

Die Berechnung von kollektiven Massen für das Drei-Kugel-Fragmentations-Modell

Diplomarbeit

**vorgelegt
von**

Wolfgang Renner

aus Kelkheim /Ts.

**Frankfurt am Main
Februar 1989**

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Der Werner-Wheeler Formalismus	4
2.1	Die Behandlung der Schwerpunktbewegung	7
3	Die Geometrie des Dreikugelmodells	9
3.1	Der Geometrietyp TBM	10
3.2	Versuche für eine bessere Geometrie	13
3.3	DKM bzw. Erfolg beim vierten Versuch	15
3.4	Gibt es noch andere Möglichkeiten ?	19
4	Die potentielle Energie	20
4.1	Das verfeinerte Tröpfchenmodell	20
4.2	Die Rechnungen zur scharfen Coulombenergie	21
4.3	Coulombkorrektur der diffusen Oberfläche	23
4.4	Das Yukawa-plus-exponential Potential	24
4.5	Das einfache Tröpfchenmodell LDM	25
1	Anhang I	29
1.1	Die Berechnung der Coulombenergie mit diffuser Oberfläche	29
1.2	Yukawa-plus-exponential Oberflächenenergie	33
1.3	Die Transformation von Volumen- auf Oberflächenintegrale	35
1.4	Die Umformung des Coulombintegrals in eine effizient integrierbare Form .	38
2	Anhang II	42
2.1	Die Berechnung der partiellen Ableitungen $\frac{\partial q}{\partial x}$	42
2.2	Die Koeffizienten A_i und C_i der Werner-Wheeler Massen	48
2.3	Der Schwerpunkt und seine Bewegung	52
3	Anhang III	55
3.1	Die Programmstrukturen	55
4	Graphiken	60

Kapitel 1

Einleitung

Für einen historischen Rückblick zur vorliegenden Arbeit, muß man ins Jahr 1896 zurück schauen, als Becquerel die radioaktive Strahlung entdeckte. Das Experiment zeigte, daß bestimmte Mineralien Fotoplatten ohne Lichtwirkung schwärzten. Man erkannte bald, daß es verschiedene Arten von Strahlung gibt, welche sich durch ihr Durchdringungsvermögen und die Ablenkbarkeit im Magnetfeld unterscheiden. Die Natur der α -Teilchen als Heliumkerne wurde um 1908 von Rutherford aufgeklärt. Man untersuchte dann auch die Energiespektren der α -Strahlung, welche man aus Reichweitenmessungen in Luft gewann. 1912 wurde von Geiger und Nuttall eine empirische Regel zwischen Zerfallskonstante λ und α -Teilchen Energie E gefunden: $\ln(\lambda) = \text{Const} + b \cdot E$

Eine theoretische Erklärung erwies sich als problematisch. α -Streuexperimente zeigten, daß die Coulombabstoßung mindestens bis 10^{-12}cm alleine ohne anziehende Kernkraft wirkt. Würde jedoch ein α -Teilchen von diesem Coulombpotential beschleunigt, ergäbe sich eine viel zu große Energie. Erst im Jahre 1928 gelang es Gamov [1] mit der neuen Quantenmechanik den α -Zerfall als "Tunnelprozess" zu beschreiben und auch die Geiger-Nuttallsche Regel quantitativ zu erklären.

Der nächste große Meilenstein war die experimentelle Entdeckung der Kernspaltung durch Hahn, Meitner und Strassmann [2]. N. Bohr [3] beschrieb kurz darauf die Kernspaltung mit dem Bethe-Weizsäcker Tröpfchenmodell [4] und einer in Legendre-Polynomen entwickelten Kernform:

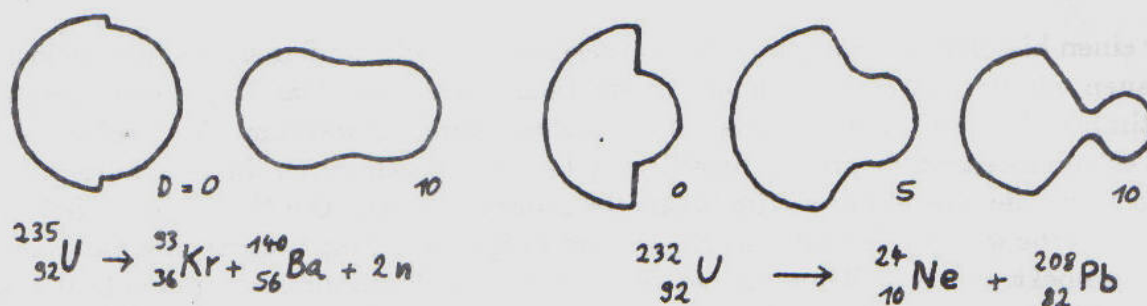
$$R(\theta) = R_0 \left[1 + \alpha_0 + \alpha_2 P_2(\cos \theta) + \alpha_3 P_3(\cos \theta) + \dots \right] \quad (1.1)$$

Damit ergab sich z.B. der Spaltparameter $x = \frac{E_C}{2E_S}$ (E_C = Coulombenergie, E_S = Oberflächenenergie des kugelförmigen Kerns). Ist $x < 1$ dann ist die Kugelform ein lokales Minimum bezüglich elliptischer Deformation und der Kern gegen Spaltung in erster Näherung stabil. Bohr machte auch qualitative Aussagen zur Potential-Energie-Fläche (PEF) der Spaltung.

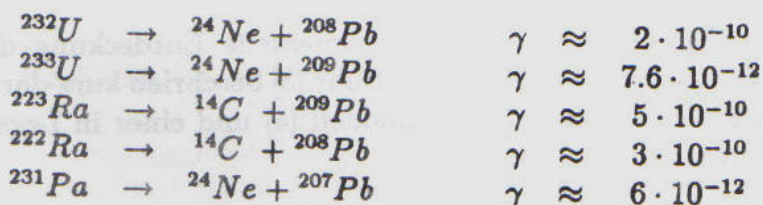
Quantitative Berechnungen dieser PEF wurden erst mit leistungsfähigeren Rechenmaschinen möglich. Frankel [5] berechnete die PEF des Bohr'schen Modells 1947 auf der Eniac¹. Die Bohr'sche Reihenentwicklung hat den Nachteil, mit den α_i viele physikalisch unspezifische Parameter zu haben und nicht alle notwendigen Formen zu ermöglichen.

¹Electronic Numerical Integrator And Computer. 1946 von J.P. Eckert und J.W. Mauchly an der Universität Philadelphia (USA) gebaut. 350 zehnstellige Multiplikationen pro Sekunde, 18000 Röhren.

Entsprechend hat es eine Suche nach Kernform-Parametrisationen gegeben, welche möglichst wenige und physikalisch sinnvolle verallgemeinerte Koordinaten haben. Alle diese Geometriemodelle sind zylindersymmetrisch. Beispielsweise rechnete J. Lawrence [6] 1965 mit folgender 2-parametrischen Geometrie $\rho^2(z) = A \cdot z^4 + B \cdot z^2 + C$. C ergibt sich aus der Volumenerhaltung. J. Nix [7] rechnete 1969 mit einer Geometrie aus zwei Rotationsellipsoiden, welche von einem Rotationshyperboloid glatt verbunden werden. Dieses Modell hat 6 verallgemeinerte Koordinaten und ermöglicht asymmetrische Formen. Anfang der siebziger Jahre wendete man das Nilson Modell auf eine Zweizentrengeometrie ähnlich der von Nix an (Rechnungen, Literatur [8]). Die Rotationsellipsoide werden hierbei mit einer Polynomfunktion glatt verbunden. Wie in der folgenden Skizze zu sehen ist, ist diese Geometrie nur eingeschränkt für starke Massenasymmetrie geeignet:



Mit diesen quantenmechanischen Schalenkorrekturen konnte nun endlich die experimentell beobachtete Massenasymmetrie beschrieben werden. Diese Rechnungen führten zur Voraussage von stark asymmetrischer Spaltung [9]. In den folgenden Jahren wurde diese auch experimentell nachgewiesen [10] und damit das theoretische Interesse verstärkt. Unter anderem wurden folgende Reaktionen beobachtet (Man nennt diese Spaltprozesse auch "Cluster-Zerfall"):



(Mit γ ist das Verhältnis von Spaltereignissen zu anderen Zerfällen gemeint.)

