \xi(\text{Tr.})$  gespeichert. Es sind etwa  $4 \cdot \{N(\xi_2) - N(\xi_1)\}$  Speicherplätze. Weitere  $(\xi_2 - \xi_1)$  Plätze " $F(\xi)$ " sind für die nun zu berechnenden Zahlen  $F(\xi)$  zu reservieren. Zunächst wird ihr Inhalt gleich null gesetzt. " $F(\xi) = 0$ ". Dann werden aus dem Lexikon die einzelnen Tripel mit ihren  $\xi(\text{Tr.})$  der Reihe nach ausgelesen und jeweils der Inhalt der zu  $\xi(\text{Tr.})$  zugeordneten Zelle " $F(\xi)$ " um eins erhöht. Ist das Lexikon fertig ausgelesen, so sind in



$\xi$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	$\xi$
0				1			3			3		3	1		6			3	3	3	0
20		6	3		3		6	4		6	6			6	3	6	3		9		20
40		9	6	3	3	6	6		1	6	6	6		6	12		6	6		9	40
60		6	12			6	12	3	3	12	6		3	3	12	7	3	12	6		60
80		12	3	9	6		15		3	12	12	6		6	12		3	3	12	9	80
100		18	6		6	12	6	9	4	6	18			9	12	6	6	12	9		100
120	6	9	12	6		12	18			18		15	6	6	21		3	9	12	9	120
140	6	12	6		3	6	21	7		18	15		9	15	12	12		6	12		140
160		24	12	3	9	12	15		6	6	12	15	3	18	18		3	6	9	15	160
180	6	12	18		6	18	18	6		24	6		1	3	27	12	6	12	15		180
200	6	18	6	12	6	6	30			30	12	9	6	12	9		12	12	12	12	200
220		12	18		6	15	9	15	6	12	30			15	24	6	9	18	12		220
240		15	15	13	6	18	18		12	18	12	21		6	24			21	12	12	240
260	6	24	9		12	6	30	6	3	30	24		3	12	15	15	12	6	21		260
280	6	27	12	9		24	18		3	9	24	12	3	24	21		12	24	6	24	280
300	7	12	12		3	18	27	9	12	18	12		6	9	36	18		12	18		300
320		30	12	12	12	12	33		3	36	12	9	9	12	18		6	9	18	18	320
340		42	27		15	12	12	15		18	30										340

Tabelle 1

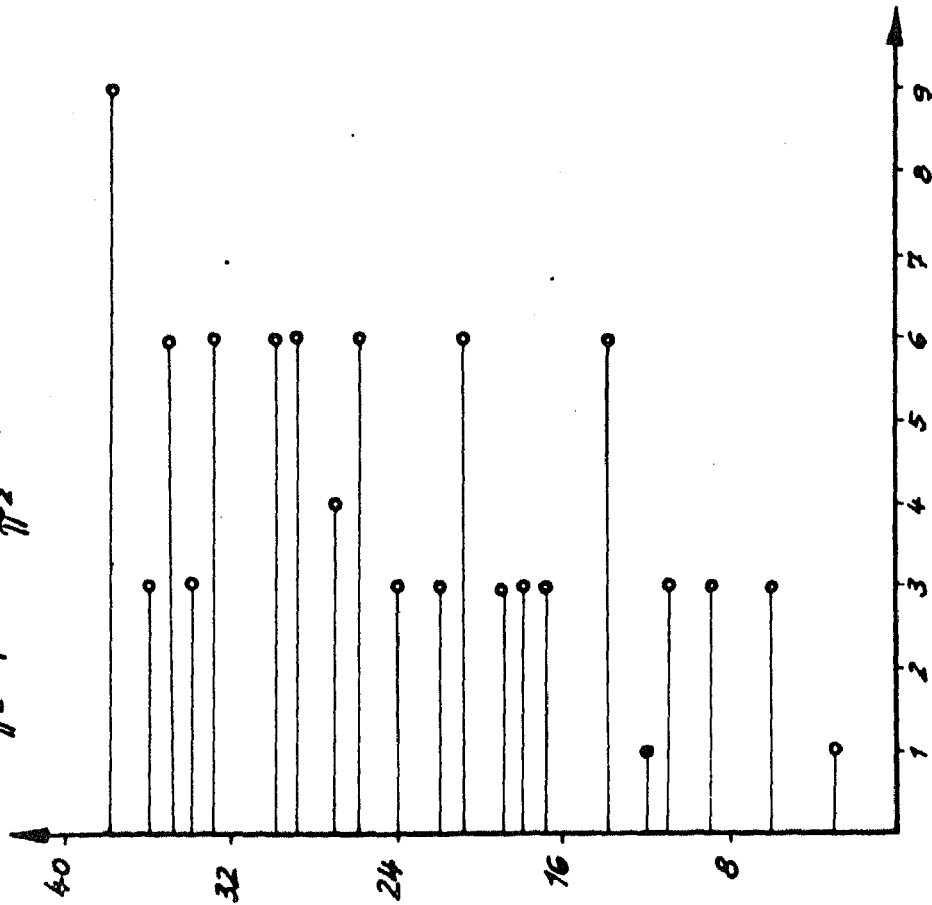
In jeder Zeile stehen 20 F-Werte. Abzulesen ist (z.B.):  $F(29) = F(20+9) = 6$ .  
Eingetragen sind genau alle  $F(\xi) \neq 0$  für  $0 \leq \xi \leq 350$ .

Überall sonst im Intervall ist  $F(\xi) = 0$ . Es ist

$$\xi = \frac{1}{\pi^2} \cdot y = \frac{\sqrt{23}}{\pi^2} \cdot h \cdot \frac{2m}{\pi} ; \quad F(\xi) = F(h).$$

Abb. 5

$$\varepsilon = \frac{1}{\pi^2} \cdot \gamma = \frac{V^{\frac{2}{3}}}{\pi^2} \cdot h$$



$$F(\varepsilon) = F(\gamma, \square) = F(h, \square)$$

"F(ξ)" gerade die Werte der Zuordnung F(ξ) für ξ, 4ξ ∈ ξ<sub>1</sub> gespeichert.

Für die Ausführung der numerischen Rechnungen stand die Z22 (Hersteller: Zuse KG) des mathematischen Instituts der Universität Mainz zur Verfügung. Die Z22 ist ein sehr langsamer Röhrenrechner mit relativ grossem Speicher (8000 Plätze) und gutem Algol-Übersetzer. Die reine Rechenzeit für die Berechnung von F(ξ) für ξ ∈ (0,350] mit dem zweiten Verfahren betrug 5 h.

3.) Das Ergebnis der numerischen Rechnung

Die Zuordnung F(ξ) ist für ξ ∈ (0,350] in Tabelle 1 angegeben. In der Tabelle bedeuten leere Felder F(ξ) = 0. Es gibt also nicht zu jedem ganzzahligen ξ > 0 ein Tripel, für das n<sub>1</sub><sup>2</sup> + n<sub>2</sub><sup>2</sup> + n<sub>3</sub><sup>2</sup> = ξ ist. Weiter erkennt man eine gewisse Periodizität:

$$\text{Für } \left[ \frac{\xi+1}{2} \right] = \left\{ \begin{matrix} 2m+1 \\ 2m \end{matrix} \right\}; m=0,1,2,\dots \text{ d.h. für } \xi = \left\{ \begin{matrix} (4m+1) \text{ oder } (4m+2) \\ (4m-1) \text{ oder } (4m) \end{matrix} \right\}$$

$$\text{ist } F(\xi) \left\{ \begin{matrix} \text{fast immer ungleich null, bis auf } -1, 2, 5, 10, 13, 25, 37, \\ \text{meist klein, oft gleich null.} \end{matrix} \right. \left. \begin{matrix} \\ 58, 85, 130. \end{matrix} \right\}$$

Einzelne Werte dieser Tabelle lassen sich mittels der Formeln (7)-(12) leicht nachprüfen. (Eine genaue Betrachtung einzelner Eigenschaften des Spektrums geben wir in Anhang 1). Graphisch haben wir F(ξ) für die kleinsten Werte von ξ in Abb. (5) als "Sprossenlängen einer Energieleiter" dargestellt.

Die Zuordnungen (II(4)), d.h. N, H bzw. L lassen sich nun leicht aus Tabelle 1 durch einfache Summationen gewinnen.

b) Teilchenzahl und Energie

In diesem Abschnitt suchen wir für den Spezialfall würfelförmiger Testkörper die [in Kap. IIc) unter a) gestellte] Frage zu beantworten, ob für Teilchenzahlen, die denen der bekannten Atomkerne entsprechen (d.h. für N ≤ 60), die Ausdrücke  $\mathcal{N}(y_f)$ ,  $\mathcal{K}(y_f)$ ,  $\mathcal{K}(N)$  und  $\mathcal{L}(N)$  [s. II(21)-(24)] als numerisch brauchbare Näherung der Werte der exakten Zuordnungen N(y<sub>f</sub>), K(y<sub>f</sub>), K(N) und L(N) verwendet werden können, soweit das durch so einfache Ausdrücke überhaupt möglich ist.

Zunächst wurden die 60 tiefsten Werte von  $N(y_f)$  und  $K(y_f)$  gemäss ihrer Definition durch einfaches Aufsummieren aus Tabelle 1 bestimmt. Das Ergebnis liesse sich etwa als Tabelle darstellen, in der zu jedem  $N \leq 60$  ein Wert von  $K$  und von  $y_n$  eingetragen ist; jedes  $y_n$  tritt in ihr genau  $F(y_n)$ -mal auf.

Graphisch haben wir diese Zuordnung von  $N, K$  und  $y_n$  dargestellt durch Auftragen von

$N$  gegen  $y_f, N(y_f)$ , in Abb. 7;  $K$  gegen  $y_f, K(y_f)$ , in Abb. 8;

$K$  gegen  $N, K(N)$ , in Abb. 9 und  $K/y_f$  gegen  $N, L(N)$ , in Abb. 10.

In diese vier Abbn. sind weiterhin die Kurven  $\mathcal{V}(y_f), \mathcal{A}(y_f), \mathcal{K}(N)$  und  $\mathcal{L}(N)$  eingetragen, sowie deren einzelne Summanden, welche durch "Volumen-, Oberflächen- und Krümmungsterm" bezeichnet sind.

Durch Anschauung entnehmen wir diesen vier Abbn.:

1. Der allgemeine Verlauf der exakten Zuordnungen wird im betrachteten Bereich recht gut durch die asymptotischen Ausdrücke wiedergegeben. Es erscheint daher für würfelförmige Körper (bei Verzicht auf Berücksichtigung von Schalenstruktureffekten) sinnvoll, die asymptotischen Formeln zumindest im Bereich  $N \leq 60$  als numerisch brauchbare Näherung der Werte der exakten Zuordnungen zu verwenden; die relativen Abweichungen sind klein.
2. Für die betrachteten Teilchenzahlen gibt der Volumenterm der  $a_s$  Formeln allein keine brauchbare Näherung. Oberflächen- (und Krümmungs-) term sind hier numerisch von gleicher Grössenordnung wie der Volumenterm, wenn sie auch asymptotisch relativ gegen ihn verschwinden. Erst mit allen drei Termen werden also die asymptotischen Formeln für kleine Werte von  $N$  als Näherung brauchbar. Wir betrachten (3) für den Würfel als bestätigt.
3. Sogar für die kleinsten Werte der unabhängigen Variablen ist die numerische Übereinstimmung von ex. Zuordnung und  $a_s$  Formel recht gut. Das ist möglich, weil die Streuung der exakten Werte (um ihren unbekannteren mittleren Verlauf) selbst eine wachsende Funktion von  $y_f$  ist, für kleine  $y_f$  also klein ist. (s. Tabelle 2).

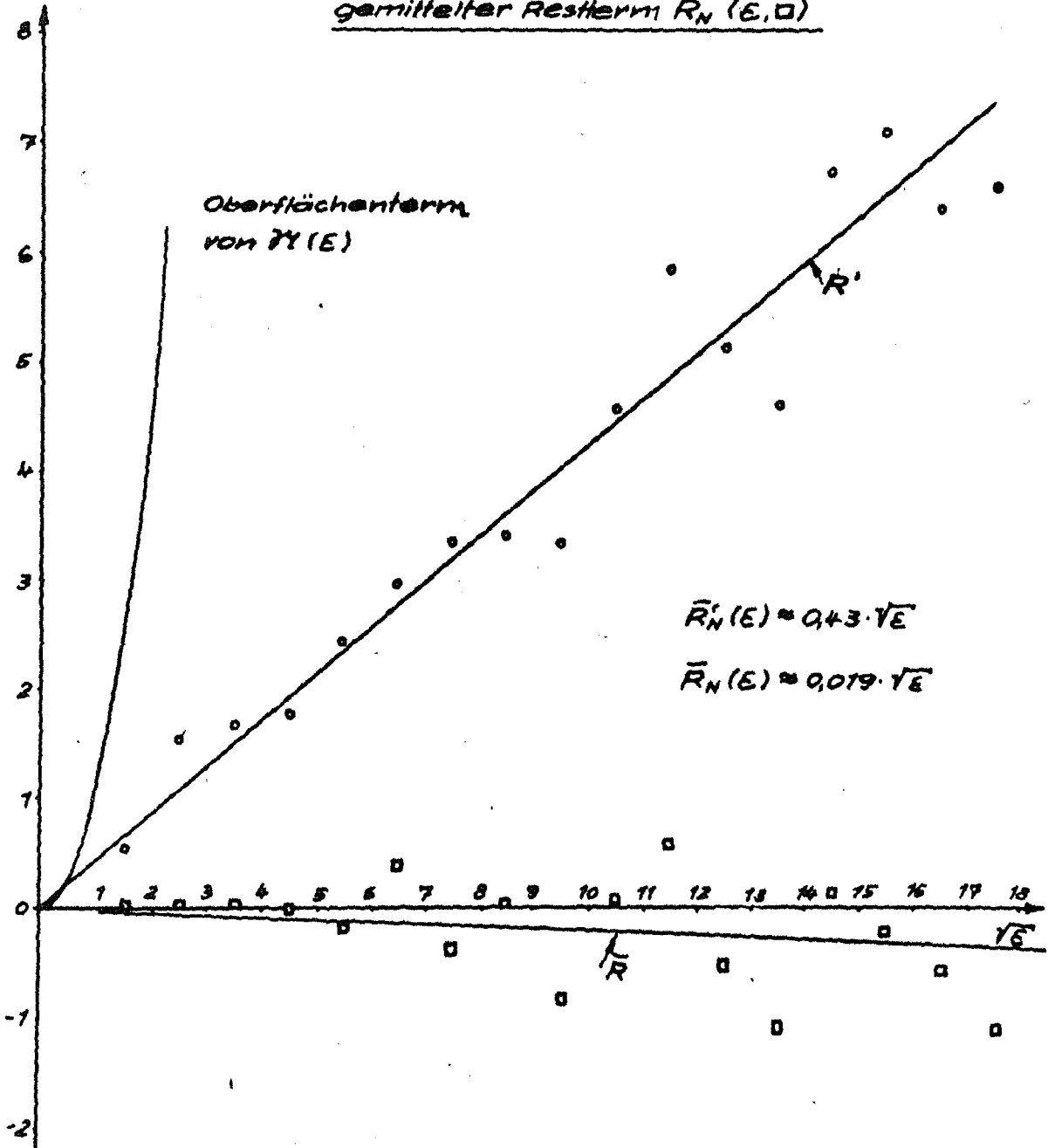
Im Gegensatz zum Oberflächenterm von  $\mathcal{V}(y_f)$  und von  $\mathcal{A}(y_f)$  ist der Krümmungsterm vielleicht für sehr viele, sicher aber nicht für alle Werte von  $N(y_f)$  und  $K(y_f)$  eine Verbesserung der durch Volum- und Oberflächenterm gegebenen Näherung. Denn aus (Anhang 1 (15)ff.) wissen

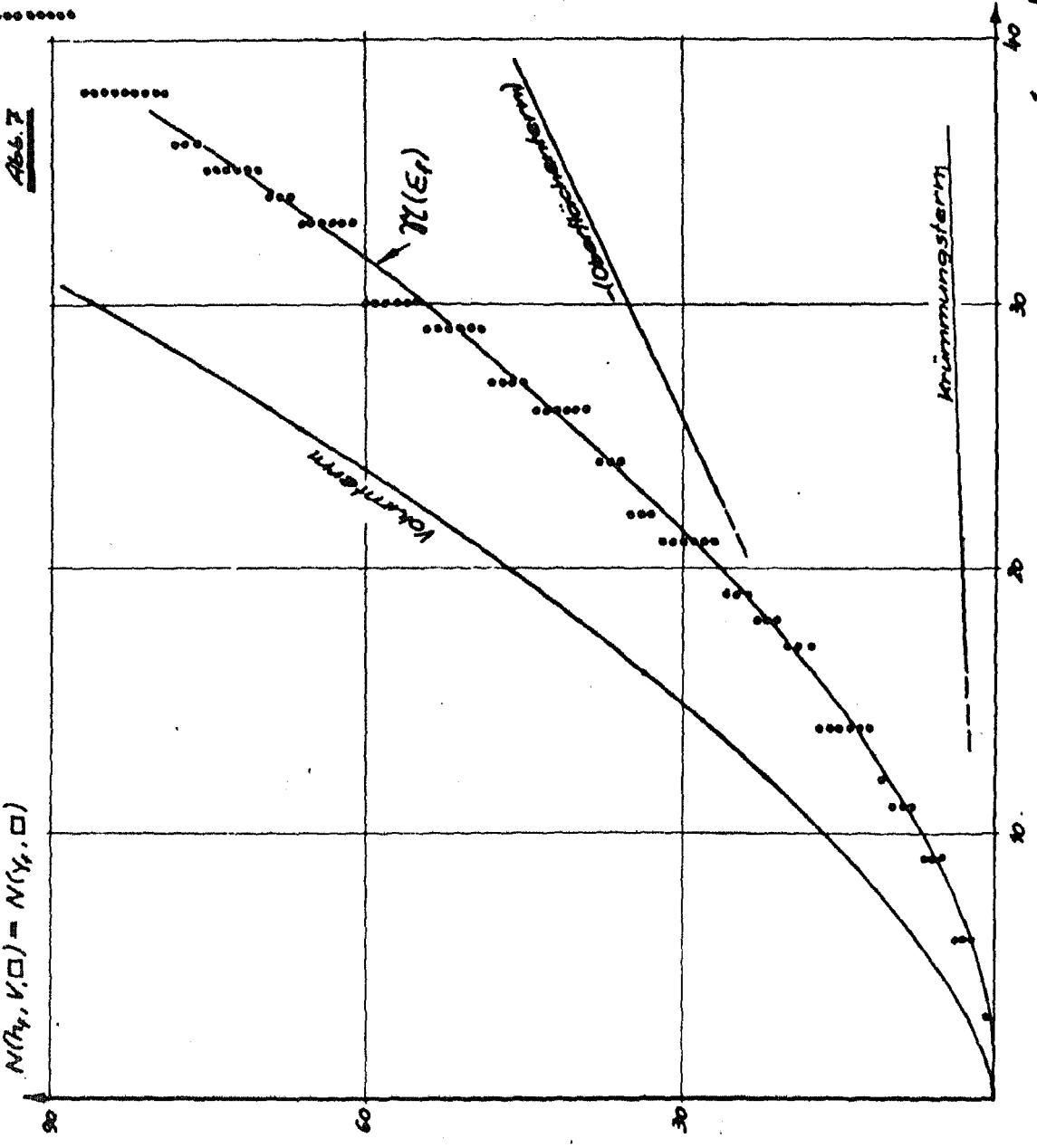
Abb. 6

$$R'_N(E) = (N'_i - \beta L),$$

$$R_N(E) = (N_i - \beta L).$$

gemittelter Restterm  $\bar{R}_N(E, 0)$





$$E_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4}$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4}$$

$$E_3 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4}$$

$$E(\epsilon_f) = \frac{1}{T^2} \cdot V^2 \cdot H(\eta_f, V, \sigma) = \frac{1}{T^2} \cdot K(\eta_f, \sigma)$$

Abb. 8

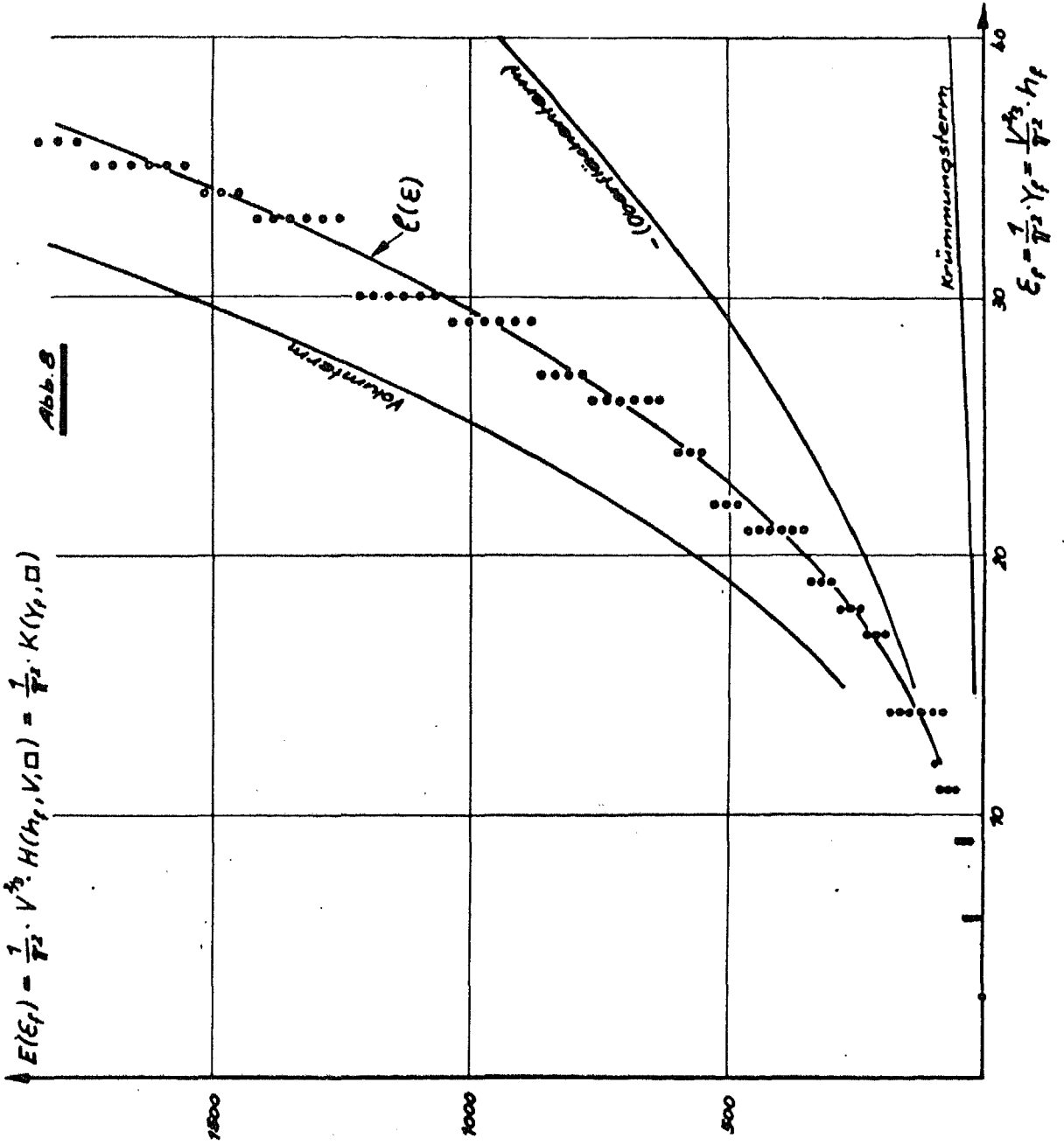


Abb. 9

$$\epsilon(N, \sigma) = \frac{1}{E} \cdot K(N, \sigma) = \frac{V^3}{T^3} \cdot H(N, V, \sigma)$$