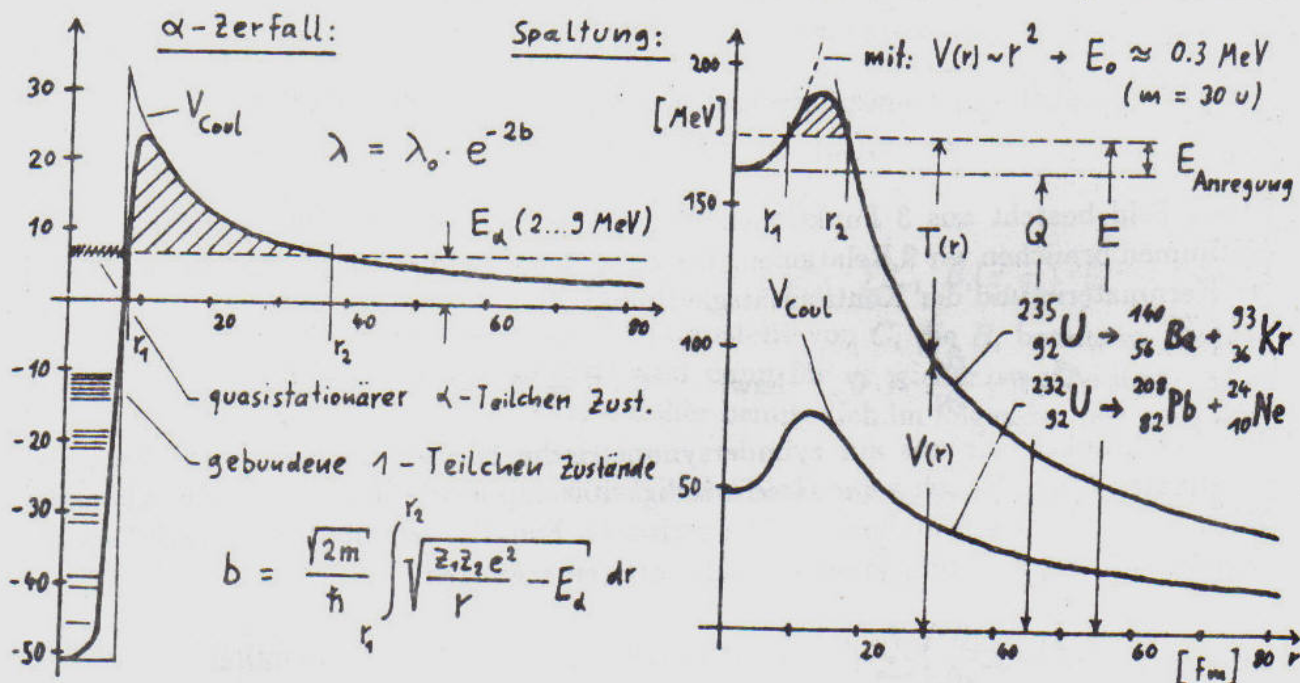
Die Geometrie des Anfang der Siebziger benutzten Asymmetrischen-Zweizentren-Schalenmodells ATCSM ermöglicht analytische Eigenfunktionslösungen welche durch Störungen korrigiert werden. Dadurch ergibt sich eine vergleichsweise schnelle und handhabbare Berechnung. Zur Beschreibung von starker Massenasymmetrie ist diese Geometrie jedoch weniger geeignet. Die Suche nach einer für diesen Zweck geeigneten Geometrie führte Hou-ij Wang zum Drei-Kugel-Modell [11]. Die Schalenkorrekturen können dabei nur voll numerisch berechnet werden [12], jedoch ist jetzt die Geometrie bis zum α -Zerfall problemlos.

Aus der PEF kann man Schlüsse über Energie und auch Spaltverteilung ziehen. Die Zerfallskonstante λ läßt sich mit Hilfe der WKB-Näherung [13] und gleichlautend mit dem verallgemeinerten Ausdruck zum Tunneln [14] bis auf eine Konstante bestimmen:

$$\lambda = \lambda_0 \cdot e^{-2b} \quad b = \int_{s_1}^{s_2} \sqrt{\frac{2}{\hbar^2} (V(s) - E)} M(s) ds \quad M(s) = \sum_{i,j} M_{ij} \frac{\partial q_i}{\partial s} \frac{\partial q_j}{\partial s} \quad (1.2)$$

Die q_i sind die verallgemeinerten Koordinaten. s ist der eindimensionale Spaltpfad der sich durch Minimieren von b ergibt. λ_0 ist schwer bestimmbar. Es ergibt sich aus der Präformationswahrscheinlichkeit des Fragments im Mutterkern und der Frequenz mit der es gegen die Potentialbarriere stößt. Manchmal liest man auch den Ausdruck $\lambda = \lambda_0 / (1 + e^{2b})$. Dieser Ausdruck ergibt sich beim Lösen der Schrödingergleichung mit einer Potentialbarriere, die aus einer unendlichen nach unten offenen Parabel besteht. Die Lösung ist eine parabolische Zylinderfunktion. Das obige Resultat ergibt sich dann aus den asymptotischen Entwicklungen [15]. Die Rechnung wirkt etwas obskur und es ist erstaunlich, daß das WKB-Resultat so gut getroffen wird. Da der Exponentialausdruck normalerweise sowiso erheblich größer als 1 ist, kann man auch den plausibleren WKB-Ausdruck benutzen.

Um das allgemeine Problem der Spaltung noch etwas besser zu illustrieren, habe ich die potentielle Energie für den α -Zerfall, die gewöhnliche Uranspaltung (Reaktorreaktion) und für einen der neuen Clusterzerfälle eindimensional (Zentrenabstand r) skizziert:



Beim α -Zerfall kann das Durchdringungsintegral b der schraffierten Spaltbarriere explizit gelöst werden [14]. Bei der Spaltungsgraphik ist die kinetische $T(r)$ und potentielle $V(r)$ Energie eingezeichnet. Q ist die Potentialdifferenz zwischen Compoundkern und vollständig getrennten Fragmenten. Wenn dem Kern zum Spalten eine Anregungsenergie zugefügt wurde, spricht man von "induzierter" Spaltung. Ansonsten nennt man eine Spaltung "spontan". Zum lokalen Minimum bei $r = 0$ läßt sich eine quantenmechanische Nullpunktsenergie E_0 abschätzen. Dieses ist jedoch an sich Thema der Vibrationsmodelle. - Der Inhalt meiner vorliegenden Diplomarbeit ist die Berechnung der Massenmatrix M_{ij} für das Drei-Kugel Modell mit der Werner-Wheeler Methode.

Kapitel 2

Der Werner-Wheeler Formalismus

Ein klassisch-makroskopisches Kernmodell wird mit n verallgemeinerten Koordinaten q_i , $i = 1 \dots n$ beschrieben. Sie geben die Kernform an und damit auch die potentielle Energie. Um eine vollständige Hamilton-Funktion zu erhalten braucht man die kinetische Energie $\sum_{i,j=1}^n M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j$. Unbekannt ist die Massenmatrix M_{ij} . Sie läßt sich aus dem Massenfluß im Kerntröpfchen ermitteln.

Der Massenfluß wird durch ein Geschwindigkeitsfeld beschrieben:

$$\begin{aligned} \vec{v}(\vec{r}) &= v_x(x, y, z) \cdot \vec{e}_x + v_y(x, y, z) \cdot \vec{e}_y + v_z(x, y, z) \cdot \vec{e}_z \\ &= v_x(z, \rho, \varphi) \cdot \vec{e}_x + v_\rho(z, \rho, \varphi) \cdot \vec{e}_\rho + v_\varphi(z, \rho, \varphi) \cdot \vec{e}_\varphi \end{aligned} \quad (2.1)$$

Dieses Feld besteht aus 3 Funktionen mit jeweils 3 Variablen. Um es vollständig zu bestimmen brauchen wir 9 Relationen. Die erste Relation folgt aus der Inkompressibilität der Kernmaterie und der Kontinuitätsgleichung:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad \underline{\text{1. Relation}} \quad (2.2)$$

Nun beschränken wir uns auf zylindersymmetrische Formen und gehen auf Zylinderkoordinaten über. Es soll keine Geschwindigkeitskomponente in φ -Richtung existieren. Daher wird das Geschwindigkeitsfeld durch zwei Funktionen mit je zwei Variablen beschrieben. Dabei sind fünf Freiheitsgrade verloren gegangen:

$$\vec{v}(z, \rho) = v_z(z, \rho) \cdot \vec{e}_z + v_\rho(z, \rho) \cdot \vec{e}_\rho \quad \underline{\text{2. - 6. Relation}} \quad (2.3)$$

Durch eine angemessene Spezialisierung des Geschwindigkeitsfeldes werden jetzt zwei weitere Freiheitsgrade eliminiert. Man kann beispielsweise fordern, daß das Geschwindigkeitsfeld rotationsfrei sein soll und es sich daher als Gradient eines skalaren Potentials $\phi(z, \rho)$ darstellen läßt:

$$\vec{\nabla} \times \vec{v} = 0 \quad \rightarrow \quad \vec{v} = \vec{\nabla} \phi(z, \rho) \quad \underline{\text{7. - 8. Relation}} \quad (2.4)$$

Man nennt diesen Ansatz "Irrotational-Flow Modell" [16]. Die Berechnung der Massenmatrix M_{ij} aus diesem Geschwindigkeitsfeld geht über orthogonale Funktionssysteme und ist daher rechenzeitintensiv und für starke Deformationen ungenau.

Einen anderen Weg, um zwei weitere Freiheitsgrade zu eliminieren, geht die Werner-Wheeler Methode [17]. Das Geschwindigkeitsfeld wird hierbei willkürlich aber in sinnvoller Weise vereinfacht: Erstens soll die Geschwindigkeitskomponente in z -Richtung v_z nicht von ρ abhängen. Zweitens soll die Geschwindigkeitskomponente in ρ -Richtung einfach proportional zu ρ sein:

$$\vec{v} = v_z(z, \rho) \cdot \vec{e}_z + v_\rho(z, \rho) \cdot \vec{e}_\rho \rightarrow v_z(z) \cdot \vec{e}_z + v_\rho(z, \rho) \cdot \vec{e}_\rho \quad \underline{7. \text{ Relation}}$$

$$\vec{v} = v_z(z) \cdot \vec{e}_z + v_\rho(z, \rho) \cdot \vec{e}_\rho \rightarrow v_z(z) \cdot \vec{e}_z + \rho \cdot \tilde{v}_\rho(z) \cdot \vec{e}_\rho \quad \underline{8. \text{ Relation}} \quad (2.5)$$

Um den letzten Freiheitsgrad zu eliminieren und das Geschwindigkeitsfeld vollständig zu bestimmen, muß noch die Geometrie des Kernes eingearbeitet werden. Sie ist parametrisch durch den Kernradius $P(z, q_k(t))$ gegeben. Die Bewegung wird dabei über die verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\dot{q}_k$ indirekt eingebracht:

$$\vec{v}(z, \rho) = \vec{v}(z, \rho; P(z, q_k(t))) \quad \underline{9. \text{ Relation}} \quad (2.6)$$

Mit diesem Geschwindigkeitsfeld läßt sich nun die Massenmatrix bequem berechnen.

Da die Flußgeschwindigkeit eine lineare Funktion der verallgemeinerten Geschwindigkeiten sein soll gilt:

$$\begin{aligned} v_z(z) &= \sum_{i=1}^n A_i(z, q_k) \cdot \dot{q}_i \\ v_\rho(z, \rho) &= \rho \cdot \sum_{i=1}^n C_i(z, q_k) \cdot \dot{q}_i = \frac{\rho}{P(z)} \cdot \sum_{i=1}^n B_i(z, q_k) \cdot \dot{q}_i \end{aligned} \quad (2.7)$$

Mit q_k sind einfach alle q_i gemeint. Man kann anstelle von C_i die B_i benutzen. Dabei wird jedoch $P(z)$ an C_i dran multipliziert und dann für v_ρ wieder wegdividiert. Mir erschien dieses nicht sonderlich sinnvoll und daher benutze ich im folgenden nur noch die C_i .

Benutzen wir den Nabla-Operator in Zylinderkoordinaten, dann bekommen wir aus der Kontinuitätsgleichung eine Relation von C_i zu A_i :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{\partial}{\partial z} v_z + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \cdot v_\rho) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial z} A_i + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho^2 C_i) \right) \cdot \dot{q}_i = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial z} A_i + 2 \cdot C_i \right) \cdot \dot{q}_i = 0 \quad (2.8)$$

Da diese Bedingungen für beliebige $\dot{q}_i$ erfüllt sein muß, erhalten wir:

$$C_i = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} A_i \quad (2.9)$$

Zur Berechnung der A_i stellen wir uns eine Fläche vor, welche ein Volumen V der inkompressiblen Flüssigkeit umschließt und sich mit der Flüssigkeit mitbewegt. Der Betrag des umschlossenen Volumen ist damit konstant. Die Bewegung der Fläche entspricht der von der Flüssigkeit. Umschließt die Fläche den Kern bis zu einer Ebenen senkrecht

zur z -Achse, ist die Geschwindigkeit $\dot{z}$ der Ebene bei einer zeitlichen Änderung von V gerade das gesuchte v_z . Damit erhalten wir die A_i :

$$V(z, q_k) = \pi \int_a^z P^2(z', q_k) dz' \quad \text{bzw.} \quad V(z, q_k) = \pi \int_z^b P^2(z', q_k) dz'$$

$$\frac{dV}{dt} = \frac{\partial V}{\partial z} \dot{z} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial V}{\partial q_i} \dot{q}_i = 0 \quad \text{Mit:} \quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\pi \int_a^z P^2 dz' \right) = \pi P^2(z) \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\pi \int_z^b P^2 dz' \right) = -\pi P^2(z)$$

$$\Rightarrow \frac{dV}{dt} = \pi \left\{ P^2 \dot{z} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\int_a^z P^2 dz' \right) \dot{q}_i \right\} = 0 \quad \Rightarrow v_z(z) = -\frac{1}{P^2} \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\int_a^z P^2 dz' \right) \cdot \dot{q}_i$$

$$\text{bzw.} \quad \frac{dV}{dt} = \pi \left\{ -P^2 \dot{z} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\int_z^b P^2 dz' \right) \dot{q}_i \right\} = 0 \quad \Rightarrow v_z(z) = \frac{1}{P^2} \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\int_z^b P^2 dz' \right) \cdot \dot{q}_i$$

Vergleicht man diese Resultate mit der obigen Definition der A_i , ergibt sich unmittelbar:

$$A_i = -\frac{1}{P^2(z)} \frac{\partial}{\partial q_i} \int_a^z P^2(z', q_k) dz' \quad \text{bzw.} \quad A_i = \frac{1}{P^2(z)} \frac{\partial}{\partial q_i} \int_z^b P^2(z', q_k) dz' \quad (2.10)$$

Die beiden Bestimmungsgleichungen für A_i liefern jeweils das gleiche Resultat, daher wählt man den Ausdruck mit dem man bequemer rechnen kann.

Zur Berechnung der Massen vergleichen wir die kinetische Energie des fließenden Tropfen mit dem Ausdruck der kinetischen Energie für verallgemeinerte Koordinaten q_i :

$$T = \frac{1}{2} \sigma \int_{V_0} \vec{v}^2 dV \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j \quad \text{Mit:} \quad \vec{v}^2 = v_z^2(z) + v_\rho^2(z, \rho)$$

$$T = \frac{1}{2} \sigma \int_0^{2\pi} \int_a^b \int_0^{P(z)} \left\{ \left(\sum_{i=1}^n A_i \dot{q}_i \right) \cdot \left(\sum_{j=1}^n A_j \dot{q}_j \right) + \left(\rho \sum_{i=1}^n C_i \dot{q}_i \right) \cdot \left(\rho \sum_{j=1}^n C_j \dot{q}_j \right) \right\} \rho d\rho dz d\varphi$$

$$T = \pi \sigma \sum_{i,j=1}^n \int_a^b \int_0^{P(z)} \left\{ A_i A_j \rho + C_i C_j \rho^3 \right\} d\rho dz \cdot \dot{q}_i \dot{q}_j = \frac{1}{2} \pi \sigma \sum_{i,j=1}^n \int_a^b \left\{ A_i A_j P^2 + C_i C_j \frac{P^4}{2} \right\} dz \cdot \dot{q}_i \dot{q}_j$$

Nun erkennt man die Massenmatrixelemente:

$$M_{ij} = \pi \sigma \int_a^b P^2 \left\{ A_i A_j + \frac{P^2}{2} C_i C_j \right\} dz \quad (2.11)$$

Ist dieses Integral nicht explizit lösbar, dann kann man es gut mit Gauß-Legendre Integration numerisch berechnen.