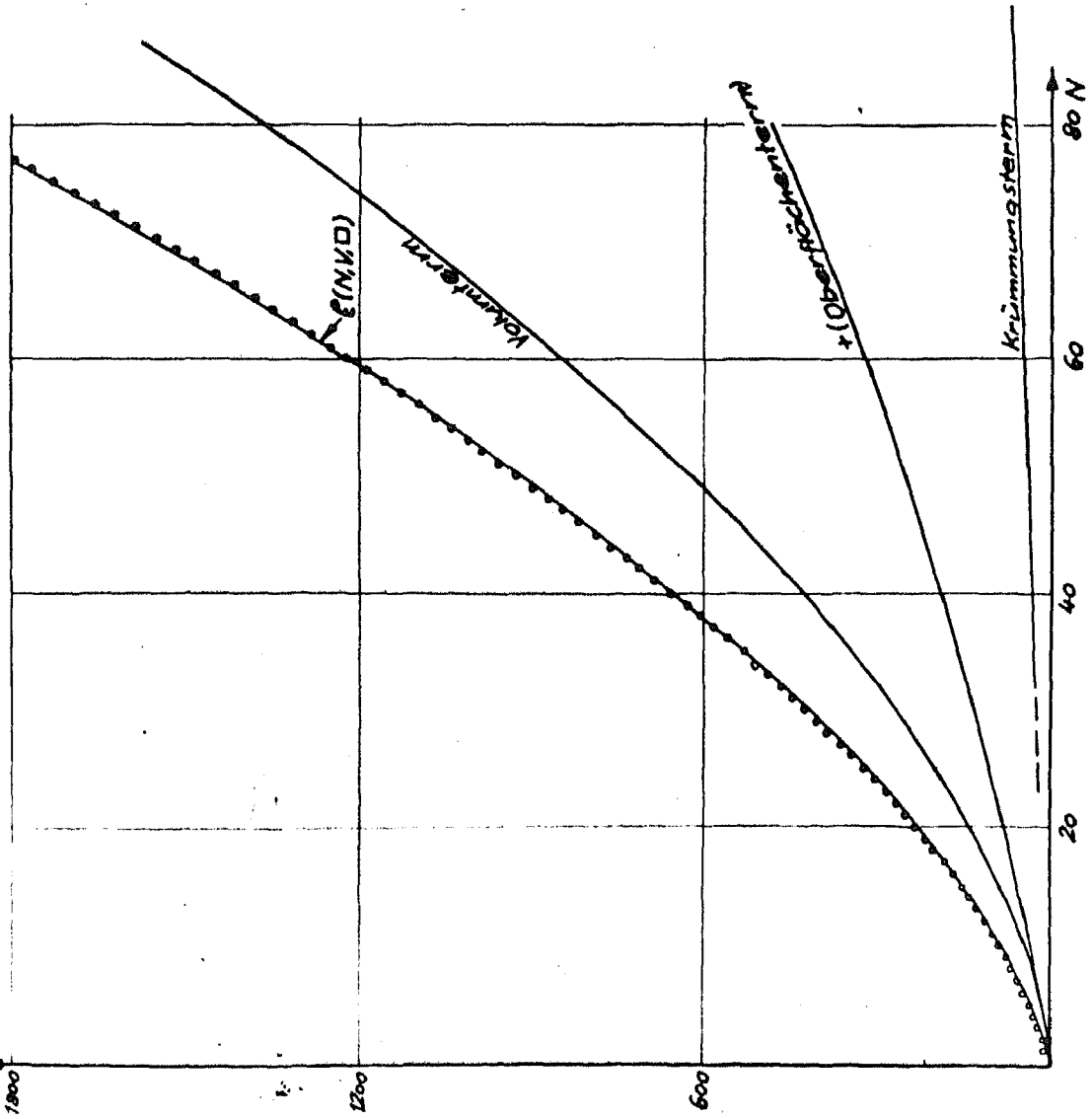
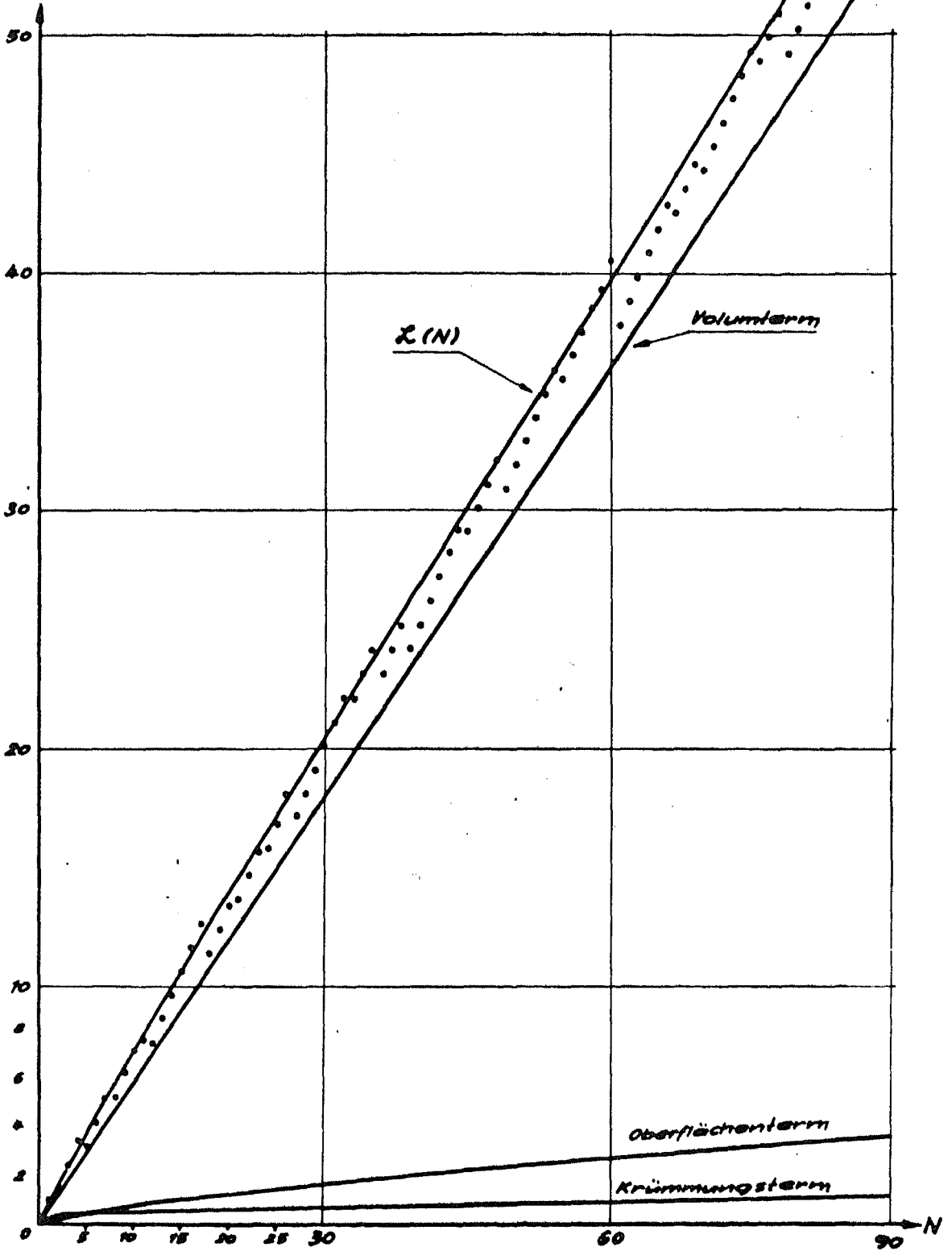




Abb. 10

$$\frac{K(N, \varnothing)}{Y_f(N, \varnothing)} = \frac{1}{h_f} \cdot H(h_f, N, \varnothing) = L(N, \varnothing)$$



wir, dass der mittlere Entartungsgrad proportional zu  $\sqrt{y_n}$  ist; folglich ist die Differenz des grössten und kleinsten Wertes von  $N$  bzw.  $K$  zu gleichem  $y_n$  im Mittel proportional zum Krümmungsterm.

### c.) Der Oberflächenterm

Im vorigen Abschnitt hatten wir gesehen, dass die asymptotischen Formeln für kleine, endliche Werte der Variablen ( $\sim N \leq 60$ ) eine numerisch recht gut verwendbare Näherung der exakten Zuordnungen des Fermigas-Modelles abgeben. Jetzt suchen wir eine Antwort auf die Frage, ob die asymptotischen Formeln in zweiter Näherung mit dem » wahren mittleren Verlauf« der exakten Zuordnungen übereinstimmen. Dazu prüfen wir mittels einer Ausgleichsrechnung, ob die asymptotischen Formeln als Näherung der exakten Zuordnungen verbessert werden können durch Änderung des Oberflächentermkoeffizienten, bzw. also ob

$$(2) \quad \bar{R} \quad / \quad (\text{Oberflächenterm})$$

eine abnehmende Funktion ist.

Für die (zur Bestimmung der  $\bar{R}$  notwendigen) Ausgleichsrechnung haben wir wegen des einigermaßen ausgeglichenen Würfelspektrums das vereinfachte Verfahren der » ungewichteten Ausgleichung repräsentativer Werte« verwendet, welches in Kap. II (e4) dargestellt wurde, (und zwar hier mit  $r=1/2$ ). Wegen der im Vergleich zum » natürlichen Ausgleichsverfahren« (II(e)) grösseren mittleren Streuung der exakten Werte um den berechneten mittleren Verlauf erwarten wir höchstens schlechtere Ergebnisse.

Zunächst haben wir zu jedem Eigenwert  $y_n \leq 350 \pi^2$  gemäss der Festsetzung (II(44)) den zugehörigen Wert für  $N_r$  und für  $K_r$  durch einfaches Aufsummieren der Werte aus Tabelle 1 berechnet. Das Ergebnis könnte etwa als Tabelle dargestellt werden, in der zu jedem  $y_n$  ein Wert von  $N_r$  und von  $K_r$  eingetragen ist. Wir interessieren uns jedoch nur für Mittelwertaussagen. Nach II(d) genügt es, die oben gestellte Frage für irgendzwei der aus dieser gedachten Tabelle ablesbaren Zuordnungen  $N(y_n)$ ,  $K(y_n)$ ,  $K(N)$  und  $L(N)$  zu beantworten, um die Antwort für alle gegebenen zu haben. Wir haben uns für  $K(y_n)$  und  $K(N)$  entschieden, werden jedoch zuvor auch noch den mittleren Verlauf

von  $N(y_n)$  betrachten,

Sämtliche Rechnungen wurden elektronisch ausgeführt. Der Rechenaufwand ist gegenüber dem für (a)2,7 ausgeführten vergleichsweise gering. Das Rechenverfahren wurde unabhängig von dem Spektrum des vorgegebenen Testkörpers formuliert. Daher ist auch das zugehörige Algol-60-Programm für alle Testkörper verwendbar. Es ist in Anhang 2 als Teil des Programms für die Kugel abgedruckt.

1.) Oberflächenterm der Teilchenzahl

Wir untersuchen jetzt den Verlauf von  $N(y_n)$ . Dazu haben wir in die Abb. (6) in Abhängigkeit von  $\sqrt{\xi} = \frac{1}{r} \cdot \sqrt{y}$  folgendes eingetragen:

- a) den errechneten Mittelwert von  $R_{N_r} = (N_r - \mathcal{N})$  eines jeden Intervalles  $I_i(y) = (i^2, (i+1)^2] \pi^2$  der Länge  $|I_i| = (2i+1) \cdot \pi^2$ ,  $i=1, 2, \dots, 18$ ; und zwar sowohl für  $r=1$  als auch für  $r=1/2$ ;
- b) den Oberflächenterm von  $\mathcal{N}(y) = \mathcal{N}(\xi, r^3)$ ;
- c) den graphisch gemittelten Verlauf von  $\overline{R_{N_r}}$  für  $r=1/2$  und  $r=1$ .

Der Abb. (6) entnehmen wir durch Anschauung:

- 1.) Für  $y=350\pi^2$  ist der mittlere Verlauf der Mittelwerte  $\overline{R_{N_{1/2}}}$  erst auf etwa  $(-1/2)$  angewachsen. Wegen  $(\overline{R_{N_{1/2}}} - \overline{R_N}) = (\overline{N_{1/2}} - \overline{N}) = -\frac{1}{2}$  (s. II(41)) unterscheiden sich also im Mittel die wahre Teilchenzahl  $N$  von dem Wert des asymptotischen Ausdrucks  $\mathcal{N}$  nicht wesentlich: bis zu  $N=2796$  ist sogar  $|\overline{N} - \mathcal{N}| = 1/2$ .
- 2.) Offensichtlich hängt der Verlauf der repräsentativen Werte  $N_r(y_n)$  nur linear von der Wahl von  $r$  ab. Sowohl für  $r=1/2$  wie für  $r=1$  sind  $\overline{R_{N_r}(y)}$  und damit  $(\overline{N_{1/2}} - \overline{N})$  annähernd linear. Da der Oberflächenterm von  $\mathcal{N}(y)$  quadratisch in  $\sqrt{y}$  ist (II(21)), haben wir also für das betrachtete  $y$ -Gebiet

$$(13) \quad \overline{R_{N_r}(y)} \text{ (Oberflächenterm)} \sim \frac{1}{\sqrt{y}} = o(1) \quad \text{für } 0 \leq r < 1.$$

Damit beschreibt für  $N \leq 2796$   $\mathcal{N}(y)$  den mittleren Verlauf von  $N(y_n)$  in mindestens zweiter (nach dem unter 1.) genannten wahrscheinlich sogar in mindestens 3.ter) Näherung. Wir erwarten, dass diese Verhältnisse sich auch für asymptotisch grosse  $N$  nicht wesentlich ändern.

2a) Oberflächenterm der Gesamtenergie

Den mittleren Verlauf von  $K(N)$  und  $K(y_n)$  untersuchen wir jetzt mit Hilfe des in Kap. II (e,3) beschriebenen Ausgleichsverfahrens. Dazu gehen wir gemäss der in (IIe) formulierten Darstellung des Verfahrens von den Zuordnungen (s,II(36a)) aus:

$$(14) \quad Y_s(\sqrt{y_n}) := \frac{32\pi}{y_n^{3/2}} \cdot \{K_r(y_n) - \bar{K}(y_n)\}$$

und

$$(15) \quad Y_s(N_r^{1/3}) := \frac{32\pi}{N_r} \cdot \{K_r(N_r) - \bar{K}(N_r)\}$$

die wir in irgendeinem gegebenen Intervall durch Ausgleichsfunktionen der Art

$$(16) \quad \bar{Y}_s(\sqrt{y}) := a_{s,y} \cdot \sqrt{y} + b_{s,y}$$

und

$$(17) \quad \bar{Y}_s(N^{1/3}) := a_{s,N} \cdot (6\pi^2 N)^{1/3} + b_{s,N}$$

mit den beiden Parametern a und b ausgleichen. Nach Ausgleichung von (14) ergibt sich:

$$(18) \quad \bar{K}_r(y_n) = \bar{K}(y_n) + y_n^{3/2} \cdot \frac{1}{32\pi} \cdot \bar{Y}_s(y_n)$$

und nach Einsetzen von (17) und (II(22))

$$(19) \quad \bar{K}_r(y_n) = \frac{1}{10\pi^2} \cdot y_n^{5/2} - \frac{1}{32\pi} \cdot y_n^2 \cdot (s - a_{s,y}) + \frac{1}{24\pi^2} \cdot y_n^{3/2} \cdot (l + \frac{3}{4} \cdot b_{s,y}).$$

Ebenso gibt auch  $a_{s,N}$  die zur optimalen Beschreibung des mittleren Verlaufes von  $K_r(N_r)$  durch  $\bar{K}(N)$  bei festgehaltenem Volumeterm notwendige Änderung des Gestaltparameters s im Koeffizienten des Oberflächenterms von  $\bar{K}$  an. Die Parameter b ergeben eine analoge Aussage über den Krümmungsterm.

Falls wir annehmen können, daß nicht nur (wie in (19)) der Volumeterm, sondern auch der Oberflächenterm von  $\bar{K}$  zur Beschreibung des mittleren Verlaufes von K durch  $\bar{K}$  nicht geändert zu werden braucht, können wir (analog zu (14)-(19)) von den Zuordnungen

$$(20) \quad Y_L(\sqrt{y_n}) := \frac{24\pi^2}{y_n} \cdot \{K_r(y_n) - \bar{K}(y_n)\}$$

und

$$(21) \quad Y_L(N_r^{1/3}) := \frac{1}{N_r^{2/3}} \cdot \{K_r(N_r) - \bar{K}(N_r)\}$$

ausgehen und diese linear durch Geraden der Art (16) bzw. (17) ausgleichen. Die zugehörigen Parameter  $a$  und  $b$  kennzeichnen wir hier durch den Index  $L$ . Der Koeffizient  $a_{L,y}$  gibt dann die zur optimalen Beschreibung des mittleren Verlaufes von  $K_r(y_n)$  durch  $\bar{K}(y)$  bei festgehaltenem Volum- und Oberflächenterm notwendige Änderung des Gestaltparameters  $l$  im Koeffizienten des Krümmungstermes von  $\bar{K}(y)$  an. Ebenso gibt  $a_{L,N}$  die notwendige Änderung des Koeffizienten des Krümmungstermes von  $\bar{K}(N)$  an (s. II(22) und (23)).

Die zur Bestimmung der Koeffizienten  $a$  und  $b$  der vier Ausgleichsgeraden {der zu (20) und (21) gehörigen, sowie (16) und (17)} notwendigen Ausgleichsrechnungen wurden für mehrere grössere  $y = \pi^2 \cdot \xi$  - Intervalle durchgeführt, nämlich für die Intervalle  $](\xi) = (0, 32]$ ,  $(0, 100]$ ,  $(32, 132]$ ,  $(132, 232]$  und  $(232, 332]$ . Sämtliche Rechnungen wurden elektronisch ausgeführt. Die unmittelbar von der Rechenmaschine ausgedruckten Ergebnisse sind für den Anhang 2 photokopiert worden. In Tabelle 2 haben wir sie abgerundet und in % des zugehörigen Oberflächen- bzw. Krümmungskoeffizienten zusammengestellt.

In Tabelle 2 sind nun eingetragen:

In Spalte 1 das jeweils zugrunde gelegte Ausgleichsintervall  $](\xi)$ ; in Spalte 2 seine Länge  $|I|$ , gemessen in  $\sqrt{\xi}$  bzw.  $N^{1/2}$ ; in Spalte 4 bzw. 10 die mittlere Streuung  $p$  (Def. s. II (32)) der Einzelwerte der Zuordnungen  $Y$  um ihren mittleren Verlauf;

in Spalte 5 der Quotient  $P/|I|$ , welcher als erster Hinweis auf die Zuverlässigkeit der Ausgleichsgeraden gelten kann. Je kleiner  $P/|I|$  desto genauere (d.h. mit umso kleineren Unsicherheiten behaftete) Ergebnisse erwarten wir.

In den Spalten 6-9 und 11-12 sind dann die errechneten Werte der Koeffizienten der Ausgleichsgeraden und die dazugehörigen statistischen Fehler angegeben, und zwar in %, bezogen auf den Oberflächen- bzw. Krümmungskoeffizienten von  $\bar{K}$ .

Eine genaue Erläuterung und Bewertung der Rechenergebnisse folgt nun im nächsten Absatz.

### Erläuterung der Ergebnisse

Was besagen nun die in Tabelle 2 angegebenen Werte?

Die vollständige Information über das Ergebnis der Ausgleichs-

	Sp. 1	Sp. 2	Sp. 3	Sp. 4	Sp. 5	Sp. 6	Sp. 7	Sp. 8	Sp. 9	Sp. 10	Sp. 11	Sp. 12
	$\xi(\xi)$	$\Delta N$	$ \xi $	$P_s$	$P_s/ \xi $	$a_s/A_s \%$	$P a_s/A_s \%$	$b_s/B \%$	$P b_s/B \%$	$P_L$	$a_L/A_L \%$	$P a_L/A_L \%$
und $Y_s(\sqrt{y_s})$ mit $Y_L(\sqrt{y_s})$ $A_s = -6;$ $A_L = 18,85;$ $B_s = 2,55;$	000 - 032	60	5,7	2,1	0,37	+0,20	8,3	+20	82	74	+36	94
	000 - 100	410	10,0	3,1	0,31	+2,6	3,0	43	51	188	-39	59
	32 - 132	585	5,8	3,1	0,53	+1,5	3,7	24	78	206	-40	79
	132 - 232	941	3,7	3,9	1,1	+4,9	6,7	150	210	390	-163	213
	232 - 332	1205	3,0	3,9	1,3	+0,6	8,5	21	340	488	-104	338
und $Y_s(N^{1/3})$ mit $Y_L(N^{1/3})$ $A_s = 6;$ $A_L = 0,1224;$ $B_s = 0,1224.$	000 - 032	60	3,9	1,5	0,39	10,5	1,9	7400	1020	0,083	12,3	5,1
	000 - 100	410	7,4	1,2	0,16	2,6	0,37	3380	380	0,075	4,7	1,16
	32 - 132	585	8,4	0,27	0,32	0,43	0,103	960	151	0,063	0,61	1,18
	132 - 232	941	9,8	0,18	0,018	0,11	0,101	430	198	0,071	0,21	1,92
	232 - 332	1205	10,7	0,12	0,011	0,095	0,080	420	199	0,058	0,42	1,97

Tabelle 2

Rechnungen für ein bestimmtes Intervall geben wir durch Korrekturfaktoren  $\kappa$  an, mit denen die Oberflächen- bzw. Krümmungsterme der asymptotischen Ausdrücke zu multiplizieren sind, um unser Kenntnis über den mittleren Verlauf der entsprechenden exakten Zuordnungen zu vermitteln, also z. B.

$$(22) \quad \overline{K}_r(y) = \frac{1}{10\pi^2} y^{5/2} - \frac{3}{32\pi} \cdot \kappa_{s,y} \cdot y^{4/2} + \frac{6}{24\pi^2} \cdot \kappa_{L,y} \cdot y^{3/2};$$

dabei ist

$$(23) \quad \kappa_s := \left\{ 1 + \left(\frac{a}{A}\right) + \left(\frac{p_a}{A}\right) \cdot t_{\beta} \right\} \quad \text{und} \quad \kappa_L := \left\{ 1 + \left(\frac{b}{B}\right) + \left(\frac{p_b}{B}\right) \cdot t_{\beta} \right\}.$$

Die Zahlenwerte für  $a/A$ ,  $p_a/A$ , u. s. w. sind dabei der Tabelle 2 zu entnehmen.  $t_{\beta}$  sind die aus der mathematischen Statistik bekannten sogenannten "t-Fraktile".