2.1 Die Behandlung der Schwerpunktbewegung

Beim Berechnen der verallgemeinerten Massen muß die Schwerpunkterhaltung berücksichtigt werden. Für diesen Zweck könnte man die Geometrie des spaltenden Kernes im Schwerpunktsystem definieren. Bei asymmetrischer Spaltung ergibt eine solche Definition jedoch Schwierigkeiten beim Berechnen der Werner-Wheeler Massen. Der Werner-Wheeler Formalismus läßt sich beim Dreikugelmodell gut in einem Koordinatensystem durchführen, dessen Ursprung im Zentrum einer Fragmentkugel liegt. Dabei ist der Schwerpunkt eine Funktion der verallgemeinerten Koordinaten q_i und liegt bei z_s auf der z -Achse:

$$z_s = \frac{\pi}{VOL_0} \int_a^b P^2(z) z dz \quad \dot{z}_s = \sum_i \frac{\partial z_s}{\partial q_i} \cdot \dot{q}_i = \sum_i Q_i \cdot \dot{q}_i \quad Q_i = \frac{\partial z_s}{\partial q_i} \quad (2.12)$$

Jetzt kann man die kinetische Energie berechnen und man erhält dabei die Massenmatrix MS_{ij} zur Schwerpunktbewegung:

$$T_s = \frac{1}{2} M \dot{z}_s^2 = \frac{1}{2} M \left(\sum_i Q_i \dot{q}_i \right) \left(\sum_j Q_j \dot{q}_j \right) = \frac{1}{2} \sum_{ij} MS_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j \quad MS_{ij} = M \cdot Q_i Q_j \quad (2.13)$$

Dabei ist $M = \sigma \cdot VOL_0 = \sigma \cdot V_0$ die Gesamtmasse. In dem zum Rechnen passend gewählten Koordinatensystem ergibt der Werner-Wheeler Formalismus die nicht schwerpunktkorrigierte Massenmatrix MK_{ij} . Wenn man von dieser Massenmatrix die Massenmatrix der Schwerpunktbewegung abzieht, erhält man die gesuchte schwerpunktkorrigierte Massenmatrix $MA_{ij} = MK_{ij} - MS_{ij}$.

Um sicher zu sein, daß diese Art der Schwerpunktkorrektur richtig ist, suchte ich noch nach einem anderen Weg der Herleitung. Die Werner-Wheeler Massen werden mit der Berechnung der kinetischen Energie durch Integration über das Geschwindigkeitsfeld erzeugt. Wenn man von der z -Komponente des Geschwindigkeitsfeldes die Schwerpunktschwindigkeit abzieht, müßten sich direkt die Schwerpunktkorrigierten Massen MA_{ij} ergeben:

$$\begin{aligned} v_z &\rightarrow v_z - \dot{z}_s = \sum_i A_i \dot{q}_i - \sum_i Q_i \dot{q}_i = \sum_i (A_i - Q_i) \cdot \dot{q}_i \\ T &= \sigma \pi \int_a^b \int_0^{P(z)} ((v_z - \dot{z}_s)^2 + v_\rho^2) \rho d\rho dz = \sum_{ij} \frac{\sigma \pi}{2} \int_a^b P^2 \left\{ (A_i - Q_i)(A_j - Q_j) + \frac{P^2}{2} C_i C_j \right\} dz \cdot \dot{q}_i \dot{q}_j \\ MA_{ij} &= \sigma \pi \int_a^b P^2 \left\{ A_i A_j + \frac{P^2}{2} C_i C_j \right\} dz - \sigma \left[Q_j \pi \int_a^b P^2 A_i dz + Q_i \pi \int_a^b P^2 A_j dz \right] + \sigma Q_i Q_j \cdot \pi \int_a^b P^2 dz \\ MA_{ij} &= MK_{ij} - \sigma \left[Q_j \cdot V_0 Q_i + Q_i \cdot V_0 Q_j \right] + \sigma Q_i Q_j \cdot V_0 = MK_{ij} - \sigma V_0 Q_i Q_j = MK_{ij} - MS_{ij} \quad (2.14) \end{aligned}$$

Das Einsetzen der Schwerpunktgeschwindigkeit führt zu der oben benutzten Subtraktion der Massenmatrizen für die schwerpunktkorrigierten Massen. Dabei wurden die Integrale über $P^2 A_i$ gleich $V_0 \cdot Q_i$ gesetzt. Zur Veranschaulichung davon betrachte man die allgemeine Definition vom Schwerpunkt und seiner Geschwindigkeit:

$$M \cdot \vec{r}_s = \sum_i m_i \cdot \vec{r}_i \quad M \cdot \dot{\vec{r}}_s = \sum_i m_i \cdot \dot{\vec{r}}_i = \sum_i m_i \cdot \vec{v}_i \quad (2.15)$$

Die Schwerpunktgeschwindigkeit ergibt sich als Summe der Massen mal ihren Geschwindigkeiten. Für unser Problem betrachten wir infinitesimale Massenscheiben dm deren z -Geschwindigkeit durch die A_i gegeben sind:

$$dm = \sigma \pi P^2(z) dz \quad v_z(z) = \sum_i A_i(z) \cdot \dot{q}_i \quad (2.16)$$

Die Schwerpunktgeschwindigkeit ergibt sich nun durch integrieren:

$$M \cdot \dot{z}_s = \int dm \cdot v_z = \int_a^b \sigma \pi P^2 dz \cdot \sum_i A_i \dot{q}_i = \sum_i \sigma \pi \int_a^b P^2 A_i dz \cdot \dot{q}_i \quad (2.17)$$

Mit der Definition der Q_i ergibt sich die oben benutzte Beziehung:

$$M \cdot \dot{z}_s = \sigma V_0 \sum_i Q_i \cdot \dot{q}_i \quad \rightarrow \quad \pi \int_a^b P^2 A_i dz = V_0 \cdot Q_i \quad (2.18)$$

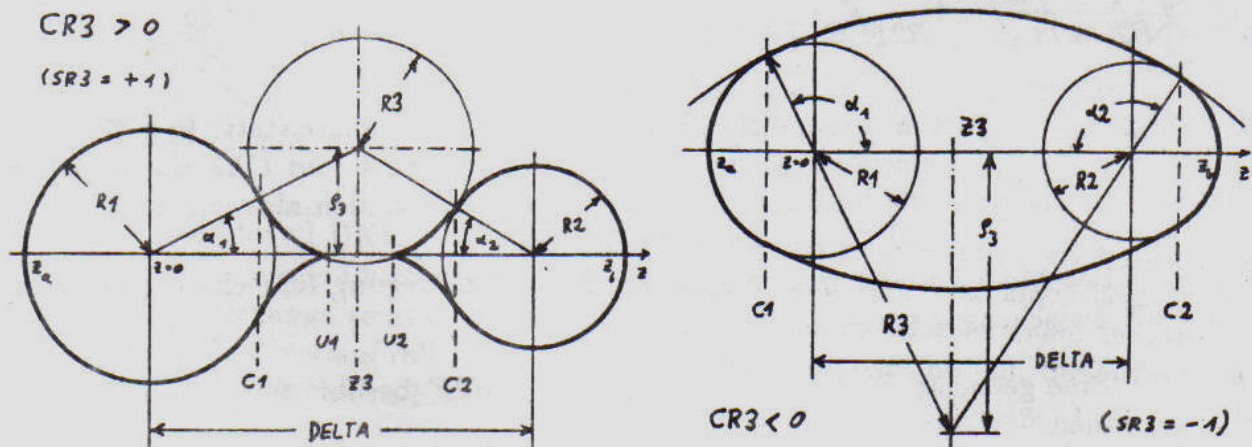
Im Program wird MK_{ij} und MA_{ij} (durch einsetzen der Q_i) berechnet. Damit ergeben sich die Schwerpunktmassen zu $MS_{ij} = MK_{ij} - MA_{ij}$. Zusätzlich wird auch die Schwerpunktmatrix $MS_{ij} = \sigma V_0 \cdot Q_i Q_j$ ausgegeben. Da beide Schwerpunktmatrizen gleich sein müssen, erwies sich die Ausgabe beider als ein mächtiger Fehlerindikator.

Kapitel 3

Die Geometrie des Dreikugelmodells

Der Spaltvorgang wird beim Dreikugelmodell durch eine Kernform beschrieben, welche von einem kugelförmigen Compoundkern in zwei kugelförmige Fragmente übergeht. Das Massen- bzw. Volumenverhältnis der Fragmente wird durch die verallgemeinerte Koordinate $ETA = \frac{A1-A2}{A1+A2}$ beschrieben. Der Zentrenabstand der Fragmente ist eine weitere verallgemeinerte Koordinate mit dem Namen *DELTA* (Für ein leichtes Verständnis vom Programmcode schreibe ich die jeweiligen Variablen mit ihren Fortrannamen).

Um eine "natürliche" Form bei kleinem Zentrenabstand *DELTA* zu erhalten wird ein Verbindungshals eingeführt, dessen Hüllkurve sich durch Abrollen von einer dritten Kugel auf den zwei Fragmentkugeln ergibt. Die Krümmung der dritten Kugel ist die dritte verallgemeinerte Koordinate des Dreikugelmodells und heißt $CR3 = \frac{SR3}{R3}$. Wie im folgenden Bild zu sehen ist, kann die Krümmung positiv oder negativ sein. Da es üblich und kürzer ist, werde ich den Verbindungshals nun im folgenden als "Neck" bezeichnen.



Wenn $CR3$ gleich Null ist, ergibt sich ein konusförmiger Neck. Da die Konusform lediglich der Grenzfall $CR3 \rightarrow 0$ ist, habe ich von einer separaten Behandlung im Programm Abstand genommen. Die Eingabe von $CR3 = 0$ bewirkt eine Berechnung mit $CR3 = 0.001$. Man kann durch noch kleinere $CR3$ die Konusform noch besser angenähert rechnen lassen. Das lohnt sich jedoch nicht, da sich die Resultate kaum ändern, die Rechengenauigkeit aber bald abnimmt. Das Vernachlässigen der explizit behandel-

ten Konusform ermöglicht es, das Programm kompakt und in der Struktur homogen zu gestalten. Würde man den leicht approximierbaren Konusfall explizit behandeln, wäre der numerische Aufwand um ein beträchtliches Maß größer und das Programm deutlich unübersichtlicher und länger. Übrigens lassen sich die Fragmente nur dann vollständig trennen, wenn die Krümmung $CR3$ größer als Null ist.

Bei positivem $CR3$ gibt es den Trennungspunkt $DELTA = DELZS$ (scission-point) bei dem die Neckkugel die z-Achse berührt und das Volumen geteilt wird. Für $DELTA \geq DELZS$ wird die Geometrie eindeutig durch die drei verallgemeinerten Koordinaten $ETA, DELTA, CR3$ festgelegt. Für $DELTA < DELZS$ hat man jedoch noch die Freiheit $R2$ in gewissen Schranken beliebig zu wählen. Man erhält dabei verschiedene Geometrietypen, welche insbesondere bei den Werner-Wheeler Massen signifikante Unterschiede zeigen. Im folgenden werde ich diese verschiedenen Geometrietypen diskutieren.

3.1 Der Geometrietyp TBM

TBM (Three-Ball-Model) ist die Kernform welche auch K. Depta [18] benutzt hat. Hierbei versucht man den Radius des emittierten Fragments $R2$ möglichst von Anfang an gleich dem finalen Radius $R2F$ des vollständig abgetrennten Fragments (ohne Neckspitzen) zu halten. Geleitet ist man dabei von dem Gedanken, das die neuen Radioaktivitäten dem Alphazerfall ähnlich sind und das emittierte Fragment von Anfang an als System mit spezifischen Stabilitätseigenschaften existiert.

Zur Orientierung merke man sich folgende Variablennamen und ihre Bedeutung :

$$\begin{aligned} R1 &= R1(DELTA) & R1F &= \left(\frac{3}{4\pi} V1F\right)^{1/3} & V1F &= VOL1F = \frac{VOL0}{2} (1 + ETA) \\ R2 &= R2(DELTA) & R2F &= \left(\frac{3}{4\pi} V2F\right)^{1/3} & V2F &= VOL2F = \frac{VOL0}{2} (1 - ETA) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Der Spaltvorgang findet im wesentlichen in der $DELTA$ -Koordinate statt. In der folgenden Diskussion der verschiedenen Geometrietypen werden ETA und $CR3$ als konstante Parameter betrachtet. Die betrachteten Bewegungsabläufe finden also nur in $DELTA$ statt.

Bei dem TBM-Modell findet man bei dieser $DELTA$ -Bewegung fünf charakteristische Punkte als Zwischenschritte :

DELZB : Eine gedachte Fragmentkugel mit Radius $R2F$ berührt den Compoundkern von innen.

DELZH : Die Neckkugel liegt direkt über dem hervortretenden Fragment. D.h. $Z3$ ist gleich $DELTA$. Das Kernvolumen rechts von $Z3$ ist die Hälfte von $V2F$.

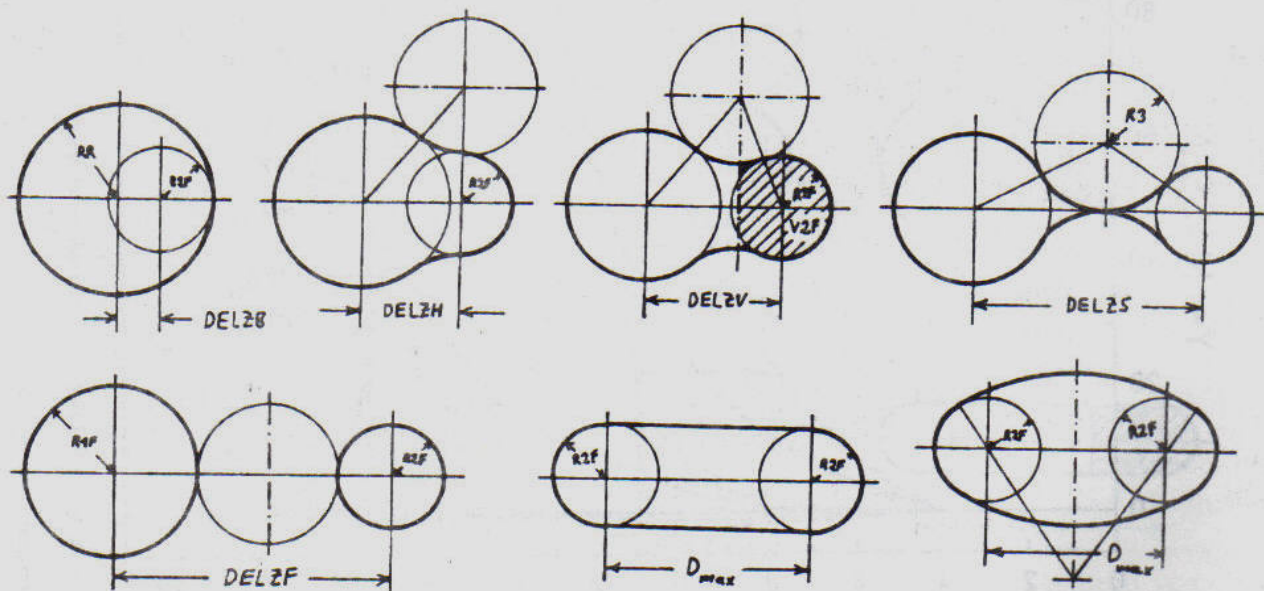
DELZV : Bis hierhin wurde der Radius $R2 = R2F$ der Fragmentkugel konstant gehalten. $R1$ wurde durch eine Gesamtvolumenerhaltung bestimmt. Nun hat das Volumen rechts von $Z3$ das volle Volumen $V2F$ erreicht. Ab nun wird das Volumen links und rechts von $Z3$ konstant gehalten. Dadurch wird nun $R2$ eine Funktion

von *DELTA*. Die hier stattfindende Änderung der mathematischen Geometriedefinition zeigt sich bei den beobachteten Sprungstellen der Wherner-Wheeler Massen.