Der Zahlenwert von  $t_{\beta}$  findet sich für jede gewünschte Sicherheit  $\beta$  des Ergebnisses in Abhängigkeit von der Zahl der Freiheitsgrade der Ausgleichsrechnung (Zahl der verwerteten Punkte minus Zahl der angepaßten Koeffizienten) tabelliert; so z. B. in Höflich: Tabellenwerk der mathematischen Statistik.

Die Koeffizienten  $\kappa$  für  $\overline{K}_r(N)$  sind in gleicher Weise aus Werten der Tabelle 2 zusammzusetzen. Für  $L_r(N)$  erhalten wir für  $\kappa_{s,L(N)}$  aus  $\kappa_{s,y} \cdot \kappa_{L,y}$  durch Einsetzen von (II(22) in (II(23))

$$(24) \quad \kappa_{s,L(N)} = 5 \cdot \kappa_{s,K(N)} - 4 \cdot \kappa_{s,K(y)}.$$

Wir vergleichen nun die für fünf verschiedene Ausgleichsintervalle berechneten Faktoren  $\kappa$  miteinander.

Wir erwarten, daß <sup>der Wert der</sup> ~~die~~ Koeffizienten  $a/A$  bzw.  $b/B$  in  $\kappa$  vor allem von der Lage des Intervalles abhängen, Die Zuverlässigkeit dieser Koeffizienten dagegen, d. h. ihre mittleren statistischen Fehler  $p_a$  bzw.  $p_b$ , sollte hauptsächlich von der Länge des Ausgleichsintervalles und der Größe der mittleren Streuung  $p$  abhängig sein.

Die Lage endlich langer Ausgleichsintervalle auf der  $\xi$ -Zahlengeraden "verfälscht" dann die erhaltenen Koeffizienten  $a$  bzw.  $b$ , wenn der Restterm nicht null, sondern selbst eine Funktion von  $\xi$  ist. Das ist eine Folge der großen Zahl der Freiheitsgrade unserer Ausgleichs-

rechnung bzw. des speziellen Ansatzes der von uns verwendeten Ausgleichsfunktion. Der mittlere Verlauf des Restterms im Intervall wurde im Ansatz für  $\bar{K}$  nicht berücksichtigt. Er äußert sich daher zwangsläufig in einer "Verfälschung" der Koeffizienten  $a$  und  $b$ . Diese wird umso geringer sein, je weiter die Lage des Intervalles zu großem  $N$  hin verschoben ist. Dabei nehmen wir an, daß der Restterm im Mittel eine relativ zum Oberflächenterm abnehmende Funktion von  $N$  ist. Vergleichen wir nun die Koeffizienten  $a_n$  von  $\bar{Y}_n(N^{1/3})$  in der Tabelle 2 (Sp.6) miteinander, so stellen wir fest, daß die Koeffizienten  $a/A$ , die "Reinmischungen", zwar signifikant von null verschieden sind, aber für größere  $N$  abnehmen.

Damit ist durch numerische Rechnung an fünf verschiedenen Intervallen bestätigt, daß der mittlere Verlauf von  $K(N)$  für wachsende  $N$  sich immer mehr (in zweiter Näherung) dem Verlauf von  $\bar{K}(N)$  nähert.

Die Länge des Ausgleichsintervalles und die mittlere Streuung  $p$  haben Einfluß auf die Zuverlässigkeit der erhaltenen Werte für  $a$  bzw.  $b$ . Wir erwarten, daß die mittleren statistischen Fehler  $p_a$  bzw.  $p_b$  immer geringer werden, je länger das Intervall und je kleiner die mittlere Streuung  $p$  ist. Zur Prüfung dieser Arbeitshypothese haben wir  $p/|a|$  in Spalte 5 der Tabelle 2 eingetragen; vergleichen wir die Werte der Spalten 5 und 7 miteinander, so sehen wir diese überall bestätigt. Wir entnehmen weiter, daß für  $\bar{Y}(\sqrt{y})$  das ( $\beta(\xi) = (0,100]$ ) -Intervall die zuverlässigsten Ergebnisse liefert. Die anderen  $|\beta(\sqrt{y})|$  sind zu klein. Außerdem wächst die mittlere Streuung mit  $\sqrt{y}$ . Um kleinere Fehlergrenzen zu erhalten, müßte also ein erheblich größerer Rechenaufwand betrieben werden. Unser bestes Ergebnis für  $\chi_{s,k(y)}$  ist aber immerhin:

$$(25) \quad \chi_{s,k(y)} = 1 + (2.6\%) \pm (3.0\%) \cdot t_{\beta}$$

Für  $\bar{Y}_n(N^{1/3})$  wird zwar die mittlere Streuung bei langsam zunehmender Intervalllänge immer kleiner, doch wird das Tempo der zugehörigen Genauigkeitssteigerung für jedes folgende Intervall trotz wachsendem Rechenaufwand langsamer. Unser bestes Ergebnis ist:

$$(26) \quad \chi_{s,k(N)} = 1 + (0.095\%) \pm (0.08\%) \cdot t_{\beta}$$



Damit ist nach (24) auch  $\chi_{s_1}(N)$  bis auf höchstens 10% gleich eins.

Damit haben wir für den Spezialfall eines in einem würfelförmigen Hohlraum befindlichen idealen Fermigases die in Kap. IIa) aufgestellte Hypothese II innerhalb der Rechengenauigkeit bestätigt. In dem betrachteten Bereich ( $\sim N \leq 2796$ ) kann der mittlere Verlauf von Teilchenzahl  $N$  und Energie  $H$  in zweiter Näherung durch die entsprechenden asymptotischen Ausdrücke  $\chi$  und  $\xi$  beschrieben werden. Der Restterm ist im Mittel numerisch klein und von geringerer Potenz als der Oberflächenterm.

Wir prüfen nun die Hypothese II für den Spezialfall eines kugelförmigen Innengebietes.

## KAPITEL IV

In diesem Kapitel prüfen wir die Hypothese II für ein kugelförmiges Innengebiet. Wir gehen also von einem idealen Ferngas aus, welches durch das äußere Potential

$$(1) \quad \psi(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } |\vec{r}| < R \\ \infty & \text{für } |\vec{r}| > R \end{cases}, \quad R = \text{const} > 0; \quad |\vec{r}| = r,$$

gebunden ist. Wir erwarten, daß auch in diesem Fall die Zuordnungen für Teilchenzahl und Gesamtenergie des Systems in mindestens zweiter Näherung durch Ausdrücke richtig wiedergegeben werden, die wir in (II(21)-(24)) als Hypothese für beliebige Gestalt des Potentials formuliert haben.

Im Abschnitt a) dieses Kapitels geben wir eine Übersicht über einfache Eigenschaften der Eigenfunktionen und Eigenwerte. In den Abschnitten b) und c) wird das Ergebnis der numerischen Rechnungen mitgeteilt.

### a.) Eigenfunktionen und Eigenwerte

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung (II(2)) läßt sich für das Potential (1) separieren. Die Differentialgleichung für die Radialwellenfunktionen, die wir mit  $\mathcal{R}_\ell(r)$  bezeichnen, geht durch die Substitution  $\mathcal{R}_\ell(r) =: r F_\ell(r)$  in

$$F_\ell''(r) + \left( \varepsilon - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) F_\ell(r) = 0 \quad \text{über.}$$

Dabei ist  $\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E$  der Eigenwert. Mit  $x = \sqrt{\varepsilon} \cdot r$  ergibt sich

$$(2) \quad F_\ell''(x) + \left( 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right) F_\ell(x) = 0.$$

Dies ist die Differentialgleichung für die halbzahligen Zylinderfunktionen<sup>1)</sup>

$$(3) \quad F_\ell(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} \cdot J_{\ell+1/2}(x)$$

Es sei  $F_\ell(x)$  reell und habe für  $x=0$  einen endlichen Wert; ferner sei  $\ell$  ganzzahlig. Dann sind

$$(4) \quad F_\ell(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} \cdot J_{\ell+1/2}(x) = x \cdot J_\ell(x)$$

die "sphärischen Besselfunktionen". Diese Definition der "sphärischen Besselfunktionen" ist insofern praktisch, als für sie gilt:

1) die Wronski-Determinante der zugehörigen Differentialgleichung (3) ist gleich eins.

2) Die Funktionen  $F_\ell(x)$  sind Grenzfälle der Coulombwellenfunktionen (für  $\eta \rightarrow 0$ ).

3) Die Funktionen  $F_\ell(x)$  gehen für  $x \rightarrow \infty$  asymptotisch in die trigonometrischen Funktionen  $\sin(x)$  bzw.  $\cos(x)$  über.

Es gelten die Rekursionsformeln:

$$(5a) \quad \ell_- \cdot F_\ell = F_{\ell-1} \quad ; \quad \text{mit} \quad \ell_- := \frac{\ell}{x} + \frac{d}{dx} \quad ;$$

$$(5b) \quad \ell_+ \cdot F_\ell = F_{\ell+1} \quad ; \quad \text{mit} \quad \ell_+ := \frac{\ell+1}{x} - \frac{d}{dx} \quad ;$$

und es gilt

$$\ell_- + (\ell-1)_+ = \frac{2\ell}{x} \quad ; \quad \ell_- - (\ell-1)_+ = 2 \frac{d}{dx} \quad ; \quad (\ell-1)_+ \cdot \ell_- = 1 .$$

Aus der Differentialgleichung folgt, daß die Lösungen  $F_\ell(x)$  für  $x > \sqrt{\ell(\ell+1)}$  oszillieren und für  $x < \sqrt{\ell(\ell+1)}$  exponentiellen Charakter haben.

Die  $F_\ell(x)$  sind elementare Funktionen von  $x$ ,  $\sin(x)$  und  $\cos(x)$ ; exakt gilt:

$$(6) \quad F_\ell(x) = \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \cdot \left\{ \sum_{\nu=0}^{\ell} (-1)^\nu \cdot K_{2\nu, \ell}(x) \right\} + \cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \cdot \left\{ \sum_{\nu=0}^{\ell} (-1)^\nu \cdot K_{2\nu+1, \ell}(x) \right\}$$

mit  $K_{\nu, \ell} := \prod_{m=1}^{\nu} \left\{ \ell(\ell+1) - m(m-1) \right\} / 2^{\nu} m^{\nu}$

Wegen  $[\ell(\ell+1) - m(m-1)] = (\ell+m)(\ell-m+1)$  und  $\prod_{m=1}^{2\nu} (\ell+m)(\ell-m+1) = \frac{(\ell+2\nu)!}{(\ell-2\nu)!}$  folgt die "Fakultätendarstellung" der sphärischen Besselfunktionen:

$$(7) \quad F_\ell(x) = \sum_{\nu=0}^{\ell} \sin\left(x - \frac{(\ell-\nu)\pi}{2}\right) \cdot R_\nu^\ell \quad ; \quad R_\nu^\ell = \frac{(\ell+\nu)!}{(2x)^\nu (\ell-\nu)! \nu!}$$

Die Eigenwerte  $\xi_{\ell\nu}$  erhalten wir nun, wenn wir für die  $F_\ell(x)$  die Randbedingung beachten, die dem Einsetzen des Potentials (1) in die Schrödingergleichung äquivalent ist:

$$(8) \quad F_\ell(x_{\ell v}) = 0 \quad \text{für } r=R, \quad \text{d.h. für } x_{\ell v} = \sqrt{\epsilon_{\ell v}} \cdot R.$$

Die Nullstellen der sphärischen Besselfunktionen bestimmen also die Eigenwerte. Die Nullstellen jeder einzelnen Funktion  $F_\ell(x)$  seien in Richtung wachsender  $x$  durchnummeriert, beginnend mit der ersten Nullstelle, für die  $x_{\ell v} > 0$  ist. Der zu  $x_{\ell v}$  gehörige Eigenwert  $\epsilon_{\ell v} = x_{\ell v}^2 / R^2$  ist, wegen der beim Übergang von (2) zur vollen zeitunabhängigen Schrödingergleichung zur Radialwellenfunktion hinzutretenden Winkelfunktion, noch  $(2l+1)$ -fach entartet:

$$(9) \quad F(\epsilon_{\ell v}) = 2\ell + 1.$$

Das Eigenwertspektrum hat folgende Eigenschaften:

- 1) es gibt keine zufällige Entartung, d.h. aus  $x_{\ell v} = x_{\ell' v}$  folgt  $\ell = \ell'$ ,  $v = v'$ .
- 2) es gilt ein "erster Trennungssatz" ( $F_\ell, F_{\ell+1}$  trennen sich "wie sin und cos"):

$$(10) \quad x_{\ell v} < x_{\ell+1, v} < x_{\ell, v+1} < x_{\ell+1, v+1} < \dots$$

Näherungsweise fallen nach (6) für  $x \rightarrow \infty$  und endliches  $l$  die Nullstellen von  $F_\ell, F_{\ell+2}, \dots, F_{\ell+2m}$  zusammen und liegen in der Nähe der Nullstellen von sin bzw. cos. Wegen (1) dürfen diese jedoch nicht genau zusammenfallen; es gilt vielmehr ein

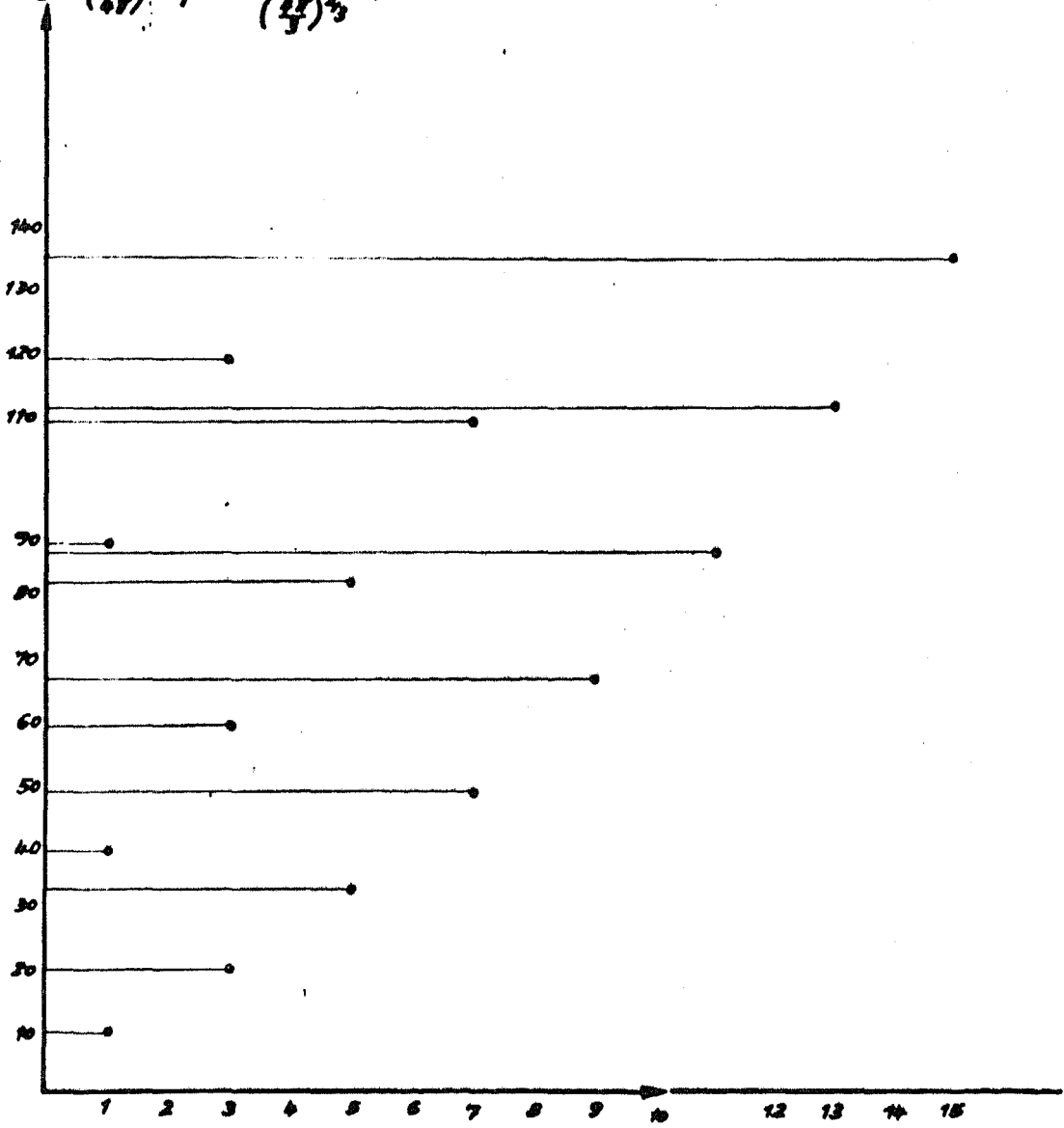
- 3) "zweiter Trennungssatz" ("Eigenwerte für höheres  $l$  sinken etwas ab")

$$(11) \quad \dots < x_{\ell v} < x_{\ell-2, v+2} < \dots$$

Für  $N \leq 80$  ist das Spektrum der Eigenwerte  $\epsilon_{\ell v \mu}$ ,  $\mu=1, 2, \dots, (2l+1)$ ; für  $R=1$  in Zeichnung (11) graphisch dargestellt. Es zeigt außerordentlich starke Schalenstruktureffekte, und zwar sind benachbarte Eigenniveaus oft sehr verschieden entartet. Die Werte  $x_{\ell v}$  für die Eigenwertniveaus können den Besselfunktionsnullstellentafeln entnommen werden. Für uns besteht das Problem nun darin, aus den bekannten Tafeln sämtliche Nullstellen herauszusuchen, die kleiner sind als irgendeine (möglichst große) vorgegebene Schranke. Diese Nullstellen sind dann der Größe nach zu ordnen. In dem (R.M.S.T. Vol. III, Part. I)-Tafelwerk, dem 3. Zt. für Besselfunktionsnullstellen vollständigsten und genauesten, sind alle Nullstellen bis zu bestimmten Werten von  $v$  und  $l$  aufwärts tabelliert. Es liessen sich jedoch nur genau 77 Nullstellen heraussuchen, die, ihrem Betrage nach geordnet, eine lückenlose Reihenfolge bilden, <sup>d.h.</sup> zwischen ihnen kann auf Grund der beiden Trennungssätze keine weitere Nullstelle mehr liegen. Die Sortierung dieser 77 Nullstellen wurde elektronisch mit Hilfe eines

Abb. 11

$$E = \left(\frac{z}{4F}\right)^{2/3} \cdot Y = \frac{V^{2/3}}{\left(\frac{4F}{Y}\right)^{2/3}} \cdot h$$



$$F(E, 0) = F(Y, 0) = F(h, 0)$$

Permutationsverfahren ausgeführt (s. Anhang 2).

### b.) Teilchenzahl und Energie

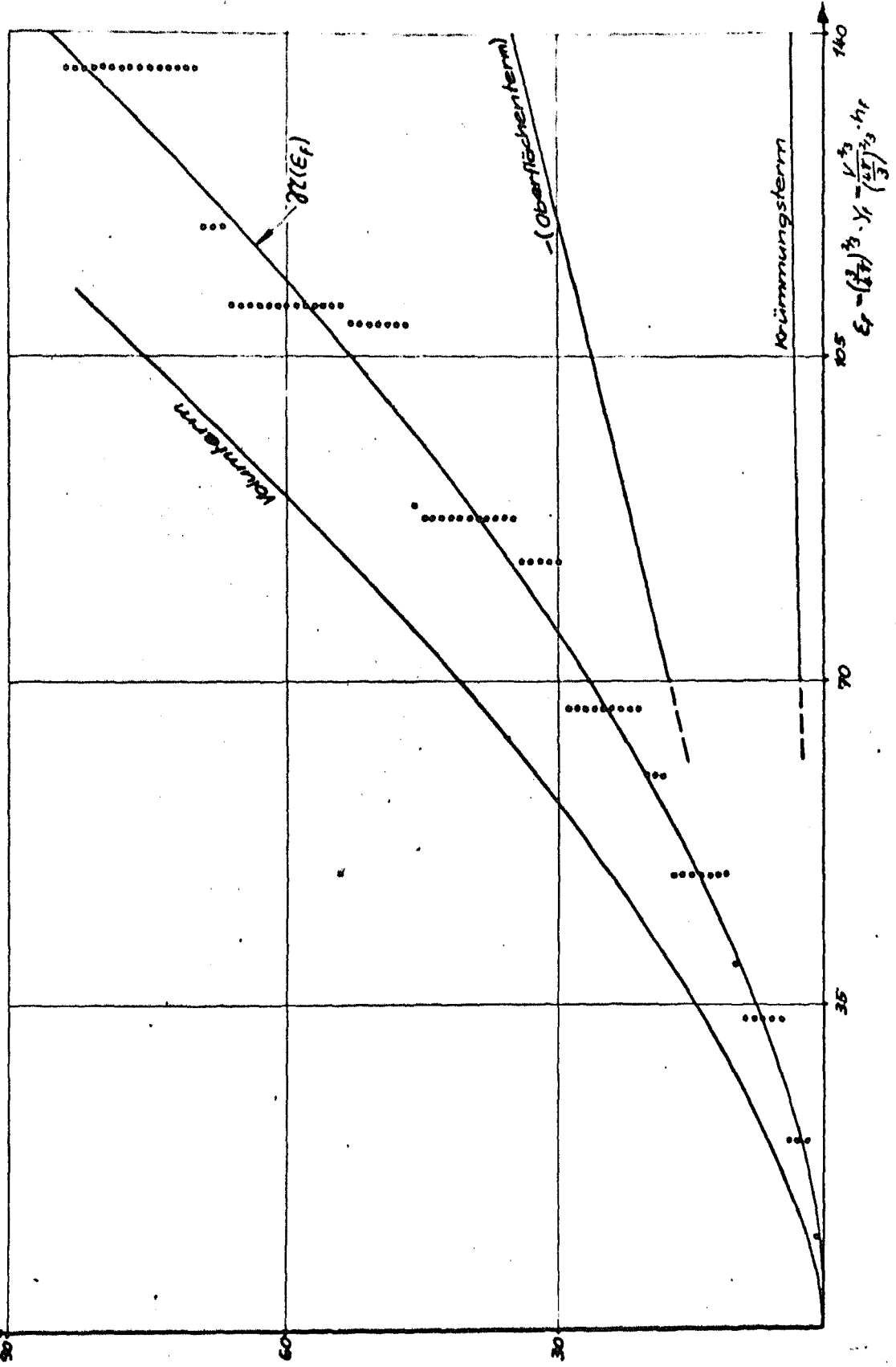
Aus dem angegebenen Eigenwertspektrum haben wir gemäß ihren Definitionen durch einfaches Abzählen bzw. Aufsummieren die 80 tiefsten Werte von  $y(N)$  und  $K(y)$  bestimmt. Zur Veranschaulichung dieser Zuordnung von  $y, N$  und  $K$  wurden  $N(y)$  in Abb. (12),  $K(y)$  in Abb. (13),  $K(N)$  in Abb. (14) und  $L(N)=K/y$  in Abb. (15) graphisch dargestellt. Man erkennt die stark ausgeprägten Schalenstruktureffekte. In die Abbildungen wurde ausserdem der Verlauf des jeweils zugehörigen asymptotischen Ausdrucks eingetragen, sowie einzeln dessen drei Summanden, die als Volum-, Oberflächen- und Krümmungsterm bezeichnet sind.