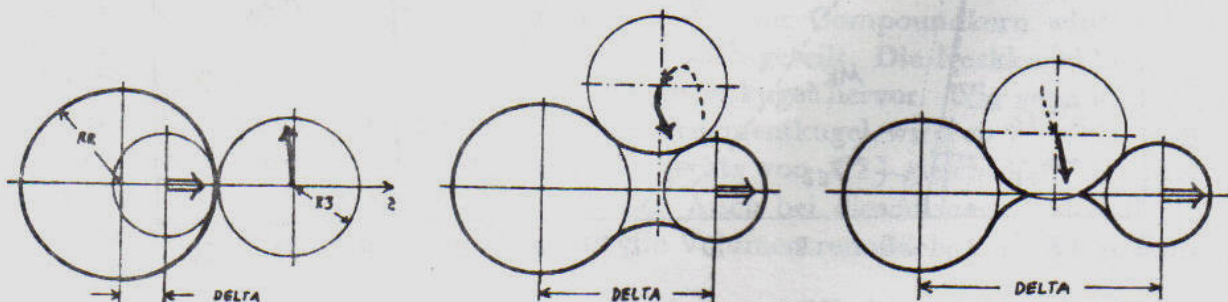
DELZS: Hier berührt die Neckkugel die z-Achse. Das Volumen wird in zwei Teile gespalten (scission point). Nun bewirkt die Neckkugel die Ausbildung von Neckspitzen welche den Fragmenten Tropfenform verleiht.

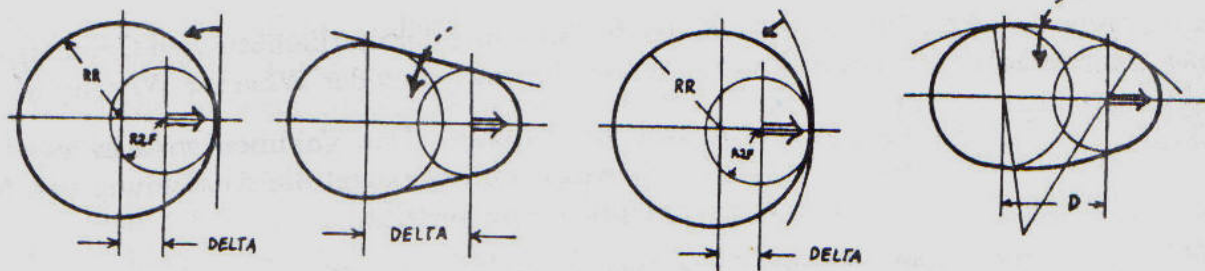
DELZF: Hier entspricht die lichte Weite zwischen den Fragmentkugeln gerade dem Durchmesser der Neckkugel. Jetzt sind die Fragmente zu glatten Kugeln geworden. Die Radien $R1$ und $R2$ sind nun eben die finalen Radien $R1F$ und $R2F$.

Das folgende Bild zeigt nun diese Bewegungsphasen. Beim Konusfall und bei negativer Neckkrümmung wird die Fragmentkugel mit konstantem $R2 = R2F$ solange aus dem Compoundkern hervor gezogen bis $R1$ gleich $R2F$ geworden ist. Dieses maximale $DELTA = D_{max}$ wird im Programm in *DELZV* usw. gespeichert.

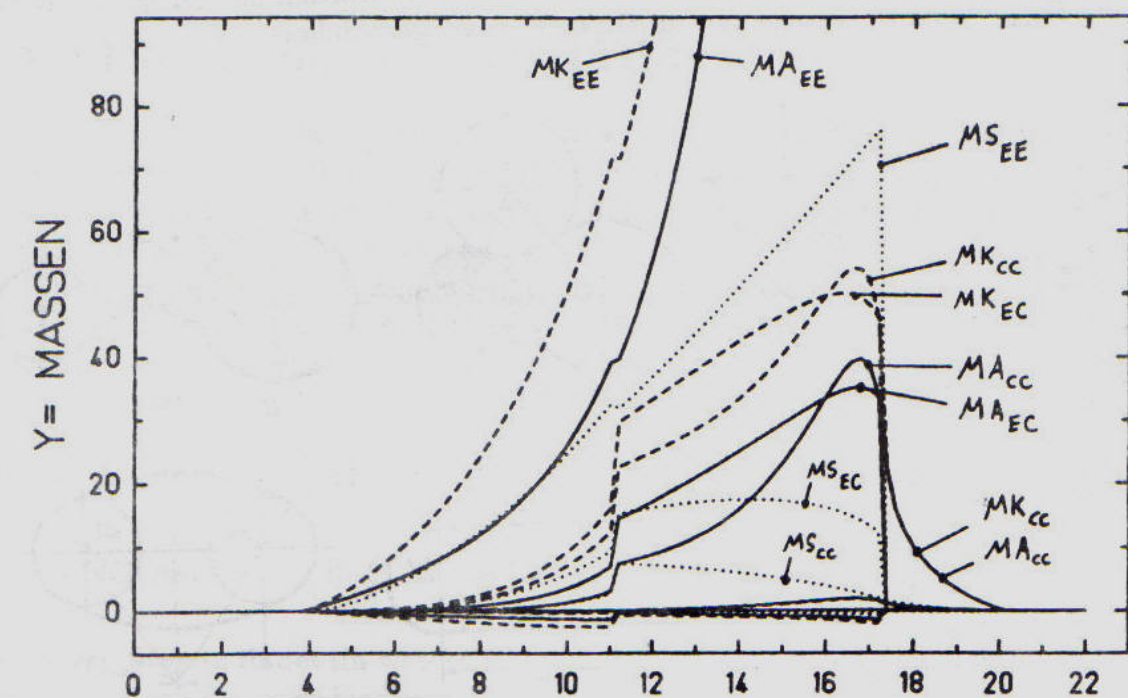


Um später das Modell DKM besser mit TBM vergleichen zu können gebe ich hier noch eine weitere graphische Illustration des Bewegungsablaufes: Die Neckkugel liegt zu Beginn des Spaltvorgangs zentral vor dem Austrittsort des zu emittierenden Fragments. Während dem Spaltverlauf rollt die Neckkugel um das Fragment herum. Sie bildet dann den Neck um schließlich den Kern zu "spalten".



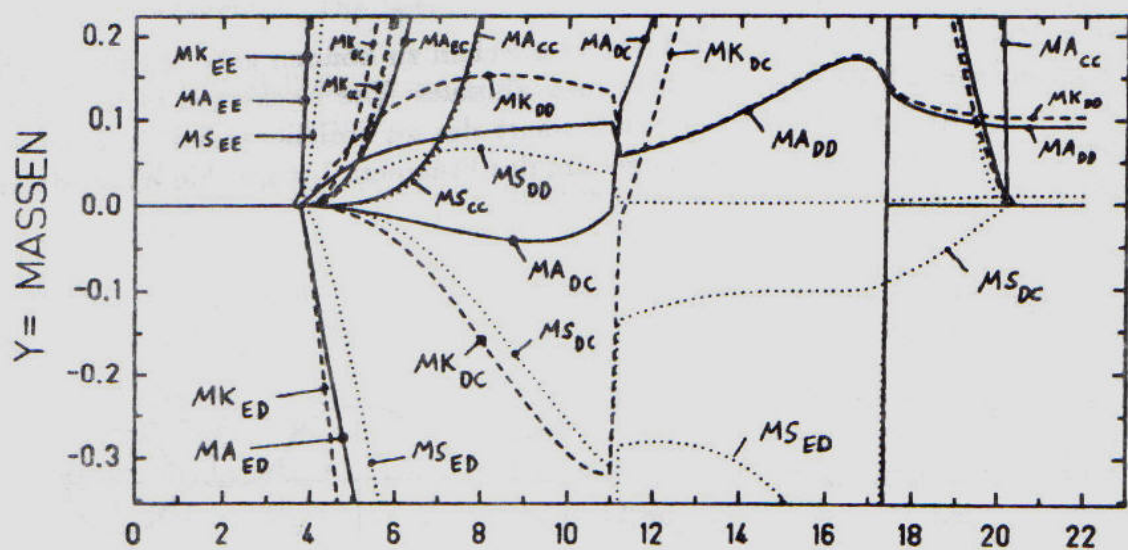


Das TBM-Modell ergibt, wie schon erwähnt Sprungstellen bei $DELZV$. Für die Spaltung $^{232}\text{U} \rightarrow ^{24}\text{Ne} + ^{208}\text{Pb}$ erhält man beispielsweise folgende Massen (Die Bedeutung von MK_{xx} , MS_{xx} und MA_{xx} wurde in Sektion 2.1 erklärt. Die Massen sind immer auf Gesamtmasse = 1 normiert.) :



Die MK_{CC} Masse wurde als $MK(3,3) = MA(3,3) + MS(1,3)$ fehlerhaft geseichnet.