Wir entnehmen diesen vier graphischen Darstellungen unmittelbar durch Anschauung:

- 1) Der allgemeine Verlauf der exakten Zuordnungen wird im betrachteten Bereich ganz gut durch die entsprechenden asymptotischen Ausdrücke wiedergegeben. Die relativen Abweichungen sind klein; daher ist es zumindest für kleine Variablenwerte sinnvoll, die ursprünglich für den Würfel und für  $as.$  große Variablenwerte angegebenen  $as.$  Ausdrücke als numerische Näherung der exakten Zuordnungen zu verwenden.
- 2) Für sich allein ist der Volumeterm der asymptotischen Ausdrücke für so kleine Teilchenzahlen als numerische Näherung der exakten Werte nicht brauchbar, obgleich asymptotisch Oberflächen- und Krümmungsterm relativ zu ihm klein werden. Nur, wenn man keinen der drei Terme vernachlässigt, werden die asymptotischen Ausdrücke für kleine Werte der unabhängigen Variablen als numerische Näherung brauchbar.
- 3) Diese numerischen Näherungen sind sogar für die kleinsten Werte der unabhängigen Variablen verwendbar.
- 4) Eine kleine, anscheinend systematische Abweichung ist nur in der Abb. (14) zu erkennen. Es ist  $K(N,0) > \bar{K}(N,0)$ . Wir fragen nun, ob diese systematische Abweichung durch eine Änderung des Koeffizienten des Oberflächenterms von  $\bar{K}(N,0)$  für alle  $N$  behoben oder vermindert werden kann, d.h. ob der Restterm von gleicher oder geringerer Potenz von  $N$  ist als der Oberflächenterm.

Abb. 12

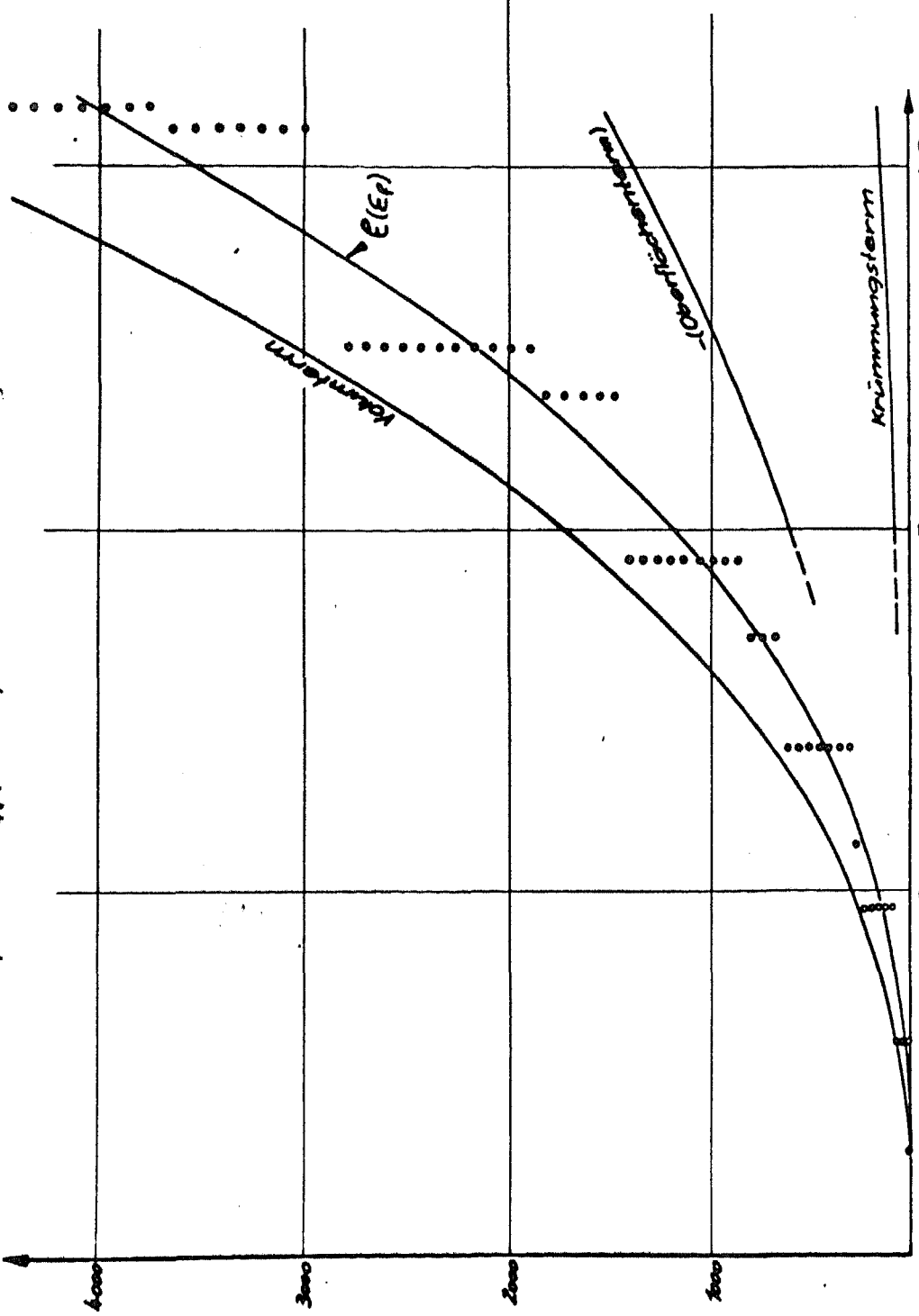
$N(x_1, x_0) = N(x_1, 0)$



$\epsilon_1 = \left(\frac{V_1}{V_0}\right)^3 \cdot \gamma = \frac{V_1^3}{\left(\frac{V_0}{3}\right)^3} \cdot \gamma$

$$E(\epsilon_f) = \left(\frac{3}{4T}\right)^{3/2} \cdot V \cdot H(h_f, V, 0) = \left(\frac{3}{4T}\right)^{3/2} \cdot K(Y_f, 0)$$

Abb. 13

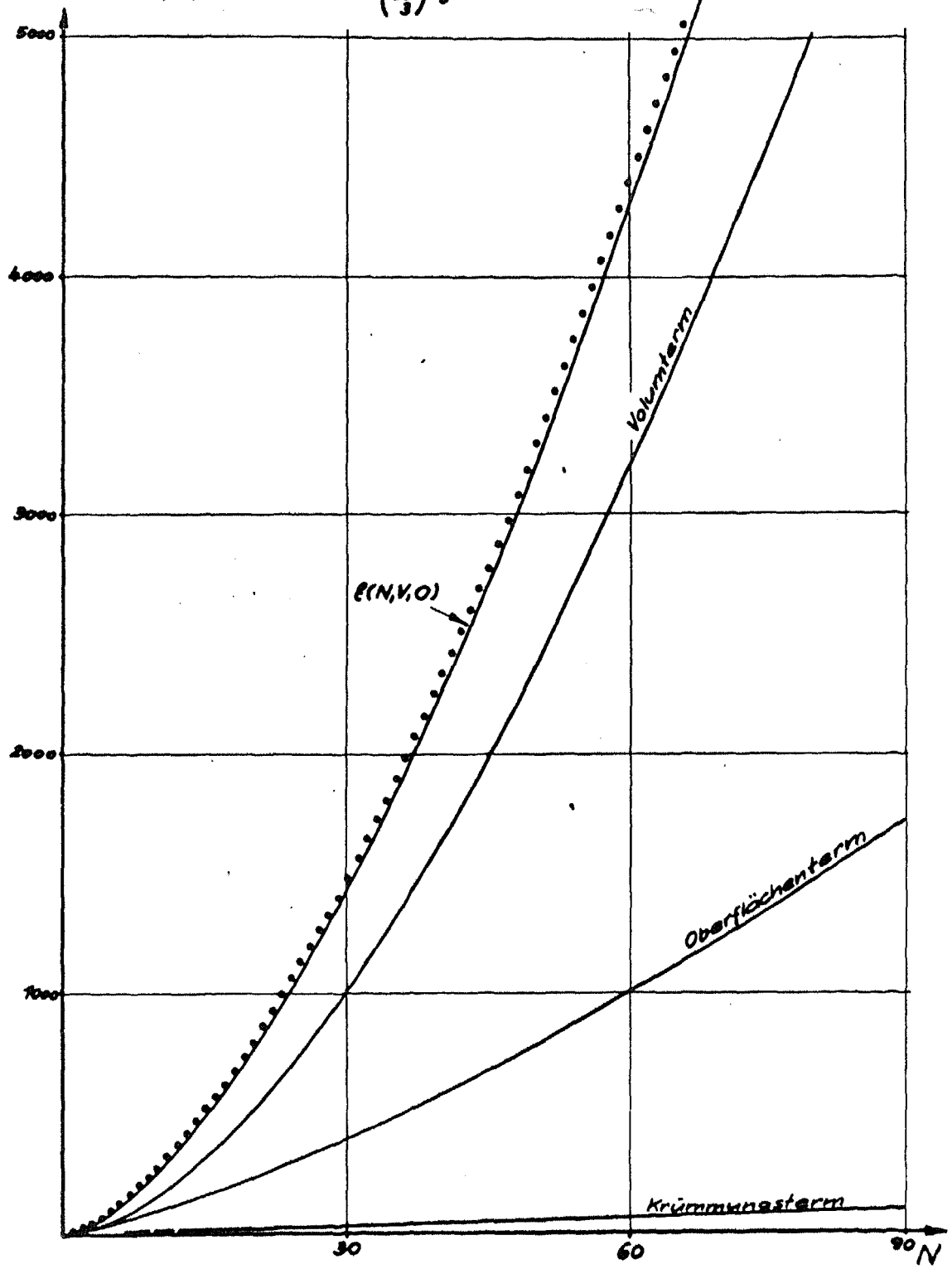


$$\epsilon_f = \left(\frac{3}{4T}\right)^{3/2} \cdot Y_f = \frac{V^{3/2}}{\left(\frac{3}{4T}\right)^{3/2}} \cdot h_f$$



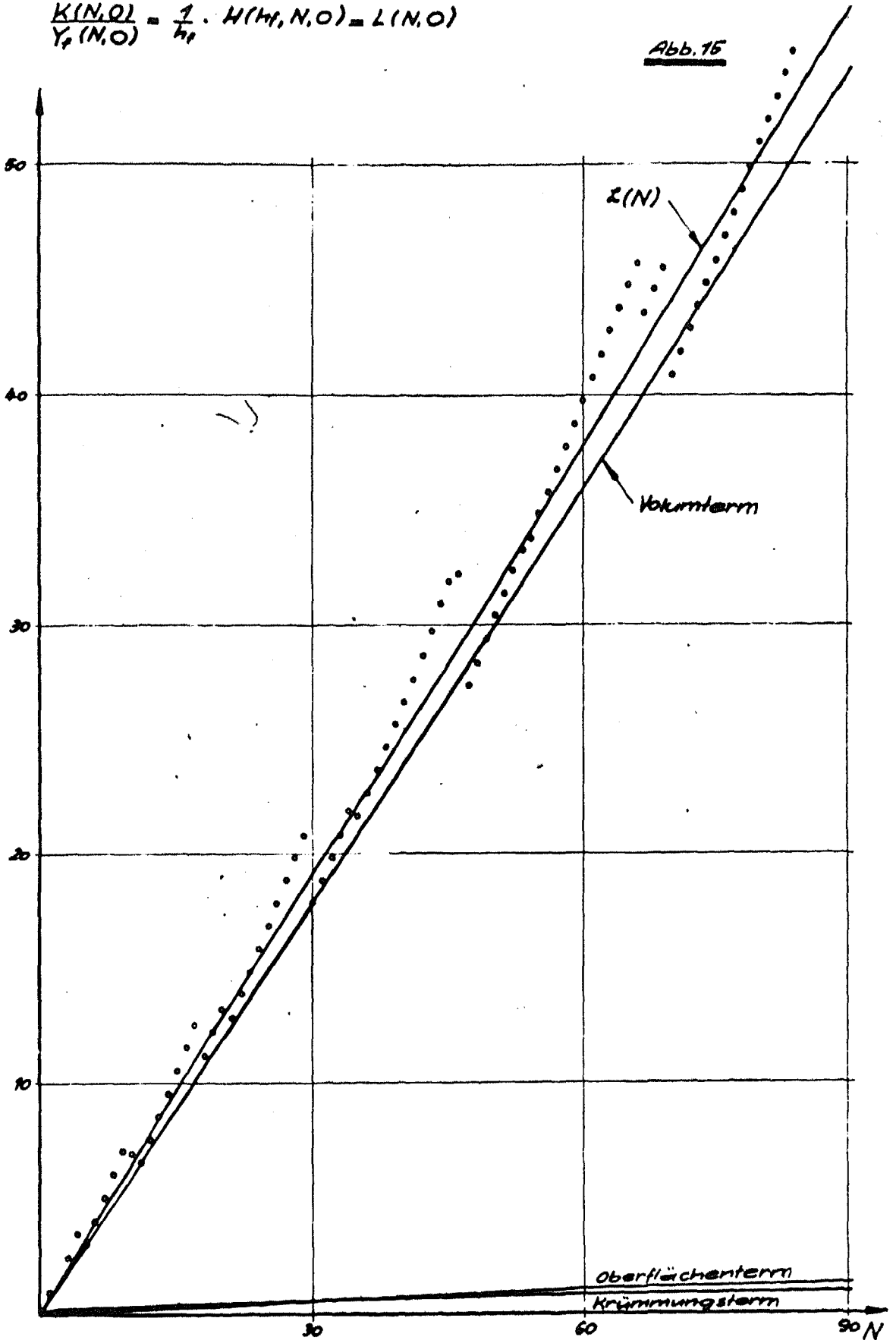
Abb. 14

$$E(N, V, O) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} \cdot K(N, O) = \frac{V^{2/3}}{\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{2/3}} \cdot H(N, V, O)$$



$$\frac{K(N,0)}{Y_f(N,0)} = \frac{1}{h_f} \cdot H(H_f, N, 0) = L(N, 0)$$

Abb. 15



### c.) Der Oberflächenterm der Gesamtenergie

Wir suchen jetzt eine Antwort auf die Frage, ob die asymptotischen Ausdrücke in zweiter Näherung den mittleren Verlauf der exakten Zuordnungen richtig wiedergeben. Dazu prüfen wir mittels einer Ausgleichsrechnung (analog zu Kap. IIIc)), ob die asymptotischen Ausdrücke durch eine Abänderung ihres Oberflächen- und Krümmungstermkoeffizienten zur näherungsweise Beschreibung des mittleren Verlaufes der exakten Zuordnungen besser geeignet gemacht werden können.

Als Ausgleichsverfahren haben wir das in (Kap. IIe2) angegebene der "gewichteten Ausgleichung repräsentativer Werte" verwendet. Es stimmt in 4.ter Näherung mit einer exakten Ausgleichung aller Werte der exakten Zuordnungen überein. Die Anwendung des für den Fall des Würfels benutzten Näherungsverfahrens ("ungewichtete Ausgleichung repräsentativer Werte") erschien uns hier nicht zweckmässig, weil das Eigenwertpektrum der Kugel im Gegensatz zum Würfelspektrum ausserordentlich regelmässige ("rhythmische") Schalenstruktureffekte zeigt: einzelne Eigenwerte sind sehr hoch entartet; sie liegen systematisch neben solchen von extrem niedrigem Entartungsgrad; beide mit dem Gewicht eins gezählt ergeben einen systematisch anderen Verlauf des errechneten mittleren Verlaufes.

Das Ausgleichsintervall wurde so gross wie möglich gewählt, um kleine Fehlerschranken zu erhalten. Die uns zur Verfügung stehenden 77 niedrigsten Eigenniveaus gestatten eine Berechnung bis zu  $N=1065$ . Als Ausgleichsintervall haben wir also in der Bezeichnung von Kap. IIIc):

Tabelle 3

$\exists(\varepsilon)$	$ \exists(\sqrt{\varepsilon}) $	$ \exists(N^{1/3}) $	$\Delta N$	$A_s$
0-676	25,95	39,55	1065	4,836

Dabei ist  $\varepsilon = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} \cdot y$ .

In diesem Ausgleichsintervall haben wir nun den mittleren Verlauf von  $K(y)$  und  $K(N)$  bestimmt. Die Rechnungen wurden elektronisch ausgeführt. Das Algol-60-Programm und die von der Rechenmaschine ausgedruckten Ergebnisse sind in Anhang 2 angegeben.

Bezeichnet man mit  $\chi_s$ , wie in Kap. IIIc den Faktor, mit dem der Oberflächenterm von  $\bar{\alpha}$  zu multiplizieren ist, um die Ausgleichsfunktion  $\bar{K}$  zu erhalten, so haben wir als Ergebnis:

$$(12) \quad \left\{ \begin{array}{l} \chi_{s, K(y)} = (1 + (8,4\%) \pm (3,2\%) \cdot t_s) \\ \chi_{s, K(N)} = (1 + (1,2\%) \pm (0,072\%) \cdot t_s) \end{array} \right.$$

Daher weicht auch (nach (24))  $\chi_{s, L(N)}$  höchstens um 27% von eins ab.

Nach dem in Kap. III (an den für verschiedene Ausgleichsintervalle erhaltenen Ergebnissen) durchgeführten Vergleich erscheint es möglich und wahrscheinlich, dass die systematischen Abweichungen der Koeffizienten  $\chi$  von eins um 8 bzw. 1% von einer mit wachsenden  $N$  bzw.  $y$  relativ zum Oberflächenterm abnehmenden Beimischung (Restterm) herrühren.

Damit betrachten wir die in Kap. II formulierte Hypothese II auch für den Spezialfall, daß das ideale Fermigas sich in einem kugelförmigen Hohlraum befindet, innerhalb der für den betrachteten Variablenbereich erzielbaren Zuverlässigkeit als bestätigt. Der mittlere Verlauf von Teilchenzahl  $N$  und Energie  $H$  des Systems kann für nicht zu grosse Fermigrenzenergien in zweiter Näherung durch die asymptotischen Ausdrücke  $\chi$  bzw.  $\xi$  beschrieben werden. Auch für kleine Teilchenzahlen, welche denen der bekannten Atomkerne entsprechen, sind die as. Ausdrücke zur numerischen Näherung der Werte der ex. Zuordnungen gut verwendbar.

Dass die ursprünglich für ein würfelförmiges Innengebiet angegebenen as. Ausdrücke die Verhältnisse auch, wenn ein kugelförmiges Potential vorliegt, mit vergleichbarer Genauigkeit wiedergeben, legt die Vermutung nahe, dass die as. Ausdrücke gestaltungsabhängig sind. (s. auch Hypothese I). Es sei jetzt noch kurz die Hyp. II am Zylinder geprüft.

## KAPITEL V

In diesem Kapitel prüfen wir die Hypothese II für Testkörper von der Gestalt eines Zylinders. Bei den dazu notwendigen numerischen Rechnungen, die sämtlich von Hand ausgeführt wurden, beschränkten wir uns auf solche Zylinder, für die das Verhältnis  $\beta$  von Länge  $p$  zu Radius  $R$  gleich  $1/2\pi$  ist, also  $\beta = 1/2\pi$ . Es sollen ausserdem nur "offene" Zylinder betrachtet werden, d.h. dem idealen Fermigas soll nur die Mantelfläche als Oberfläche - im Sinne der Erläuterungen in der Einleitung dieser Arbeit - erscheinen. Die Wellenfunktionen  $\varphi$  der einzelnen Fermionen sollen also den Randbedingungen

$$1. \quad \varphi(\vec{r}) = 0 \quad \text{falls} \quad x_1^2 + x_2^2 \geq R$$

und

$$2. \quad \varphi(x_1, x_2, 0) = \varphi(x_1, x_2, p)$$

genügen.

### a.) Wellenfunktionen und Eigenwerte

Für die Wellenfunktionen  $\varphi$  erhält man nach Separierung der Schrödingergleichung im Zylinderkoordinaten durch Normierung und Anpassung an die zweite Randbedingung

$$(1) \quad \varphi_{mvt}(\gamma, \Phi, x_3) = \frac{1}{\sqrt{2\pi p}} e^{im\Phi} \cdot e^{i\left(\frac{2\pi t}{p} x_3\right)} \cdot J_m\left(r \left\{ \frac{2m}{p} \cdot h_{mvt} - \frac{4\pi^2 t^2}{p^2} \right\}\right)$$

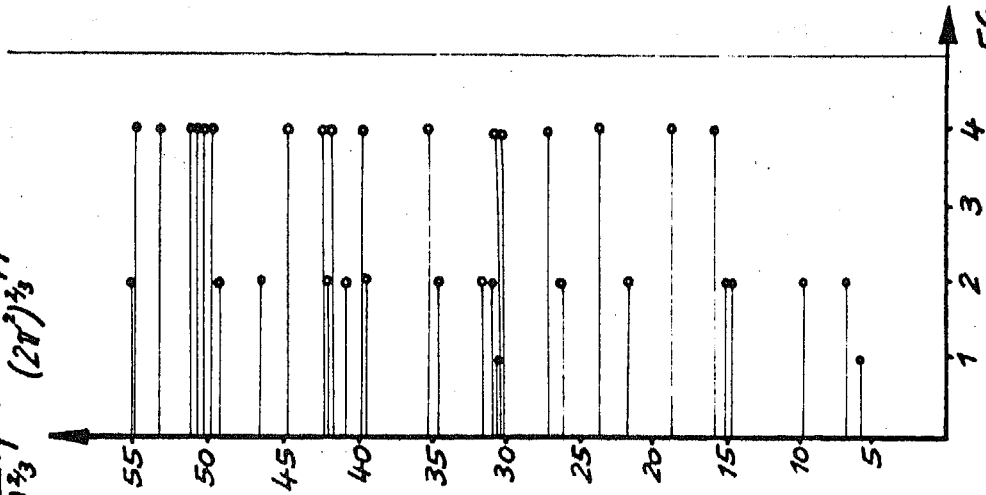
mit  $m$  und  $t$  ganzzahlig,  $m \geq 0$ ;  $r^2 = x_1^2 + x_2^2$  und  $\text{tg } \Phi = x_2/x_1$ .  $J_m$  ist die Zylinderfunktion  $m$ -ter Ordnung. (s. IV(4)). Um auch die erste Randbedingung zu erfüllen, muss

$$(2) \quad \varphi_{mvt}(R, \Phi, x_3) = 0$$

sein. Damit erhalten wir aus (1), wenn wir noch die  $v$ -te Nullstelle von  $J_m$  mit  $j_{mv}$  bezeichnen,  $J_m(j_{mv}) = 0$ , für die Eigenwerte  $h$  die Bestimmungsgleichung

Abb. 16

$$\varepsilon = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \cdot \gamma = \frac{V^{3/2} \cdot h}{(2\pi)^{3/2}}$$



$$F(\gamma, \infty) = F(h, \infty)$$

mit  $\beta \infty = \frac{1}{2\pi}$

$$(3) \quad y_{mvt} = h_{mvt} \cdot V^{2/3} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} = \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{2/3} \cdot (j_{mv}^2 + 4\pi^2\beta^2 \cdot t^2)$$

Der Entartungsgrad der Eigenwerte  $h$  ist aus (1) ersichtlich: er kann nur gleich 4, 2 oder 1 sein, sofern keine zufälligen Entartungen auftreten. (Zufällige Entartungen sind beim Zylinderspektrum äusserst selten aber bei passender Wahl von  $\beta$  an mindestens einer Stelle des Spektrums möglich).

$$(4) \quad F(h_{mvt}) = (2 - \delta_{t,0}) \cdot (2 - \delta_{m,0}) = \left\{ \begin{array}{l} 4 \\ 2 \\ 1 \end{array} \right\} \text{ falls } \left. \begin{array}{l} m \vee t \neq 0 \\ m \wedge t = 0 \\ m \vee t = 0 \end{array} \right\}$$

Für die numerischen Rechnungen benötigen wir unterhalb irgendeiner fest vorgegebenen Grenzenergie alle Eigenwerte des Spektrums mit ihren Entartungsgraden. Nach (3) und (4) ist dazu i. v. nur die Kenntnis von Nullstellen der ganzzahligen Zylinderfunktionen notwendig. Diese konnten aber den R.M.S.T. entnommen werden. Die Anordnung der Eigenwerte nach ihrem Betrage hängt nach (3) von der Wahl des Gestaltparameters  $\beta$  ab. Wir haben speziell  $\beta=1/2\pi$  gewählt und erhalten dann

$$(5) \quad \epsilon_{mvt} = (j_{mv}^2 + t^2)$$

mit  $y_{mvt}(\beta=1/2\pi) = (2\pi^2)^{2/3} \cdot \epsilon_{mvt}$

Es wurden alle Eigenwerte  $\epsilon_{mvt} \leq \epsilon_{\text{grenz}}$  mit  $N(\epsilon_{\text{grenz}}) = 253$  berechnet und der Grösse nach sortiert. Das zugehörige Eigenwertspektrum ist für die niedrigsten  $\epsilon$  in Abb.(16) dargestellt.

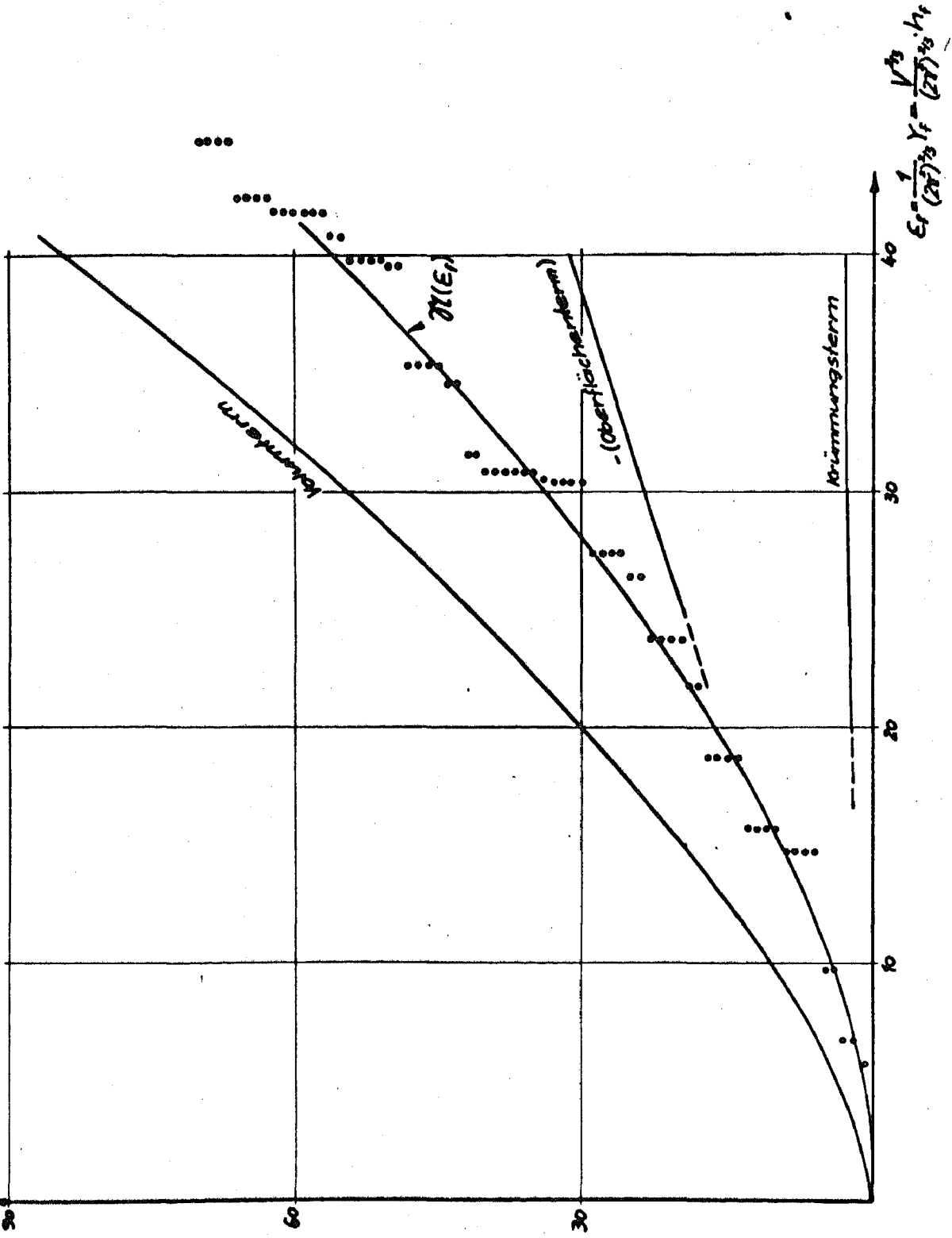
Die nun folgenden Abschnitte b) und c) sind vollkommen analog den entsprechenden für den Würfel bzw. für die Kugel (Kap. III bzw. IV).

b.) Teilchenzahl und Energie

Zu jedem  $N \leq 253$  haben wir nun die zugehörigen Werte von  $y$  und  $K$  gemäss ihren Definitionen durch einfaches Abzählen bzw. Aufsummieren der der Grösse nach geordneten Eigenwerte berechnet. (Bei entarteten Eigenwerten ist die Reihenfolge willkürlich festgesetzt). Die damit bekannten Zuordnungen  $N(y), K(y), K(N)$  und  $L(N)$  haben wir für den Bereich  $N \leq 90$  in den Abbn. (17)-(20) dargestellt. In diese Abbn.

$N(t_H, V, \infty) = N(V_f, \infty)$  mit  $\beta \infty = \frac{1}{2T}$

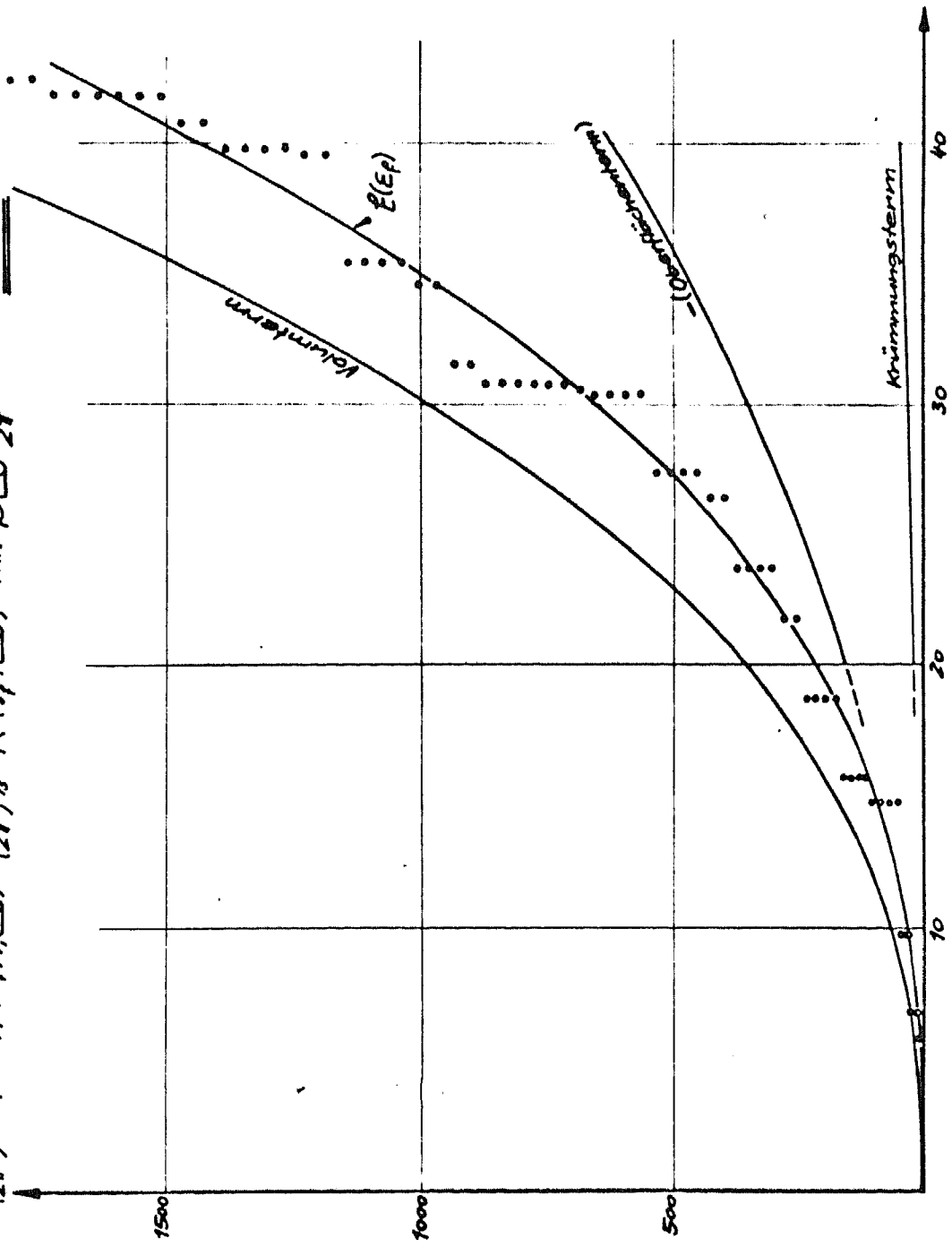
Abb. 77





$$E(\epsilon_f) = \frac{1}{(2T)^{1/2}} \cdot V^{3/2} \cdot H(h_f, V, \infty) = \frac{1}{(2T)^{3/2}} \cdot K(h_f, \infty) \text{ mit } \beta \propto \frac{1}{2T}$$

Abb. 18

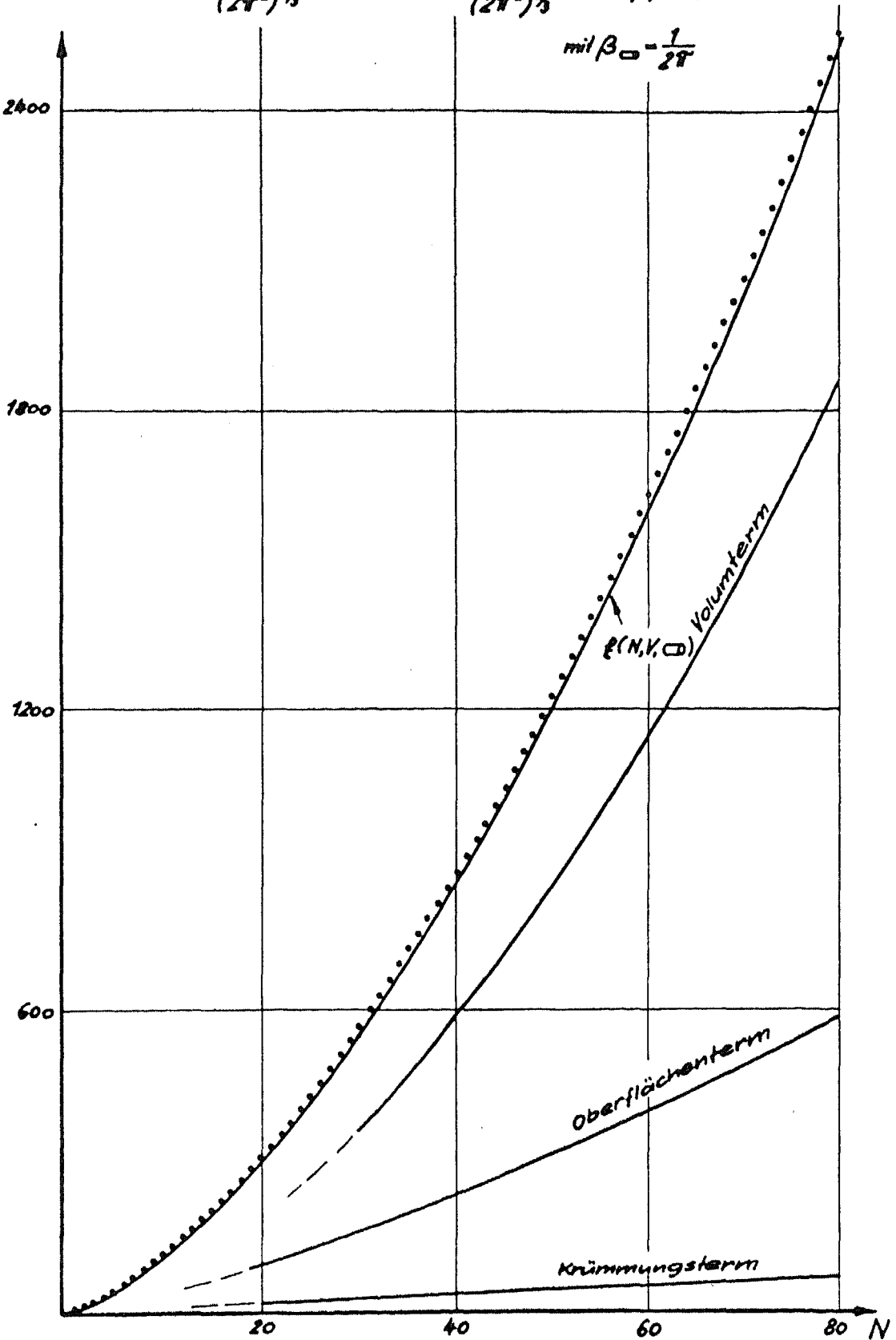


$$\epsilon_f = \frac{1}{(2T)^{1/2}} \cdot V^{3/2} \cdot H(h_f, V, \infty)$$

Abb. 19

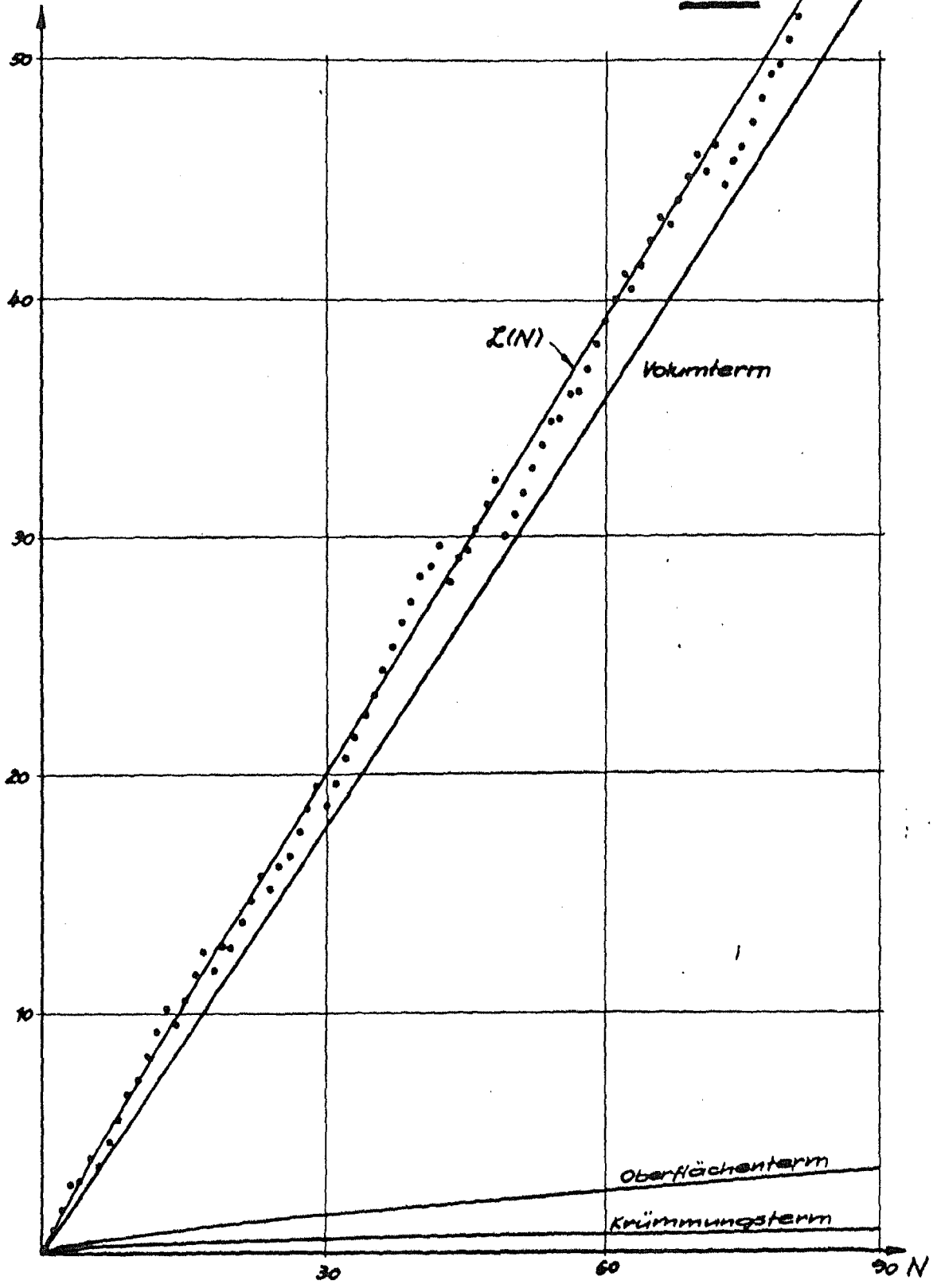
$$E(N, V, \square) = \frac{1}{(2\pi^2)^{1/3}} \cdot K(N, \square) = \frac{V^{1/3}}{(2\pi^2)^{1/3}} \cdot H(N, V, \square)$$

mit  $\beta = \frac{1}{2\pi^2}$



$$\frac{1}{H_p} \cdot H(t_H, N, \infty) = \frac{K(N, \infty)}{Y_p(N, \infty)} = L(N, \infty) \quad \text{mit } \beta_{\infty} = \frac{1}{2r}$$

Abb. 20



ist ausserdem der Verlauf der entsprechenden asymptotischen Ausdrücke und ihrer einzelnen Summanden eingetragen.

Diesen vier Abbn. entnehmen wir unmittelbar durch Anschauung:

- 1) Der allgemeine Verlauf der exakten Zuordnungen wird für kleine Teilchenzahlen (mindestens für alle  $N \leq 90$ ) numerisch ganz gut durch die vollständigen as. Ausdrücke, bestehend aus Volum-, Oberflächen- und Krümmungsterm, angenähert, d.h. die relativen Abweichungen sind numerisch klein.
- 2) der Volumterme allein ist bei so kleinen Teilchenzahlen als numerische Näherung der exakten Zuordnungen nicht brauchbar.
- 3) Kleine systematische Abweichungen zwischen  $\bar{Q}$  und  $K$  bzw.  $\bar{L}$  und  $L$  zeigen die Abbn. (19) und (20). Die as. Ausdrücke ergeben fast stets etwas zu kleine Werte.

c.) Der Oberflächenterm

Wir suchen jetzt auch für die in diesem Kapitel betrachteten zylinderförmigen Testkörper die Vermutung zu bestätigen, dass die asymptotischen Ausdrücke den mittleren Verlauf der exakten Zuordnungen in zweiter Näherung richtig wiedergeben. Nach Kap. III d) genügt es die Vermutung nur für zwei der vier exakten Zuordnungen zu prüfen. Wir haben uns für  $N(y)$  und  $K(y)$  entschieden.

Zunächst haben wir den mittleren Verlauf von  $N(y)$  und  $K(y)$  durch das in Kap. III e) angegebene exakte Gauss'sche Ausgleichsverfahren bestimmt. Als Ausgleichsfunktion haben wir  $\bar{N}(y)$  und  $\bar{K}(y)$  verwendet, deren Oberflächen- und Krümmungsterm jedoch noch mit Koeffizienten  $\chi$  multipliziert waren. Diese Koeffizienten  $\chi$  sind aus dem Ausgleichsverfahren zu bestimmen. Ergeben sie sich als nicht wesentlich verschieden von eins, so betrachten wir die obige Vermutung als bestätigt. Sämtliche Rechnungen wurden manuell ausgeführt. Das Ausgleichsverfahren entsprach dem Bereich  $0 \leq N \leq 253$ .

Als Ergebnis haben wir erhalten:

$$(6) \left\{ \begin{aligned} \chi_{s, N(y)} &= 1 + (5\%) \pm (2\%) \cdot t_{\beta} ; \\ \chi_{s, K(y)} &= 1 + (6.6\%) \pm (8.3\%) \cdot t_{\beta} . \end{aligned} \right.$$

Die Restterme  $R_N$  bzw.  $R_K$  können also im Mittel im Intervall  $0 \leq N \leq 253$  als 5% bzw. 6,6% des entsprechenden Oberflächenterms dargestellt werden. Der mittlere Verlauf der Restterme im Intervall zeigte jedoch relativ zum Oberflächenterm deutlich eine abnehmende Tendenz. Daher erscheint es möglich und wahrscheinlich, dass die signifikanten, wenn auch geringen Abweichungen des mittleren Verlaufes der exakten Zuordnungen von den entsprechenden Ausdrücken asymptotisch relativ zum Oberflächenterm verschwinden.

Damit betrachten wir die in Kap. II formulierte Hypothese II auch für den Spezialfall, daß sich ein ideales Fermigas in einem "offenen" Zylinder des Verhältnisses Länge zu Radius wie  $1:2\pi$  befindet, innerhalb der bei dem geringen Rechenaufwand erzielbaren Genauigkeit als bestätigt.

## ZUSAMMENFASSUNG

Wir haben Aussagen über das Eigenwertspektrum der freien Schwingungsgleichung für einen Hohlraum  $\mathcal{L}$  gesucht, welche unabhängig von der Gestalt des Hohlraumes nur von Gestaltparametern abhängen, die als Integrale über  $\mathcal{L}$  bzw. über dessen Oberfläche  $\mathcal{S}$  Eigenschaften von ganz  $\mathcal{L}$  darstellen, ohne die lokale Struktur der Oberfläche  $\mathcal{S}$  zu enthalten.

An drei Testkörpern sehr verschiedener Gestalt (die Gestaltparameter waren ebenfalls verschieden), nämlich Würfel, Kugel und Zylinder, haben wir die Hypothese bestätigt, daß der mittlere Verlauf der Größen Anzahl  $N$  und Summe  $E$  aller Eigenwerte unterhalb einer willkürlich vorgegebenen Schranke  $\xi_f$  in Abhängigkeit von der Wahl dieser Schranke i.w. gestaltunabhängig ist.