Der Programmfehler ist inzwischen korrigiert.



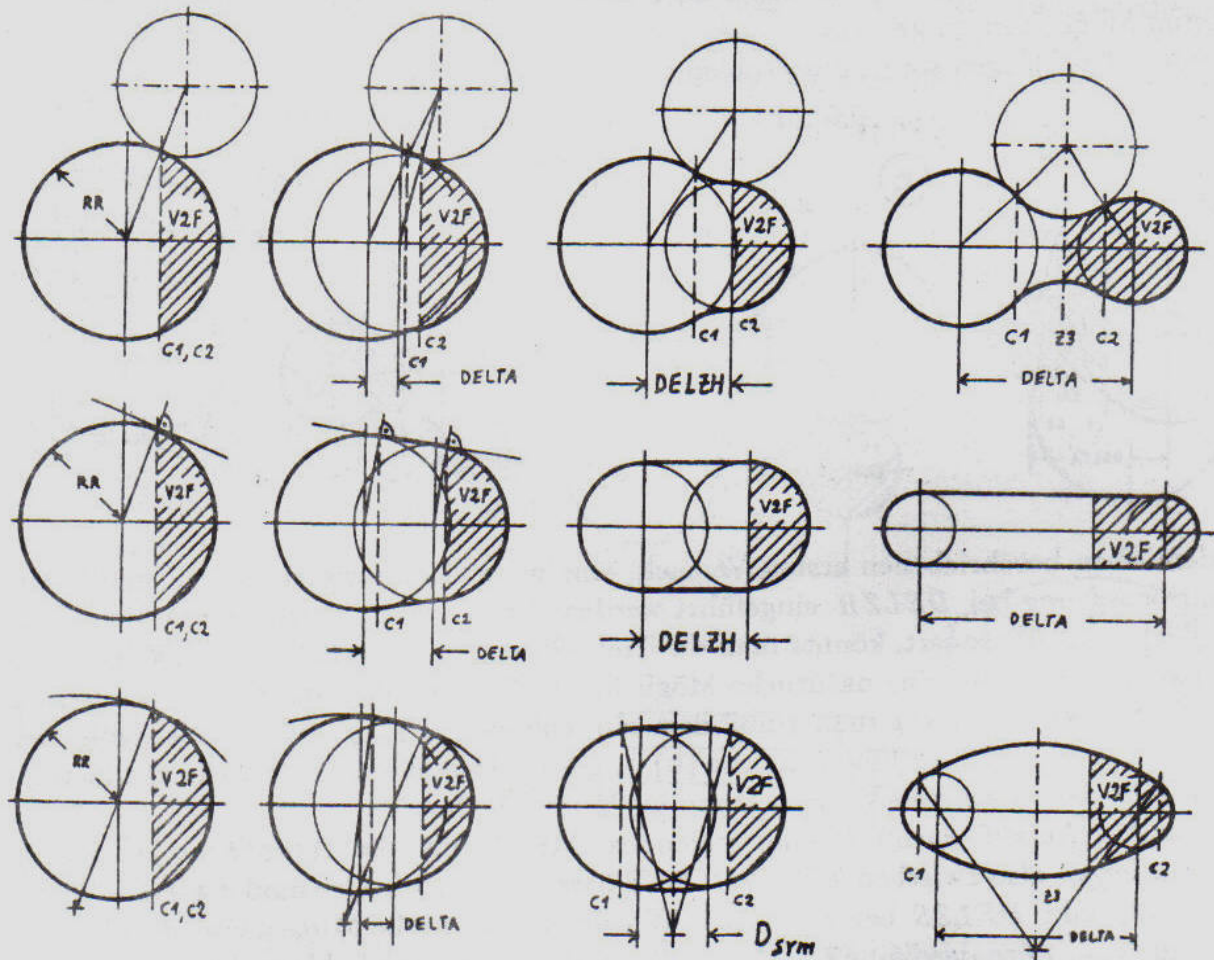
X= DELTA (ETA= 7.931E-01 CR3= +0.2000)

3.2 Versuche für eine bessere Geometrie

Das TBM-Modell liefert Potentialenergieflächen, welche keinen unmittelbaren Anlaß zur Kritik zeigen. Wenn man auch symmetrische Spaltung betrachtet, fallen jedoch die unsymmetrischen Kernformen auf (Wie beim "Neck" nennt man die Kernformen oft auch "Shapes"). Das Potential ist auch nicht symmetrisch in ETA . Negatives ETA ist von der Geometrie her sowieso nur teilweise möglich (Betrachte zu all dem die Bilder im Graphikanhang).

Beim Berechnen von Werner-Wheeler Massen fallen Sprungstellen bei $DELZV$ auf. Die Formasymmetrie liefert bei $ETA = 0$ deutlich falsche Massen. All diese Unzulänglichkeiten geben Anlaß zur Suche nach einer besseren Geometrie:

In dem folgenden Bild sind die Bewegungsabläufe des ersten neuen Modells gezeigt:

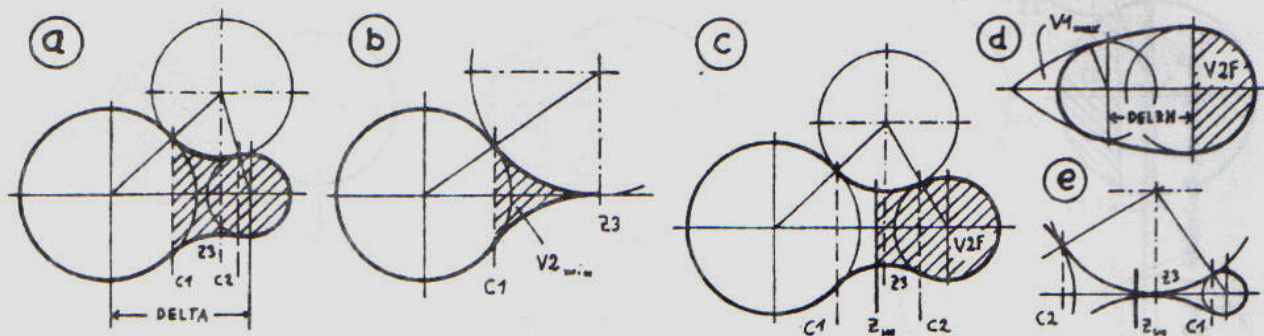


Der Spaltprozeß startet jetzt bei $DELTA = 0$. Der Compoundkern wird mit einer gedachten Ebene im Verhältnis der finalen Volumen geteilt. Die Neckkugel liegt an der Ebene. Beim Spaltvorgang tritt nun eine Fragmentkugel hervor. Wie gehabt bildet die Neckkugel einen Neck. Der Radius $R2$ der Fragmentkugel wird so gewählt, daß das Volumen rechts vom rechten Neckende (d.h. rechts von $C2$) gleich $V2F$ bleibt. $R1$ ergibt sich aus der Gesamtvolumenerhaltung. Auch bei diesem neuen Modell gibt es einen speziellen Punkt $DELZH$. Hier fällt die Volumentrennfläche mit $Z3$ zusammen.

Um ein volumenkorrektes Verhalten bei $DELZS$ zu bekommen muß dort Die Volumentrennfläche mit $Z3$ zusammen fallen. Daher liegt es nahe, bei $DELZH$ den Ort der Volumentrennfläche von $C2$ nach $Z3$ umzudefinieren. Bei positivem $CR3$ ist das neue $DELZH$ kleiner als bei TBM. Beim Konusfall ist es kleiner als das D_{max} von TBM. Um auch längere Konusformen zu ermöglichen wäre hier ein Definitionssprung zu gesamt volumenerhaltener Zylinderform nötig. Bei negativem $CR3$ hätte $DELZH$ die Form wie in Skizze (d) im Bild unten. Hierbei könnte für viele Situationen das Gesamtvolumen nicht erhalten werden. Die Kernform wäre auch recht seltsam. Um sinnvolle Resultate zu erhalten muß man einen Definitionssprung bei D_{sym} ähnlich wie beim Konusfall einführen.