Für den Quader lassen sich im Falle asymptotisch großer  $\xi_f$  explizite Ausdrücke für  $N$  und  $E$  angeben, die für alle drei Testkörper nicht nur den mittleren Verlauf von  $N$  und  $E$  bei kleinen (endlichen)  $\xi_f$  in zweiter Näherung (in Potenzen von  $\xi_f^{-1/2}$ ) richtig wiedergaben, sondern auch als numerische Näherung des mittleren Verlaufs von  $N$  bzw.  $E$  brauchbar waren (relative Kleinheit des Restgliedes). Die mathematische Vermutung, daß sich für  $\alpha_s$  große  $\xi_f$  eben diese expliziten Ausdrücke für  $N$  bzw.  $E$  als gestaltunabhängig erweisen, soll in einer weiteren Arbeit behandelt werden.

Das Ergebnis dieser Arbeit ist überall dort anwendbar, wo Eigenschaften des Spektrums der freien Schwingungsgleichung mit Randbedingungen benötigt werden, die sich aus  $N$  bzw.  $E$  ableiten lassen; also vor allem in der Akustik (Zahl der Obertöne eines Hohlraumes unterhalb einer vorgegebenen Frequenz), in der Theorie der Hohlleiter usw. In dieser Arbeit haben wir die Anwendung auf ein einfaches Atomkernmodell betrachtet, das Fermigas-Modell. Es beschreibt den Kern als freies ideales in einem Hohlraum von Kerngestalt befindliches Fermigas. Dann bedeutet  $N$  die Teilchenzahl und  $E$  die Gesamtenergie des Systems.  $\xi_f$  ist die Fermigrenzenergie und es ist  $(\xi_f^{3/2} / 6\pi^2)$  die Sättigungsdichte im Innern des Systems. Der Koeffizient des zweiten Termes des expliziten ( $\alpha_s$ ) Ausdrucks für  $E$  kann dann als Oberflächenspannung gedeutet werden.

Die spezifische Modell-Oberflächenspannung läßt sich in Abhängig-

keit von den Gestaltparametern und der Sättigungsdichte des Atomkernes schreiben. Nach Einsetzen der empirischen Werte erhalten wir numerisch einen Wert, der nur um 20% vom empirisch aus der v. Weizsäckerformel bekannten Wert für die spez. Oberflächenspannung abwich, obgleich das Modell nur eine äußerst einfache Näherung der Kernstruktur sein kann. Daher gelangten wir zu der Überzeugung, daß der Oberflächenanteil der Bindungsenergie wesentlich ein kinetischer Effekt ist.

Herrn Professor Dr. G. Süßmann sage ich für die Anregung zu dieser Arbeit und für zahlreiche, wertvolle Diskussionen meinen herzlichen Dank.

Herrn Dipl-Phys. H. Schmidt danke ich sehr für kritische und fördernde Bemerkungen.

Herr Dr. A. Lindner hat mich in die Benutzung elektronischer Rechner eingewiesen. Das Institut für Angewandte Mathematik der Universität Mainz ermöglichte die Ausführung der numerischen Rechnungen. Herr Peter Zehm hat die photokopierfähigen Reinzeichnungen der Abb. angefertigt. Ihnen allen danke ich für ihre Unterstützung.

*Günther Ulf.*

Frankfurt (Main), im Frühjahr 1963

Institut für Theoretische Physik der Johann Wolfgang Goethe-Universität



Mittlere Niveau- und Termdichte sowie Entartungsgrade für das Würfelspektrum

---

a) Asymptotische Niveaudichte des Würfelspektrums

Die Eigenwerte des Würfelspektrums sind bis auf einen Faktor ganzzahlig:

$$(1) \quad h_{\pi} = \frac{h}{L_{\text{W}}^3} \cdot \frac{h^2}{\sqrt{2}} \cdot \xi_{\pi},$$

dabei sind die  $\xi_{\pi}$  die Summe dreier nichtverschwindender Quadratzahlen. Mit  $\xi$  bezeichnen wir dagegen im folgenden irgendeine ganze Zahl der Zahlengeraden. Wir berechnen die Niveaudichte aus einer Näherungsformel für die Dichte  $D$  aller Zahlen  $\xi'$  auf der Zahlengeraden, die sich nicht als Summe dreier Quadratzahlen schreiben lassen.

In (II) hatten wir gezeigt, daß bei der Ersetzung von  $N$  bzw.  $H$  durch  $N_{\pi}$  bzw.  $H_{\pi}$  für eine gewichtete Mittelung nur dann keine oberflächenproportionalen Terme verloren gehen, wenn für den Abstand  $\Delta\xi$  zweier benachbarter Eigenwerte von verschiedenem Betrag im Mittel und asymptotisch

$$(2) \quad \Delta\xi = o(\sqrt{\xi})$$

gilt. Wir müssen untersuchen, ob diese Bedingung für den Würfel überhaupt erfüllt ist.

Dazu genügt es zu zeigen, daß die natürlichen Zahlen  $\xi'$ , die nicht Eigenwert sind, mit wachsendem  $\xi$  nicht häufiger werden (dichter liegen): Die Zahl  $dn$  der  $\xi'$  pro  $d\xi$ , d.h. ihre Dichte auf der Zahlengeraden, darf mit wachsendem  $\xi$  nicht zunehmen. Dies können wir nicht in Strenge beweisen; wir werden aber folgenden Weg gehen:

Zuerst beweisen wir zahlentheoretisch von bestimmten  $\xi$ , daß für sie  $F(\xi) = 0$  sein muß. Für diese  $\xi = \xi'$  erhalten wir einfache Ausdrücke. Die Zahl der durch diese Ausdrücke nicht erfaßten  $\xi = \xi' \leq 350$  ist klein und nimmt in Abhängigkeit von  $\xi$  so stark ab, daß für  $130 < \xi \leq 350$  schon alle vorkommenden  $\xi = \xi'$  durch unsere Ausdrücke erfaßt werden. Daher läßt sich aus diesen Ausdrücken durch Umkehrung eine Näherungsformel für die gesuchte  $\xi'$ -Dichte  $D$  angeben. Diese können wir durch einen Mittelwertvergleich numerisch prüfen, denn sie

gestattet uns, den mittleren Entartungsgrad (asymptotisch) großer Eigenwerte anzugeben.

1. Für welche Zahlen ist  $F(\xi) = 0$  ?

Im folgenden seien  $a, b, c$  natürliche Zahlen;  $\xi, \xi', A, B, C, n, l$  seien ganzzahlig und  $\geq 0$ . Wir haben nun die folgenden Sätze:

Satz 1: Es ist  $\xi \neq a^2 + b^2 + c^2$  für alle  $(a, b, c)$ , falls  $\xi = 8n + 7$ .

Den Beweis dieses Satzes führen wir indirekt durch Zurückführung der gegenteiligen Hypothese auf einen Widerspruch. Sei also die Hypothese:  $\left\{ \begin{array}{l} \xi = 8n + 7; \text{ dann gebe es (mindestens) ein Tripel } (a, b, c), \\ \text{so daß } \xi = a^2 + b^2 + c^2 \end{array} \right\}$ . Es ist dann also  $\xi$  ungerade, wir schreiben kurz  $\xi = 1 \pmod{2}$ . Ohne Einschränkung der Allgemeinheit folgt dann aus der Hypothese, daß  $a = 1 \pmod{2}$ , und daß  $b$  und  $c$  entweder beide ungerade oder beide gerade sind:

$$\xi = 1 \pmod{2} \rightarrow (a, b, c) = (1 \pmod{2}, 0 \pmod{2}, 0 \pmod{2}) \vee (1 \pmod{2}, 1 \pmod{2}, 1 \pmod{2}).$$

Sei zunächst  $(a, b, c) = (1 \pmod{2}, 0 \pmod{2}, 0 \pmod{2})$ . Wir setzen  $a = 2A + 1$ ,  $b = 2B$ ,  $c = 2C$  mit  $B, C \geq 0$ . Dann wird

$$8n + 7 = \xi = 4A^2 + 4A + 4B^2 + 4C^2 + 1,$$

und daraus

$$1 \pmod{2} = 4n + 3 = \xi = (2A^2 + 2A + 2B^2 + 2C^2) = 0 \pmod{2},$$

also ein Widerspruch.

Nun ebenso für  $(a, b, c) = (1 \pmod{2}, 1 \pmod{2}, 1 \pmod{2})$ :  $a = 2A + 1$ ,  $b = 2B + 1$ ,  $c = 2C + 1$ . Dann ist

$$8n + 7 = \xi = 4A^2 + 4A + 4B^2 + 4B + 4C^2 + 4C + 3$$

und daraus

$$1 \pmod{2} = 2n + 1 = A(A+1) + B(B+1) + C(C+1) = 0 \pmod{2},$$

also ein Widerspruch. Damit ist Satz 1 bewiesen.

Satz 2: Es ist  $\xi \neq a^2 + b^2 + c^2$  für alle  $(a, b, c)$ , falls  $\xi = \xi^1 \cdot 4^n$ ; Voraussetzung ist, daß  $\xi^1 \neq a^2 + b^2 + c^2$  für alle  $(a, b, c)$  schon bewiesen sei.

Der Beweis des Satzes 2 ist analog zum Beweis des vorhergehenden.

Hypothese: Es sei  $\xi = \xi^1 \cdot 4^n = a^2 + b^2 + c^2$ .

Für  $n=0$  widerspricht die Hypothese der Voraussetzung. Sei nun  $n \neq 0$ ,

dann ist  $\xi \equiv 0 \pmod{2}$  und es folgt aus der Hypothese:

$$(a, b, c) = (1 \pmod{2}, 1 \pmod{2}, 0 \pmod{2}) \wedge (0 \pmod{2}, 0 \pmod{2}, 0 \pmod{2}).$$

Im ersten Falle substituieren wir  $a = 2A + 1$ ,  $b = 2B + 1$ ,  $c = 2C$ ;  $C > 0$ .

$$\xi = \xi^1 \cdot 4^n = 4A(A+1) + 4B(B+1) + 4C^2 + 2;$$

$$\xi^1 \cdot 2 \cdot 4^{n-1} = 0 \pmod{2} = 2A(A+1) + 2B(B+1) + 2C^2 + 1 = 1 \pmod{2}$$

→ Widerspruch.

Sei nun  $(a, b, c) = (0 \pmod{2}, 0 \pmod{2}, 0 \pmod{2})$ .  $a = 2A$ ,  $b = 2B$ ,  $c = 2C$ ,  $A, B, C > 0$ , so wird

$$\xi^1 \cdot 4^{n-1} = A^2 + B^2 + C^2.$$

Mit den Ersetzungen  $n = p - 1$ ,  $a = A$ ,  $b = B$ ,  $c = C$  erhält man gerade wieder die Hypothese des Beweises. Die Rekursion endet, wenn  $n = 0$  oder aber  $(a, b, c) = (1 \pmod{2}, 1 \pmod{2}, 0 \pmod{2})$  geworden ist. Damit ist auch Satz 2 bewiesen.

Durch Satz 1 sind alle  $\xi \neq a^2 + b^2 + c^2$  für jedes  $(a, b, c)$  der Spalte  $\xi = 4m + 3$  mathematisch verifiziert, ebenso durch Satz 2 alle Leerstellen in der Spalte  $\xi = 4m$ . In den Spalten  $\xi = 4m + 1$  und  $\xi = 4m + 2$  finden wir noch einige  $\xi \neq (a^2 + b^2 + c^2)$  für alle  $(a, b, c)$ . Von diesen wissen wir nach (III a), daß  $\tilde{F}(\xi) \neq 0$  ist. Da wir aber die Lösungen mit  $a^2 + b^2 + c^2 = 0$  ausschließen, ist für sie  $F(\xi) = 0$ . Wir geben diese  $\xi$  an durch einen

Befund: Es ist  $\xi \neq (a^2 + b^2 + c^2)$  für alle  $(a, b, c)$ , falls  $\xi = 5, 10, 13, 25, 37, 58, 85, 130$ . Sein Nachweis erfolgte durch systematisches Durchprobieren aller Tripel  $(a, b, c)$  mit einem elektronischen Rechner. Damit sind auch alle  $\xi \neq \xi^1$  der Spalten  $\xi = 4m + 1$  und  $\xi = 4m + 2$  der Tabelle 1 angegeben. Alle  $\xi^1 \leq 350$  sind nun bekannt und wir schreiben als Ergebnis:

Es ist  $\xi \neq a^2 + b^2 + c^2$  für alle  $(a, b, c)$  und für  $\xi \leq 350$  genau dann, wenn

$$\xi = (8n + 7) \cdot 4^l \quad \text{oder wenn } \xi = r_i \cdot 4^l$$

ist mit

$$r_i = 1, 2, 5, 10, 13, 25, 37, 58, 85, 130; \quad \text{und } n, l = 0, 1, 2, 3, \dots;$$

## 2. Näherungsformel für die Dichte D

Sei zunächst  $\xi = 8n + 7$ , so ist  $d\xi/dn = 8$  der Abstand zweier benachbarter solcher  $\xi$  und  $D_1 = dn/d\xi$  die zugehörige Dichte dieser  $\xi$ .

d.h. die Anzahl dieser  $\xi$  pro  $\xi$ -Intervall. Also ist

$$\text{für } (\xi = (8n + 7) \cdot 4^l) : n = \frac{1}{8} \cdot \left( \frac{1}{4^l} \cdot \xi - 7 \right); \quad D_l := \left( \frac{dn}{d\xi} \right) =$$

$$\frac{1}{8} \cdot \frac{1}{4^l} \quad \text{für alle } l, \text{ und}$$

$$\text{für } \xi = r_i \cdot 4^n : n = \ln(\xi/r_i)/\ln 4; \quad D_{r_i} := \left( \frac{dn}{d\xi} \right) = 1/(\xi \cdot \ln 4).$$

Die Summe aller dieser  $D_l$  und  $D_{r_i}$  ergibt die Dichte  $D$  aller vorhandenen  $\xi \neq a^2 + b^2 + c^2$  als Funktion von  $\xi$ :

$$(3) \quad D = \frac{1}{8} \left( \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{4^l} \right) + \frac{1}{\xi \cdot \ln 4} \cdot \sum_{i=1}^{K \leq \xi} 1 = \frac{1}{6} + \frac{1}{\xi} \left( \frac{1}{\ln 4} \cdot \sum_{i=1}^{K \leq \xi} 1 \right).$$

$f := \sum_{i=1}^{K \leq \xi} 1$  haben wir in Abb. (B) gegen  $\sqrt{\xi}$  und gegen  $(\ln \xi)$  aufgetragen.

Wir entnehmen daraus die damit begründete Vermutung

$$f := \sum_{i=1}^{K \leq \xi} 1 \approx O(\ln \xi); \quad f = o(\sqrt{\xi}) = o(\xi); \quad P(\xi > 350) \geq 10.$$

Damit erhalten wir im Grenzfall großer  $\xi$  aus (3)

$$(4) \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} D(\xi) = 1/6.$$

$D(\xi)$  war die Dichte aller  $\xi \neq a^2 + b^2 + c^2$  für jedes Tripel  $(a, b, c)$ .

Definieren wir analog  $d(\xi)$  als die Dichte aller  $\xi = a^2 + b^2 + c^2$  für mindestens ein Tripel  $(a, b, c)$ , so ist natürlich

$$(5) \quad (d + D) = 1.$$

Physikalisch ist  $d(\xi)$  aber gerade die Niveaudichte der (entarteten) Eigenwerte des würfelförmigen Topfpotentials. Aus (3) erhalten wir für den mittleren Niveauabstand  $\Delta \xi$ :

$$(6) \quad \Delta \xi := \frac{1}{d(\xi)} = \frac{1}{1-D} \approx \frac{6}{5} \left( 1 + \frac{6}{5} \cdot \frac{1}{\xi} \left( \frac{1}{\ln 4} \cdot \sum_{i=1}^{K \leq \xi} 1 \right) \right) \Rightarrow \frac{6}{5} = o(\sqrt{\xi}).$$

Er ist für große  $\xi$  abnehmend bis zur Konstanten  $6/5$ , d.h. die Niveauabstände des Würfelspektrums sind asymptotisch äquidistant. Damit ist die Voraussetzung (2) erfüllt.

### b) Termdichte und Entartungsgrade des Würfelspektrums

Wir betrachten in diesem Abschnitt

- die Termdichte, d.h. also den mittleren Verlauf von  $F(\xi)$  als Funktion von  $\xi$ ,
- den mittleren Entartungsgrad der Eigenwerte in Abhängigkeit von  $\xi$ .

Für beide Funktionen werden wir zunächst asymptotische Formeln für große  $\xi$  angeben, und diese Ausdrücke dann (an Hand von Tabelle 1) für kleine  $\xi$  ( $\leq 350$ ) prüfen.

1. Der mittlere Verlauf der Termdichte  $T(\xi) = \overline{F(\xi)}$

$T(\xi)$  ist gegeben durch die mittlere Änderung von  $N$  pro  $d\xi$ .

$$(7) \quad T(\xi) := \overline{F(\xi)} = \frac{dN}{d\xi} .$$

Die Mittelung von  $F(\xi)$  ist auch über alle  $\xi = \xi^i$  zu erstrecken.

Asymptotisch für große  $\xi$  behaupten wir (als Folge der Behauptung (II, s. 4))

$$(8) \quad T(\xi) = \frac{dN}{d\xi} \approx \frac{d\mathcal{N}}{d\xi} = \frac{V}{4\pi^2} \sqrt{\xi} - \frac{S}{16\pi} + \frac{L}{16\pi^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\xi}}$$

und mit  $a = \pi$ ,  $V = \pi^2$ ,  $S = 6\pi^2$ ,  $L = 6\pi^2$

$$(9) \quad T(\xi) = \frac{d\mathcal{N}(\xi)}{d\xi} = \frac{\pi}{4} \sqrt{\xi} - \frac{3\pi}{8} + \frac{3}{8} \cdot \frac{1}{\sqrt{\xi}} .$$

Diese Hypothese haben wir für  $\xi \leq 350$  durch folgende Mittelwertbildungen geprüft: der für  $\xi$  in Tabelle 1 berechnete Bereich  $0 \leq \xi \leq 350$  wurde in Intervalle der Länge  $|J_i|$  eingeteilt, für die

$$(10) \quad |J_i| \gg 1, \quad |J_i|/\xi \ll 1$$

gelten sollte. Das ist erfüllt für Intervalle  $J_i = (\xi_i, \xi_{i+1}]$  mit  $\xi_i = i^2$  für  $i = 1, 2, 3, \dots$ ; d.h.  $(0, 1]$ ,  $(1, 4]$ ,  $(4, 9]$ ,  $(9, 16]$ ,  $\dots$ . Dann ist  $|J_i| = \xi_{i+1} - \xi_i = 2i + 1$ . Für jedes dieser Intervalle suchen wir den Mittelwert von  $F(\xi)$  in Abhängigkeit von  $\xi$ . Dementsprechend haben wir die Werte

$$(11) \quad \overline{F(\xi_i)} = \frac{1}{2i+1} \cdot \sum_{j=i^2+1}^{(i+1)^2} F(\xi_j), \quad \xi_j = j.$$

berechnet und in Abhängigkeit von

$$(12) \quad \sqrt{\xi_i} = \frac{1}{2i+1} \cdot \sum_{j=i^2+1}^{(i+1)^2} \sqrt{\xi_j}$$

aufgetragen (Abb. A), zusammen mit  $d\mathcal{N}/d\xi$ . Die Übereinstimmung des mittleren Verlaufs der Mittelwerte  $F$  mit der Kurve  $d\mathcal{N}/d\xi$  ist ausgezeichnet. Legt man durch die Mittelwerte  $F$  eine Ausgleichsgerade, so stimmen die Werte für die Steigung und den Ordinatenabschnitt derselben sehr gut mit den ersten beiden Koeffizienten von  $d\mathcal{N}/d\xi$  überein. Da nun bei der Integration von  $d\mathcal{N}/d\xi$  zu  $\mathcal{N}$  die Integrationskonstante jedenfalls nicht in den Oberflächenterm ( $\sim \xi$ ), nicht einmal in den Krümmungsterm ( $\sim \sqrt{\xi}$ ) eingeht, haben wir damit bereits gezeigt, daß

der asymptotische Ausdruck  $\bar{N}$  für  $N(\xi)$  sehr genau den mittleren Verlauf von  $N$  für kleine Werte von  $\xi$  wiedergibt.

## 2. Der mittlere Entartungsgrad $M(\xi)$ eines Eigenwertes

Es sei  $M(\xi)$  definiert durch Mittelwertbildung von  $F(\xi)$  über alle  $\xi$  eines Intervalles für die  $F(\xi) \neq 0$  ist. Das Intervall sei von der Art (10). Wir haben  $M$  für die gleichen Intervalle wie für  $T(\xi)$  berechnet und in Abb. (A) in Abhängigkeit von  $\sqrt{\xi}$  aufgetragen. Es ist

$$(13) \quad M(\xi) := \frac{1}{(1-D(\xi)) \cdot (2i+1)} \cdot \sum_{\substack{\xi_i \leq \xi \\ i=0,1}} F(\xi_i)$$

und damit

$$(14) \quad M(\xi) = T(\xi) \cdot \frac{1}{1-D(\xi)} = T(\xi) \cdot \frac{1}{d(\xi)}$$

Setzen wir in (14) die für  $D(\xi)$  bzw.  $T(\xi)$  hergeleiteten (bzw. behaupteten und numerisch bestätigten) Ausdrücke (3) bzw. (9) ein, so erhalten wir für genügend große  $\xi$

$$(15) \quad M(\xi) = \frac{\left\{ \frac{3\pi}{10} \sqrt{\xi} - \frac{9\pi}{20} + \frac{9}{20} \frac{1}{\sqrt{\xi}} \right\}}{\left\{ 1 - \frac{6}{5} \cdot \frac{1}{\xi} \left( \frac{1}{24} \sum_{i=1}^{r(\xi)} 1 \right) \right\}} \approx \frac{3\pi}{10} \sqrt{\xi} - \frac{9\pi}{20} + \frac{1}{\sqrt{\xi}} \left\{ \frac{9}{20} + \frac{9\pi}{25} \cdot \left( \frac{1}{24} \sum_{i=1}^{r(\xi)} 1 \right) \right\}$$

Dieser asymptotische Ausdruck ist ebenfalls in Abb. (A) mit den aus (15) berechneten Mittelwerten verglichen worden. Die asymptotische Formel kann nach Abb. (A) als gute Näherung des mittleren Verlaufs der Mittelwerte (15) gelten, obgleich wir strenggenommen zum Vergleich mit (15) aus (15) erst Intervallmittelwerte  $\bar{M}(\xi)$  bilden müssten. Der Fehler bleibt aber wegen (10) klein.

In diesem Anhang über die zahlentheoretische Funktion  $F(\xi)$  haben wir folgende Resultate über das Spektrum der Eigenwerte  $h_n$  der freien Schrödingergleichung für ein dreidimensionales Topfpotential von der Form eines Würfels der Kantenlänge  $a$  gewonnen:

1). die mittlere Termdichte ist gegeben durch

$$T(h) = \frac{\sqrt{h}}{4\pi^2} - \frac{5}{16\pi} + \frac{1}{16\pi^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{h}} \quad \text{mit} \quad \xi := \frac{2m}{\hbar^2} \cdot h$$

2). die mittlere Niveaudichte ist in guter Näherung auch für kleine  $h$  gegeben durch

$$d(h) = \frac{4m}{\hbar^2} \cdot \frac{a^2}{\pi^2} \cdot \left\{ \frac{5}{6} - \frac{1}{\xi} \left( \frac{1}{24} \sum_{i=1}^{r(\xi)} 1 \right) \right\} \quad \text{mit} \quad \xi = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{a^2}{\pi^2} \cdot h$$

und  $r_i = 1, 2, 5, 10, 13, 25, 37, 58, 85, 130, (\gg 350), \dots$

3). für den mittleren Entartungsgrad der Eigenwerte haben wir den Ausdruck

$$M(\mu) = \frac{h^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2}{\alpha^2} \cdot \left\{ \frac{3V}{10\pi^2} \cdot \sqrt{\xi} - \frac{3S}{40\pi} + \frac{1}{\sqrt{\xi}} \left( \frac{31}{40\pi^2} + \frac{9}{25\pi} \cdot \frac{1}{\ln 4} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \right) \right\}$$

erhalten ( $\xi = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{\mu}{\pi^2} \cdot R$ ).

Abb. A

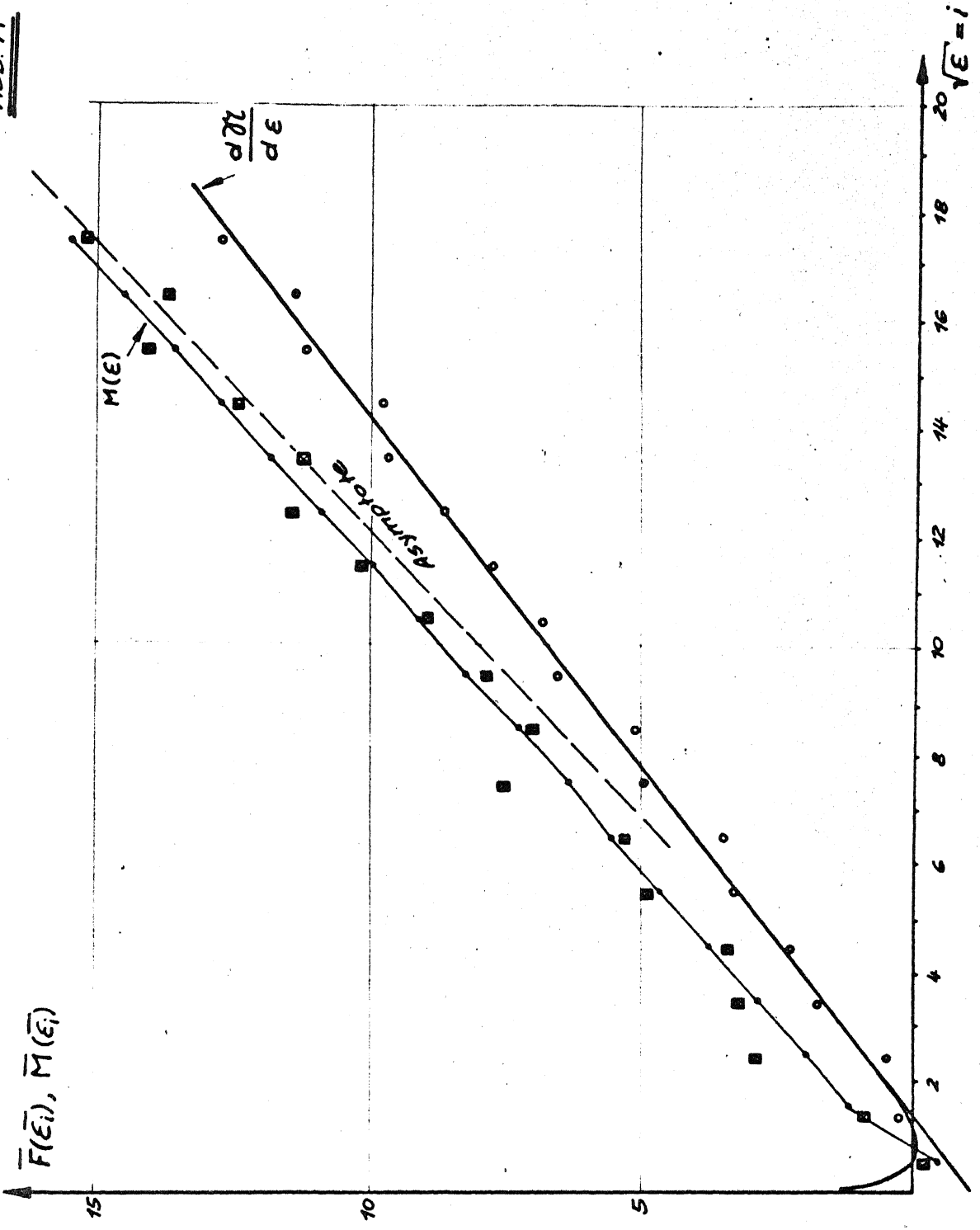
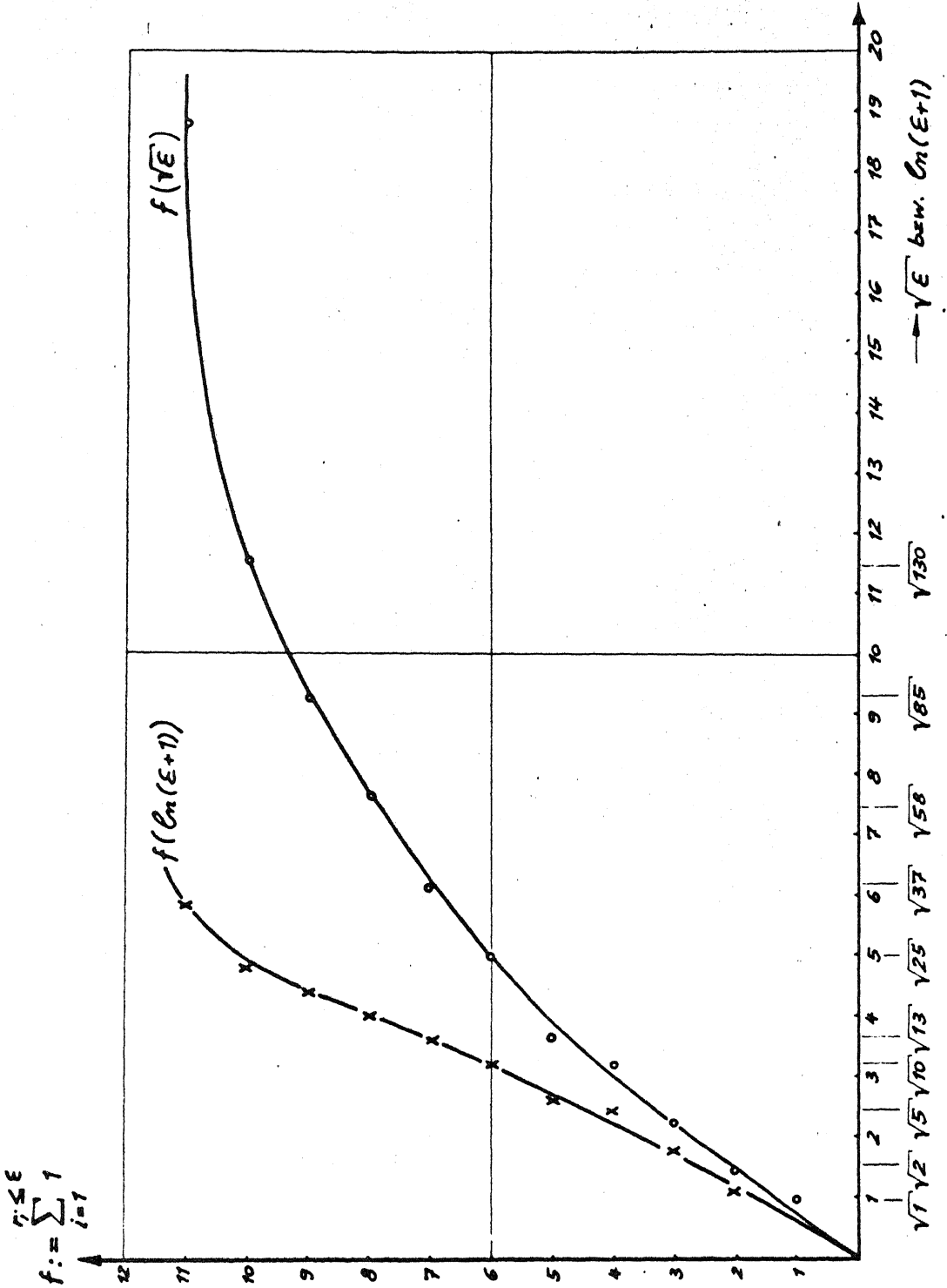




Abb. B



ANHANG 2

Algol-60-Programme und Ergebnisse der elektronisch-numerischen  
Rechnungen.

---

In diesem Anhang geben wir für alle in dieser Arbeit elektronisch-numerisch ausgeführten Rechnungen die Algol-60-Programme und die unmittelbar von der Rechenmaschine ausgedruckten Zahlenprotokolle an (Teilweise direkt als Photokopie des Originals).

Die in den Programmen verwendeten Bezeichnungen weichen von denjenigen des Kapitel II - V ab. Ein 'Lexikon der Bezeichnungen' soll zwischen ihnen vermitteln.

1) Tripelsortierverfahren (zu Kap. IIIa)

Es soll die Zahl aller geordneten Tripel natürlicher Zahlen berechnet werden, deren Quadratsumme  $\leq \xi$  ergibt, und zwar für alle  $\xi \in (0, 350]$ . In Kap. IIIa, 2) hatten wir zwei Verfahren zur Lösung dieser Aufgabe genannt. Wir geben sie jetzt durch ihr Algol-60-Programm an.

In dem jetzt zur Erläuterung der Programme angegebenen Bezeichnungslexikon sind nur diejenigen Größen aufgeführt, für die auch in Kap. III eine Bezeichnung eingeführt worden war. Alle übrigen Größen sind in den Programmen selbst erläutert (deklariert).

Bezeichnungslexikon

Benennung	Kap. III	Programm I	Programm II
natürliche Zahlen	$n_1, n_2, n_3$	$x, y, z$	$a, b, c$
Entartungsgrad	$F(\xi)$	$f$	$f(a)$
Eigenwert	$\xi$	$s$	$h$

Programm I

```
begin integer x,y,z,f,l,e,dl,de,s,w,t;  
      array qu[1:200];  
comment Tripelsortierprogramm;  
for x:=1 step 1 until 200 do qu[x]:=x*x;  
z:=1; e:=1:=0; s:=3;  
comment Berechnung des Entartungsgrades f, der Energie e und der Teil-  
chenzahl l zum Eigenwert s;  
Anfang : x:=y:=1; s:=z+1; t:=f:=0;  
Differenz: w:=s-qu[x]-qu[y];  
Schl1 : if qu[z] less w then begin z:=z+1; goto Schl1 end;  
Frage1 : if qu[z] equal w then goto Tripel;  
Frage2 : if y notless z then goto x erhoehen;  
          y:=y+1; w:=s-qu[x]-qu[y]; z=z+1;  
z erniedrigen : z=z-1;  
          if qu[z] notgreater w then goto Frage1;  
          if y less z then goto z erniedrigen;  
x erhoehen: x:=x+1; z:=x;  
          if 3 qu[x] greater s then goto Stop; y:=x; goto Differenz;  
Tripel : if y equal z then goto Frage 3;  
          if y equal x then goto Drei;  
          dl:=6; goto Summe;  
Frage3 : if y notequal x then goto Drei; dl:=1; goto Summe;  
Drei : dl:=3;  
Summe : f:=f+dl; t:=1; goto Frage2;  
Stop : if t equal 0 then goto Anfang;  
          if l greater 105 then goto Ende;  
          de:=f*s; e:=de+e; l:=l+f; print(f,s,l,e);  
comment Damit sind Entartungsgrad f, Teilchenzahl l und Energie e  
für r=1 zum Eigenwert s berechnet worden. Es kann hier die  
Berechnung weiterer Zuordnungen eingeschoben werden;  
          goto Anfang;  
Ende : end;
```

Programm II

```
begin integer a,b,c,d,g,h,k,m,n,o,u,Diff,Ultimus;  
array f[0:d]; s[1:m]; qu[1:entier(sqrt(o))];  
read (u,o,m); read (Ultimus);
```

comment Tripelsortierprogramm nach Lexikonmethode. u und o sind die jeweilige untere und obere Intervallgrenze, m die voraussichtlich benötigte Speicherplatzzahl für dieses Intervall. Insgesamt wird  $f(h)$  von  $h$  gleich 0 bis Ultimus bestimmt;

```
Marke1: d:=o-u; k:=1; a:=b:=c:=1; g:=2; h:=3;
```

```
Marke2: if u notgreater h then begin  
if k notless m then begin o:=entier((o+u)/2);  
print(o); goto Marke1 end;  
s[k]:=h; k:=k+1; end;
```

```
c:=c+1; h:=g + c * c;
```

```
if o greater h then goto Marke2;
```

```
c:=1; b:=b+1; g:=a * a + b * b; h:=g+1;
```

```
if o greater h then goto Marke2;
```

```
b:=1; n:=a+1; g:=a * a + 1; h:=g + c * c;
```

```
if o greater h then goto Marke2;
```

```
n:=k-1; print(n);
```

comment Alle n Skalarprodukte für h zwischen u und o sind in s[1:n] gespeichert;

```
for a:=0 step 1 until (d-1) do f[a]:=0;
```

```
for k:=1 step 1 until n do begin a:=s[k]-u; f[a]:=f[a]+1; end;
```

comment die n Skalarprodukte h sind ihrer Größe nach sortiert. f a , der Entartungsgrad des Eigenwertes (a+u) ist für alle h zwischen u und o berechnet;

```
if u equal Ultimus then goto Finis;
```

```
u:=o; read(Diff); o:=o+Diff; goto Marke1;
```

```
Finis: end;
```

2) Ergebnisse der el.-numerischen Rechnungen für ein würfelförmiges Potential. (zu Kap. III c))

---

Im folgenden wird der Inhalt und die Bezeichnungsweise des Kapitels III, Teil c) vorausgesetzt.

Im Abschnitt a) werden für einige  $\xi$  die numerischen Werte der Zuordnungen  $Y_S(\sqrt{\xi})$ ,  $Y_L(\sqrt{\xi})$ ,  $Y_S(N^{1/3})$  und  $Y_L(N^{1/3})$  angegeben. Der Abschnitt b) enthält dann das Ergebnis der Ausgleichung dieser Zuordnungen, berechnet für fünf verschiedene Intervalle. Die verwendete Ausgleichsrechnung ist im Programm für die Kugel (s.3)) angegeben. Als selbständiges Unterprogramm konnte sie auch für den Würfel verwendet werden.

a) Numerischer Wert der auszugleichenden Größen für  $\xi = 99, 131$  und  $331$ .

Die Erläuterung des photokopierten Maschinenprotokolls geben wir als Druckplan an: Die Gleichungen, welche die im Programm benutzten Symbole durch die in Kap. III c) gegebenen Bezeichnungen definieren, ordnen wir auf gleiche Weise an wie die zugehörigen, im Protokoll angegebenen Werte. Dadurch sind sowohl die im Programm benutzten Symbole wie das Protokoll erläutert. Der Druckplan kann natürlich auch direkt der Anordnung der PRINT-Befehle des Programms entnommen werden.

$$Q := \xi; \quad E := E(\xi); \quad E1 := E - \xi + Kr(\xi); \quad E2 := E - \xi; \quad R1;$$

$$WQ := \sqrt{\xi}; \quad N2 := (6\pi^2 N)^{1/3};$$

$$Y1[1] := Y_S(\sqrt{\xi});$$

$$Y1[2] := Y_L(\sqrt{\xi});$$

$$Y1[3] := Y_S(N^{1/3});$$

$$Y1[4] := Y_L(N^{1/3});$$

Dabei ist  $Kr(\xi)$  der Krümmungsterm von  $f = f_0 \cdot \frac{2m}{\pi^2} \left( \frac{V^{2/3}}{\pi^2} \right)$ ;  $R1$  ist ein hypothetischer "Torsionsterm" von  $\xi$ .

b) Ergebnis der Ausgleichsrechnung

Der Ansatz für die Ausgleichsfunktionen lautet (mit  $V = \pi^3$ )

99	2.50155000,4	-0.09390289,3	0.01105890,3	3.47014296,2
9.94987437	2.88500976,1			
-9.71015772,-1				
-7.15162759,1				
4.56951002,-1				
1.31131530,-1				

131	5.17605000,4	-0.21177905,3	0.02196801,3	4.69180825,2
1.14455231,1	3.35462308,1			
-1.43871960				
-1.21891331,2				
5.77376736,-1				
1.92665145,-1				

331	5.66422500,5	3.24396673,3	0.02556830,3	1.25427518,3
1.81931053,1	5.48491645,1			
5.48699439				
7.38940584,2				
1.53741961,-1				
8.38808024,-2				

60

-1.20638082 <sub>10</sub> -2	4.95117638 <sub>10</sub> -1	5.61632050 <sub>10</sub> -1	2.10060623	2.08549709
6.84886631	1.77220963 <sub>10</sub> 1	-1.26693343 <sub>10</sub> 1	7.51884865 <sub>10</sub> 1	7.46476741 <sub>10</sub> 1
-6.30927274 <sub>10</sub> -1	1.13635069 <sub>10</sub> -1	9.14279836	1.25104215	1.50917377
-1.53164496 <sub>10</sub> -2	6.26722877 <sub>10</sub> -3	3.54721739 <sub>10</sub> -1	6.89977789 <sub>10</sub> -2	8.32343162 <sub>10</sub> -2
4.15731463	9.09450972 <sub>10</sub> -2	-1.81400758	1.22095057 <sub>10</sub> -1	2.54647908
6	1.88495559 <sub>10</sub> 1			
16	32			

410

-1.57272508 <sub>10</sub> -1	1.81971603 <sub>10</sub> -1	1.11029249	1.34506885	3.05959868
-7.27601023	1.11837351 <sub>10</sub> 1	4.63440351 <sub>10</sub> 1	8.26661603 <sub>10</sub> 1	1.88038906 <sub>10</sub> 2
-1.55553676 <sub>10</sub> -1	2.19994083 <sub>10</sub> -2	4.12929432	4.60397113 <sub>10</sub> -1	1.16361778
-5.67082292 <sub>10</sub> -3	1.41513214 <sub>10</sub> -3	2.52054960 <sub>10</sub> -1	2.96154675 <sub>10</sub> -2	7.48507825 <sub>10</sub> -2
8.21861076	4.10748502 <sub>10</sub> -2	-6.71625346 <sub>10</sub> -1	1.22095057 <sub>10</sub> -1	2.54647908
6	1.88495559 <sub>10</sub> 1			
66	100			

585

-8.78959957 <sub>10</sub> -2	2.22278461 <sub>10</sub> -1	6.06860086 <sub>10</sub> -1	2.00844102	3.07750563
-7.46524017	1.49051253 <sub>10</sub> 1	5.31717938 <sub>10</sub> 1	1.34678209 <sub>10</sub> 2	2.06365506 <sub>10</sub> 2
-2.58896445 <sub>10</sub> -2	6.16479965 <sub>10</sub> -3	1.17720375	1.60495775 <sub>10</sub> -1	2.68475701 <sub>10</sub> -1
-7.49230205 <sub>10</sub> -4	1.44521598 <sub>10</sub> -3	1.43537091 <sub>10</sub> -1	3.76250765 <sub>10</sub> -2	6.29388457 <sub>10</sub> -2
4.49210174	1.17098623 <sub>10</sub> -2	-8.87352687 <sub>10</sub> -2	1.22095057 <sub>10</sub> -1	2.54647908
6	1.88495559 <sub>10</sub> 1			
73	132			

941

-2.95192661 <sub>10</sub> -1	4.02634442 <sub>10</sub> -1	3.73375776	5.42243172	3.90320105
-3.08512413 <sub>10</sub> 1	4.01976217 <sub>10</sub> 1	3.88865882 <sub>10</sub> 2	5.41356716 <sub>10</sub> 2	3.89682012 <sub>10</sub> 2
-6.43132291 <sub>10</sub> -3	6.06772987 <sub>10</sub> -3	5.33787441 <sub>10</sub> -1	2.42319950 <sub>10</sub> -1	1.84654372 <sub>10</sub> -1
2.61320883 <sub>10</sub> -4	2.35284015 <sub>10</sub> -3	9.88569569 <sub>10</sub> -2	9.39626712 <sub>10</sub> -2	7.16021031 <sub>10</sub> -2
2.76380340 <sub>10</sub> 1	5.30968186 <sub>10</sub> -3	3.09496049 <sub>10</sub> -2	1.22095057 <sub>10</sub> -1	2.54647908
6	1.88495559 <sub>10</sub> 1			
81	232			

1205

-3.58388500 <sub>10</sub> -2	5.10031199 <sub>10</sub> -1	5.33135012 <sub>10</sub> -1	8.56712979	3.90466575
-1.97490258	6.37026700 <sub>10</sub> 1	2.44835503 <sub>10</sub> 1	1.07003070 <sub>10</sub> 3	4.87691015 <sub>10</sub> 2
-5.75771586 <sub>10</sub> -3	4.82712797 <sub>10</sub> -3	5.19386824 <sub>10</sub> -1	2.43284579 <sub>10</sub> -1	1.16130664 <sub>10</sub> -1
-5.06224412 <sub>10</sub> -4	2.41140457 <sub>10</sub> -3	1.40017094 <sub>10</sub> -1	1.21533456 <sub>10</sub> -1	5.80133809 <sub>10</sub> -2
3.94637375	5.16643628 <sub>10</sub> -3	-5.99548162 <sub>10</sub> -2	1.22095057 <sub>10</sub> -1	2.54647908
6	1.88495559 <sub>10</sub> 1			
81	332			

$$\bar{Y}_S(\sqrt{\varepsilon}) = a_{S,\varepsilon} \cdot \sqrt{\varepsilon} + b_{S,\varepsilon} = -ds \cdot \sqrt{\varepsilon} + 4 \cdot dl / 3\pi V^{1/3}$$

$$\bar{Y}_L(\sqrt{\varepsilon}) = a_{L,\varepsilon} \cdot \sqrt{\varepsilon} + b_{L,\varepsilon} = dl \cdot \sqrt{\varepsilon} + 24\pi^2 \cdot T / V^{1/3}$$

$$\bar{Y}_S(N^{1/3}) = a_{S,N} \cdot (6\pi^2 N)^{1/3} + b_{S,N} = ds \cdot (6\pi^2 N)^{1/3} + df$$

$$\bar{Y}_L(N^{1/3}) = a_{L,N} \cdot (6\pi^2 N)^{1/3} + b_{L,N} = dl \cdot (6\pi^2 N)^{1/3} + dg$$

mit  $f := (\frac{3^2}{128} - e/12\pi^2)$ .

Die im Programm verwendeten Bezeichnungen können unmittelbar den PRINT-Anweisungen des Programms 3) entnommen werden, wenn man beachtet, daß die Ergebnisse der Ausgleichsrechnung für jedes der fünf Ausgleichsintervalle in folgender Weise angeordnet sind:

$\Delta N$

$a_{S,\varepsilon}$	$P_{a_{S,\varepsilon}}$	$b_{S,\varepsilon}$	$P_{b_{S,\varepsilon}}$	$P_{S,\varepsilon}$
$a_{L,\varepsilon}$	$P_{a_{L,\varepsilon}}$	$b_{L,\varepsilon}$	$P_{b_{L,\varepsilon}}$	$P_{L,\varepsilon}$
$a_{S,N}$	$P_{a_{S,N}}$	$b_{S,N}$	$P_{b_{S,N}}$	$P_{S,N}$
$a_{L,N}$	$P_{a_{L,N}}$	$b_{L,N}$	$P_{b_{L,N}}$	$P_{L,N}$
$(\frac{3\pi V^{1/3}}{4}) \cdot b_{S,\varepsilon} \approx a_{L,\varepsilon}$	$\frac{1}{32\pi} \cdot b_{S,N}$	$12\pi^2 \cdot a_{L,N}$	$A_{L,N} = B_{S,N}$	$B_{S,\varepsilon}$
$A_{S,\varepsilon} = A_{S,N}$	$A_{L,\varepsilon}$			

T = (Zahl der Eigenniveaus im Intervall);  $\varepsilon_f = \frac{1}{\pi^2} \cdot y_f$  = (obere Intervallgrenze).

3) Algol 60-Programm und Ergebnisse der Berechnungen für ein kugelförmiges Potential

---

Wir geben zunächst das verwendete Programm, anschließend die unmittelbar von der Maschine ausgedruckten Ergebnisse an. Das Programm ist am rechten Rand nachträglich mit Erläuterungen versehen worden. Die Anordnung der ausgedruckten Zahlen entspricht i.W. den



in Abschnitt 2) angegebenen Druckplänen (zur Erläuterung der Bezeichnung s. 2);  $\xi = \xi_{max}$ .

$\Delta N$	E			
$\Delta N$	T	E	$E - \xi + k_r(\xi)$	$E - \xi$
R1				
$\sqrt{\xi}$	$(6\pi^2 N)^{1/3}$			
$Y_S(\sqrt{\xi})$				
$a_{SE}$	$P_{aSE}$	$b_{SE}$	$P_{bSE}$	$P_{SE}$
$Y_L(\sqrt{\xi})$				
$a_{LE}$	$P_{aLE}$	$b_{LE}$	$P_{bLE}$	$P_{LE}$
$Y_S(N^{1/3})$				
$a_{SN}$	$P_{aSN}$	$b_{SN}$	$P_{bSN}$	$P_{SN}$
$Y_L(N^{1/3})$				
$a_{LN}$	$P_{aLN}$	$b_{LN}$	$P_{bLN}$	$P_{LN}$
$(\frac{3\pi}{4} V^{1/3}) \cdot b_{SE} \approx a_{LE}; \frac{1}{32\pi} b_{SN}; 12\pi^2 a_{LN}; A_{LN} = B_{SN}; B_{SE}$				
$A_{SE} = A_{SN}; A_{LE};$				

Oberflächenterm der Gesamtenergie eines in einem kugelförmigen  
Innengebiet befindlichen wechselwirkungsfreien Fermionensystems.

```
*BEGIN *INTEGER* B,F,I,J,M,T;  
  *REAL* P12,P1,K1,K2,K3,K4,K5,K6,K7, L,L2,E3, V1,C1, C2, D1, E1, E2, M1,  
    WQ,W3V,VS,L1,E, M1,M2,A,B1,B2, B3,B4,B5,Q,W3;  
  *ARRAY*H1[1:7],Y1,X1,AG,AA,AB,AC,AD,R,SE[1:4], A1[1:5,1:4],X[1:78,1:4],DE,DL[1:78];  
  
P1:=3.141592654; P12:=P1-P1; K1:=-1/(1-P12); K2:=-1/(32-P1); K3:=-1/(24-P12); K4:=-6-P12;  
READ(M); V1:=-4-P1/3; W3:=EXP(LN(36-P1)/3); C1:=W3; D1:=-4-EXP(LN(6-P12)/3);  
W3V:=-EXP(LN(V1)/3); C2:=-C1-C1; VS:=-1/(W3V-W3V);  
  
*FOR* I:=1 *STEP* 1 *UNTIL* 5 *DO**FOR* J:=-1 *STEP* 1 *UNTIL* 4 *DO* A1[I,J]:=0;  
K5:=VS/K2; K6:=-1/(W3V-K3); K7:=-1/(K2-VS); H1[1]:=-K1-V1; H1[2]:=-K2-C1/VS; H1[3]:=-D1/K6;  
H1[4]:=-K1-VS; H1[5]:=-C1-K2-VS; H1[6]:=-(C2/128-D1/(12-P12))-VS; H1[7]:=-(13-P1-C1-C2/128-C1-D1/(8-P1))-VS;  
  
E:=0; L:=0; J:=1;  
M1: READ(A,B); DL[J]:=-2-B+1; DE[J]:=-A-A; L:=-L+DL[J]; E:=E+DE[J]-DL[J];  
*IF* J *LESS* M *THEN* *BEGIN* J:=J+1; *GOTO* M1 *END*; PRINT(L,E); J:=F+1;  
M2: *IF* DE[J] *LESS* DE[J+1] *THEN* *GOTO* M3; F:=J;  
M4: B1:=-DE[J]; B2:=-DL[J]; DE[J]:=-DE[J+1]; DL[J]:=-DL[J+1]; DE[J+1]:=-B1; DL[J+1]:=-B2;  
*IF* J *EQUAL* 1 *THEN* *GOTO* M5; J:=J-1; *IF* DE[J] *NOT LESS* DE[J+1] *THEN* *GOTO* M4;  
M5: J:=F;  
M3: *IF* J *EQUAL* M-1 *THEN* *GOTO* RECH; J:=J+1; *GOTO* M2;  
  
RECH: E:=0; L:=0; *FOR* J:=-1 *STEP* 1 *UNTIL* M *DO* *BEGIN*  
E:=E+DE[J]-DL[J]/2; L:=-L+DL[J]/2;  
Q:=DE[J]; T:=M;  
WQ:=EXP(LN(Q)/2); E1:=0; *FOR* I:=-1 *STEP* 1 *UNTIL* 3 *DO* E1:=-E1-WQ*H1[I]; E1:=-E1-Q*WQ;  
M1:=-K4-L; M2:=-EXP(LN(M1)/3); E2:=0; *FOR* I:=-4 *STEP* 1 *UNTIL* 6 *DO* E2:=-E2-M2*H1[I]; E2:=-E2-M1;  
R1:=-H1[7]-M2*M2; E3:=-E-E1; E2:=-E-E2;  
Y1[1]:=-K5-E1/(Q-WQ); Y1[2]:=-K6-E1/Q; Y1[3]:=-K7-E2/M1; Y1[4]:=-E2/(VS-M2-M2);  
X1[1]:=-X1[2]:=WQ; X1[3]:=-X1[4]:=-M2;  
  
*FOR* I:=-1 *STEP* 1 *UNTIL* 4 *DO* *BEGIN*  
A1[1,I]:=-A1[1,I]+X2[I]-DL[J]; A1[2,I]:=-A1[2,I]+Y1[I]-DL[J]; A1[3,I]:=-A1[3,I]+X1[I]-Y1[I]-DL[J];  
A1[4,I]:=-A1[4,I]+X2[I]-X1[I]-DL[J]; A1[5,I]:=-A1[5,I]+Y1[I]-Y1[I]-DL[J];  
*END*;  
  
E:=E+DE[J]-DL[J]/2;  
L:=-L+ DL[J]/2; *END*;  
  
PRINT(L,T,E,E1,E2,M1); PRINT(WQ,M2);  
  
*FOR* I:=-1 *STEP* 1 *UNTIL* 4 *DO* *BEGIN* PRINT(Y1[I]);  
AGE[I]:=-L-A1[4,I]-A2[1,I]-A1[1,I]; AAC[I]:=-(L-A1[3,I]-A1[1,I]-A1[2,I])/AGE[I];  
ABE[I]:=-(A1[2,I]-A1[4,I]-A1[3,I]-A1[1,I])/AGE[I];  
ACE[I]:=-A1[5,I]-ABE[I]-A1[2,I]-AAC[I]-A1[3,I]; ACE[I]:=-ACE[I]/(L-2); ACE[I]:=SQRT(ACE[I]);  
SE[I]:=-A1[4,I]/AGE[I]; SE[I]:=-ACE[I]-SQRT(SE[I]);  
RE[I]:=-L/AGE[I]; RE[I]:=-ACE[I]-SQRT(RE[I]);  
  
PRINT(AAC[I],RE[I],ABE[I],SE[I],ACE[I]); *END*;  
  
B1:=-ABE[1]-3-P1-W3V/4; B2:=-ABE[3]/32; B2:=-B2/P1; B3:=-12-P12-AAC[4]; B4:=-C2/128-D1/(12-P12);  
B5:=-D1-4/(W3V-3-P1); PRINT(B1,B2,B3,B4,B5, C1,D1);  
*END*;
```

DECLARATION  
Definitionen  
sortieren  
lesen  
Werteberechnung  
Ausgleichsrechnung  
Vergleichs-  
Größen

'COMMENT' ALCOR I.AHZ 2002 :

1.065000000 <sub>3</sub>	4.387571085 <sub>5</sub>			
1.065000000 <sub>3</sub>	77	4.387571079 <sub>5</sub>	-0.201536291 <sub>5</sub>	0.012458683 <sub>5</sub>
9.092770540 <sub>2</sub>				
2.595501083 <sub>1</sub>	3.054757087 <sub>1</sub>			
4.458924201 <sub>1</sub>				
-1.065204209 <sub>1</sub> -1	1.556309695 <sub>1</sub> -1	0.621483020 <sub>1</sub>	3.158881266	2.427031752 <sub>1</sub>
-1.395705883 <sub>3</sub>				
-1.053009971 <sub>1</sub>	1.371189593 <sub>1</sub>	6.290655963 <sub>2</sub>	2.783138299 <sub>2</sub>	2.138340904 <sub>3</sub>
5.261847854				
-0.060962167	3.458867917 <sub>1</sub> -3	0.727123192 <sub>1</sub>	1.066473384 <sub>1</sub> -1	8.694756098 <sub>1</sub> -1
0.030699423 <sub>2</sub>				
0.451201825 <sub>1</sub> -1	9.064438984 <sub>1</sub> -4	0.023581616 <sub>1</sub>	2.794840147 <sub>1</sub> -2	2.278580392 <sub>1</sub> -1
2.360406026 <sub>1</sub>	7.232828139 <sub>1</sub> -2	5.343820221	0.510658385 <sub>1</sub> -1	4.104903801
4.835975865	1.559110836 <sub>1</sub>			

## ANMERKUNGEN

### Zur Einleitung und zu Kap. I.

1) Die v. Weizsäckerformel gibt im Tröpfchenmodell die Bindungsenergie eines fiktiven Atomkernes an, dessen Nukleonen keine Ladung haben und alle untereinander identisch sind. Um ihre Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  aus dem Verlauf der Bindungsenergien der wirklichen Atomkerne bestimmen zu können, muss im Modell zumindest noch die Ladung der Protonen und die Asymmetrie (verschiedene Proton- und Neutronen-Anzahlen) berücksichtigt werden. Das ist von Bethe durch Hinzufügung eines Coulomb-(Paarungs-) und Asymmetrieterms zu den von v. Weizsäcker vorgeschlagenen Termen geschehen. Die Bethe - v. Weizsäckergleichung enthält drei freie Parameter, die durch den Verlauf der empirischen Bindungsenergien zu bestimmen sind. Zieht man von dem erhaltenen Ausdruck (mit angepassten Koeffizienten) die nicht in der v. Weizsäckerformel enthaltenen Terme ab, so erhält man "empirische" Werte für die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  von Gleichung (1), die mit den theoretisch in Kap. I aus dem Fernigas-Modell berechneten Koeffizienten verglichen werden können.

1a) Alle ellipsoid-, zylinder-, quader-, ... förmigen Körper bezeichnen wir als vom Typ eines Ellipsoides, Zylinders, Quaders, ...

2) Die dabei auftretenden Schwierigkeiten sind sehr ähnlich zu denen, welche die Mathematiker (Jaak Peetre (1957), Pleijel, u.a.) vorfanden, als sie die Typ-Unabhängigkeit von  $\zeta$  - die im Falle der freien Schrödingergleichung (=Schwingungsgleichung im euklidischen Raum) bekannt ist, (H.Weyl, (1915)) - für die Schwingungsgleichung im Riemannschen Raum zu beweisen suchten, bzw. für allgemeinere Klassen von Differentialgleichungen. Da ein allgemeiner Beweis nicht gelang, behalf man sich auch dort mit der numerischen Methode, die, wenn schon keinen Beweis, so doch eine begründete Vermutung liefert, bzw. die Gestaltunabhängigkeit verneint.

3) Für alle Komplikationen (etwa  $\eta < \infty$ ) sind die auftretenden Integrale nur numerisch lösbar.

4 Die Summe (5) bedeute: Summation über alle  $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  mit der Nebenbedingung  $k_{\alpha} \leq k_p$ . "A:=B" bedeute: "A wird der Wert der (bekannten) Größe B zugewiesen".

5 Swiatecki nahm diese "lokale Energiedichte"  $\xi(x) = \gamma|\psi|^2$  sehr ernst und diskutierte an ihrem Verlauf die verschiedenen Effekte. Ebenso könnte man aber z.B. die wesentlich nichtnegative Größe  $\tilde{\xi}(x) = (\gamma')^2$  betrachten, welche einen durchaus anderen Verlauf hat. Z.B. ist für sehr kleine  $x$

$$\left(\xi(x)\right)_{x \ll \lambda_p} = x^2 / 12\pi^2 \lambda_p^5, \quad \text{dagegen} \quad \left(\tilde{\xi}(x)\right)_{x \ll \lambda_p} = \frac{\tau}{\lambda_p^5},$$

$r$  ist eine positive Zahl. Für große  $x$ , ( $x \gg \lambda_p$ ) konvergieren aber  $\xi(x)$  und  $\tilde{\xi}(x)$  gegen  $\xi_{\infty}$ . Die Wahl einer "lokalen Energiedichtefunktion" ist also recht willkürlich. Die Größen  $\xi_{av}$ ,  $\xi_{\infty}$  sind aber natürlich unabhängig von der Wahl.

6 Da das ganze Halbebenenproblem praktisch eindimensional ist, betrachten wir eine Röhre vom Querschnitt  $1\text{cm}^2$  und der Länge  $L/2$ . Ihre Gesamtenergie ist die spezifische Energie.

7 Die Bedingung (9) ist äquivalent der Forderung großer Teilchenzahlen  $N \gg 1$ ; denn nach (12) mit (10) ist

$$N = S_{av} \cdot L^3 = \frac{1}{6\pi^2} \cdot \left(\frac{L}{\lambda_p}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{3\pi}{4} \cdot \frac{\lambda_p}{L}\right).$$

8 (19)-(21) gelten für endliche, ev. asymptotisch große  $N$ . Die Herleitung (13) - (14) benutzt jedoch die Limesbildung  $N \rightarrow \infty$ . (Ersetzung der Zustandssumme durch ein Integral). Daher betrachten wir (19) - (21) lediglich als Vermutung. Ihre ev. notwendige Korrektur wird auf S. (17a) und ff. behandelt.

9 Bis 1951 war zwar der Ansatz, der Swiatecki zu seiner Methode führte, bekannt, jedoch waren nur fehlerhafte Ergebnisse errechnet worden. (1951) berechnete dann Swiatecki  $\sigma_d$ , später Hill & Wheeler (1953)  $\sigma_p$ . Hill & Wheeler meinten,  $\sigma_d$  berechnet zu haben, Swiatecki meinte, daß Hill & Wheeler nur  $(\sigma_p - \sigma_d)$  berechnet hätten. (s. Swiatecki, 1951, S.226)

10 G. Lanzl (1962) schließt gerade diesen Effekt in seinem Ansatz zur Berechnung der Oberflächenspannung aus. Er setzt alle Wellenfunktionen (bis auf eine hier bedeutungslose Phase) identisch gleich einer "universalen" Funktion  $f(x)$ , behält aber die Eigenwerte des Kastens bei. Auch eine ausführliche stö-

rungstheoretische Berücksichtigung der Kernkräfte für den potentiellen Anteil der Gesamtenergie läßt den Vergleich mit dem Experiment nicht günstiger ausfallen. Bestes Ergebnis bei 5 Parametern:  $\sigma_{\text{ker.}} : \sigma_{\text{exp}} = 3:1$ . (ohne den potentiellen Anteil bei Benutzung der exp. bekannten Oberflächendicke würde sein Ergebnis wesentlich besser ausfallen: etwa 66% des exp. Wertes).

11 Es seien also die Potentialgrößen benutzt.

12  $L := \int_{\text{off.}} (1/R_1 + \dots / R_2) dx$ ; mit  $R_1, R_2$ , als Hauptkrümmungsradien. Für beliebige Vielflache  $\mathcal{D}$  ist  $L/2$  identisch mit dem Begriff der "totalen Krümmung"  $M$ . Es ist  $(2M) := \sum_{i=1}^n a_i \cdot \chi_i$ , wobei  $a_i$  die Länge der  $i$ -ten Kante ist, von denen es insgesamt  $n$  gibt (beim Quader 12(!)).  $\chi_i$  sei der Winkel, den die längs  $a_i$  angrenzenden Flächen miteinander bilden. Für unseren Quader ist  $2M = \frac{\pi}{2} \cdot 4 \cdot (a_1 + a_2 + a_3) = L$ . Beweis aus der Definition von  $L$ : man ersetze jede Kante durch den  $(\chi_i / 2\pi)$ -ten Teil eines Zylinders (Segment) vom Radius  $R_1$  und berechne  $L$  für  $R_2 = \infty$ ,  $\lim_{R_1 \rightarrow 0}$ . Ergebnis:  $2M$ . Über den Begriff der Kantenkrümmung  $(2M)$  siehe W. Blaschke (1955).

13 siehe Kap. IIIa)

14 Die üblichen Definitionen: "Wendepunkt der Dichteverteilung", "wenn die Dichte auf die Hälfte von  $\rho_{\infty}$  gefallen ist", "Mitte des 90% - 10% Abfalls von  $\rho(x)$ ", pp. sind ebenfalls recht willkürlich und für Vergleiche verschiedener Dichteverteilungen wenig geeignet. Im Gegensatz zu ihnen geht Swiateckis Definition nicht auf den Dichteverlauf im einzelnen ein, sondern benutzt nur eine Eigenschaft der Dichteverteilung: das Integral über sie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \rho(x) =: \rho_{\infty} \cdot \hat{V}.$$

15 Hill & Wheeler haben dagegen  $I(31)$ , d.h.  $H(N, V, s, l)$  zum Vergleich mit dem Experiment benutzt und einen völlig unbrauchbaren Wert für die Oberflächenspannung erhalten. Die Atomkerne haben eben nicht alle gleiches Volumen sondern annähernd gleiche Dichte.

zu Kap. II

- 1) Wir betrachten  $H, h_f, N$  und  $V$  als physikalische Größen, nicht als Funktionssymbole, bezeichnen also z.B. die Gesamtenergie eines Systems immer durch den gleichen Buchstaben, unabhängig von seiner speziellen Darstellung in irgendwelchen Variablen.

zu Kap. III1) Das Legendre - Jacobi - Symbol

Es sei  $u$  ein Produkt der Primzahlen  $p_1 \cdot p_2 \cdot p_3 \dots \equiv u$ , dann gilt (s. Bateman Man. Proj. 17.5)

$$(a) \quad \left(\frac{k}{u}\right) = \left(\frac{k}{p_1}\right) \cdot \left(\frac{k}{p_2}\right) \cdot \left(\frac{k}{p_3}\right) \cdot \dots$$

Ist  $p$  kein Teiler von  $k$ , so ist

$$(b) \quad \left(\frac{k}{p}\right) = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases} \text{ falls } k \begin{cases} \text{ein} \\ \text{kein} \end{cases} \text{ quadratischer Rest modulo } p \text{ ist.}$$

" $k$  ist quadratischer Rest (mod  $p$ )" bedeute, daß die Gleichung  $x^2 \equiv k \pmod{p}$  mindestens eine ganzzahlige Lösung hat.

Beispiel:  $-1$  ist quadratischer Rest (mod. 65), denn es ist

$$-1 + 65 = 8^2, \quad -1 + 5 \cdot 65 = 18^2; \text{ also ist u.a. } x = \pm 8, \pm 18.$$

zu Kap. IV

- 1) Die Differentialgleichung für die Zylinderfunktionen  $J_\nu(x)$  lautet:

$$J_\nu'' + \frac{1}{x} J_\nu' + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) J_\nu = 0.$$

Zu ihr gehört die Wronski-Determinante  $W(J_\nu) = \frac{2}{x} = \exp\left\{-\int \frac{1}{x} dx\right\}$ .

Durch die Transformation  $y_\nu = J_\nu / \sqrt{x}$  geht die Differentialgleichung über in

$$y_\nu'' + g(x) \cdot y_\nu = 0, \quad g(x) = 1 - \frac{1}{x^2} \left(\nu^2 - \frac{1}{4}\right).$$

Für  $\nu = \ell + \frac{1}{2}$ , d.h. für halbzahlige Zylinderfunktionen folgt:

$$y_\ell''(x) + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right) y_\ell(x) = 0, \quad g_\ell(x) = 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2},$$

und es ist:

$$W(y_\ell) = 1.$$

LITERATURVERZEICHNIS

1847

G. Eisenstein, J. r. + a. Math. 35, 368

1907

J. W. L. Glaisher Proc. Lond. Math. Soc. (2), 1, 479 ff.

H. Weyl Diss. Göttingen

1908

H. Weyl Math. Ann. 66, 273 ff.

1909

H. Weyl Gött. Nachr. 37 - 64 (Nachr. d. Kgl. Ges. d. Wiss. Gött. math. phys. Klasse)

1910

H. Weyl Math. Ann. 68, 220 - 264 (Habilitation)

Gött. Nachr. 443 ff.

1912

H. Weyl Math. Ann. Bd. LXXI 441 ff.

J. r. + a. Math. 1 ff.

(Über die Abhängigkeit der Eigenschwingungen einer Membran von deren Begrenzung)

1913

H. Weyl J. r. + a. Math. 177 ff.

(Über die Randwertaufgabe der Strahlungsth. und asymptotische Spektralgesetze)

1915

H. Weyl Rend. circ. math. pal. XXXIX

(Das asymptotische Verteilungsgesetz der Eigenschwingungen eines beliebig gestalteten elastischen Körpers)

1918

S. Ramanujan Trans. Cambridge Phil. Soc. 22, No. 15, 259 ff.



1951

W. J. Swiatecki Proc. Phys. Soc. A64, 226

1953

P. J. Hill & J. A. Wheeler Phys. Rev. 89, 1125

1955

W. J. Swiatecki Proc. Phys. Soc. A68, 285  
Phys. Rev. 98, 203

1956

R. Hofstadter Rev. Mod. Phys. 28, 214  
A. Pleijel Comm. pure + appl. Math. 9, 543 ff.

1957

J. Peetre Math. Scand. 5.15 - 20

1960

J. Olver R. M. S. T., Vol. III, Part I, Zeros of Besselfunctions

1961

R. G. Seyler & C. H. Blanchard Phys. Rev. 124, 227

1962

G. Lanzl Diss. Göttingen

---

Bateman Man. Proj. Vol. III, Abschn. 17 (Mc Grawhill)

W. Blaschke: Vorlesungen über Integralgeometrie, § 27 (Springer 1960)