Dieses neue Modell erfüllt immerhin die ETA -Symmetrie Forderung. Meine Hoffnung daß die Definitionssprünge kleinere Sprungstellen der Werner-Wheeler Massen bewirken, erwies sich leider als unbegründet. Daher habe ich dieses Modell verworfen und nach weiteren Möglichkeiten gesucht:

Die folgenden Skizzen sollen die Probleme dabei illustrieren.

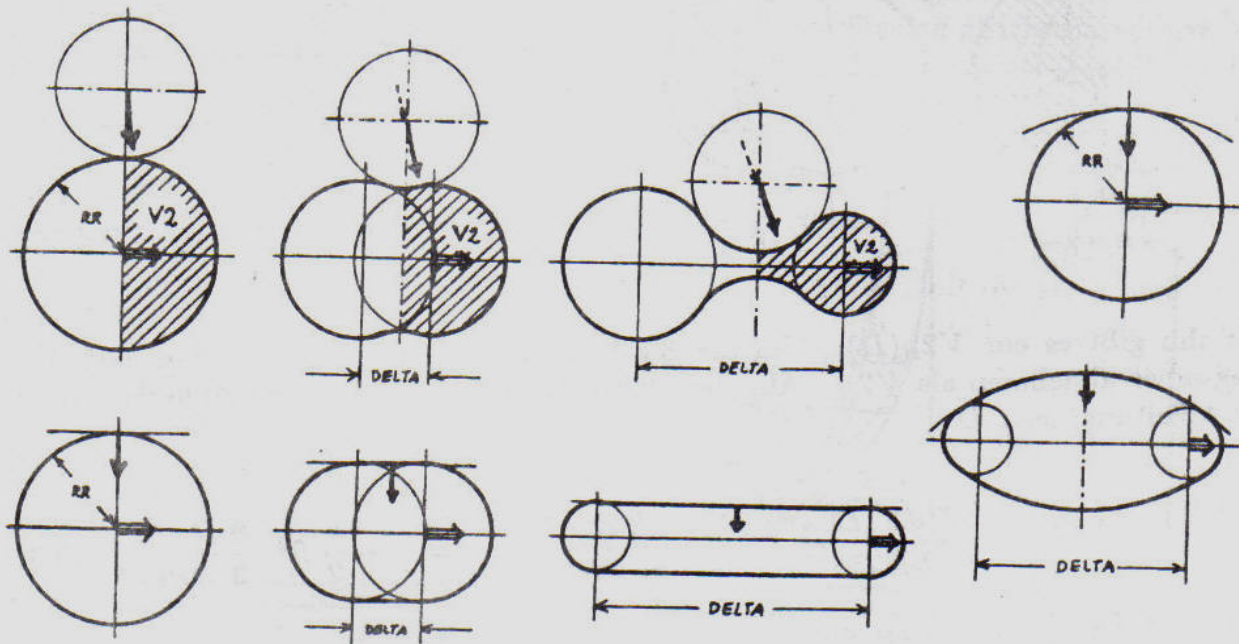


Bei dem oben beschriebenen ersten Versuch, eine neue Geometrie zu finden, mußte ein Definitionssprung bei $DELZH$ eingeführt werden. Um zu verhindern, daß die Volumentrennfläche $Z3$ überquert, könnte man die Trennfläche bei $C1$ lokalisieren (Skizze (a)). Hier hat man jedoch keine natürliche Möglichkeit $Z3$ zum Trennflächenort werden zu lassen. Weiterhin braucht man zumindest ein Volumen $V2_{min}$ um das Neckvolumen zwischen $C1$ und $Z3$ zu füllen (Skizze (b)). Dies verbietet starke Massenasymmetrie. All das läßt diesen zweiten Versuch schon im Keim scheitern.

Beim dritten Anlauf, dachte ich mir folgendes: Man könnte die Trennfläche ja auch in den Neck legen, also zwischen $C1$ und $C2$ (Skizze (c)). Auch hier muß die Trennfläche beim Spalt punkt $DELZS$ bei $Z3$ liegen. Würde man sie in die Mitte zwischen $C1$ und $C2$ legen (z_m), wäre das bei $ETA \neq 0$ nicht erfüllt (Skizze (e)). Man könnte nun noch versuchen andere Möglichkeiten zu finden, die Trennfläche so in den Neck zu legen, daß die Forderung am Spalt punkt erfüllt wird. Dieses wäre dann eine kompliziertere Funktion der Geometrie, welche ja gerade erst mit einem diffizilen Nullstellensuchprozess bestimmt werden muß. Auch die Berechnung von $DGNDX$ (siehe Anhang IIa) würde durch eine entsprechende $Z3$ -Funktion beträchtlich erschwert. In Anbetracht dieser Probleme gab ich auch diesen dritten Versuch auf. Es ist jedoch zu bemerken, das die Untauglichkeit dieses Ansatzes nicht wirklich bewiesen wurde.

3.3 DKM bzw. Erfolg beim vierten Versuch

(DKM = Drei-Kugel-Modell) Beim Modell TBM wurde der Fragmentradius R_2 möglichst von Anfang an gleich $R_2 F$ gesetzt. Dadurch ergab sich die Asymmetrie in ETA . Um diese Asymmetrie bei den neuen Modellen auszuräumen, versuchte ich die Volumen von Anfang an im finalen Verhältnis zu teilen und bekam je nach Lage der Trennfläche verschiedene Geometrien. Der Definitionssprung beim ersten neuen Modell produzierte wieder die unerwünschten Sprungstellen bei den Massen. Um diese Sprungstellen zu verhindern scheint es daher unumgänglich zu sein, die Geometrie vom Anfang bis zum Spalt punkt glatt in einem Stück zu definieren. Ganz allgemein gilt die Forderung, daß Z_3 zum Spalt punkt $DELZS$ hin, zur Trennfläche der finalen Volumen werden muß. Mein vierter Versuch war daher von dem Gedanken geleitet, daß Z_3 von Anfang an als Volumentrennfläche dient. Kurz vorm Spalt punkt liegt Z_3 auf jeden Fall zwischen C_1 und C_2 . Da jetzt die Forderung besteht, daß die Geometrie vom Anfang bis $DELZS$ die gleiche Definition haben soll, muß schon am Anfang Z_3 zwischen C_1 und C_2 liegen. Damit ergibt sich ein Bewegungsablauf für DKM wie im folgenden Bild gezeigt:

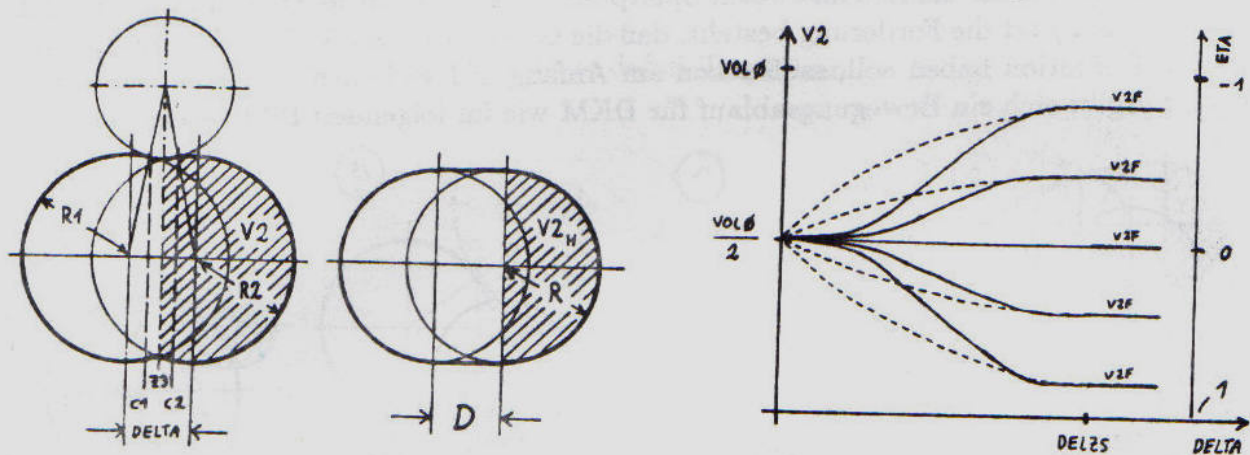


Der Spaltprozeß startet mit $DELTA = 0$ und $Z3 = 0$. Die Neckkugel liegt oben auf dem Compoundkern, dessen Volumen $VOL0$ von $Z3$ halbiert wird. $V2$ ist jetzt eine Funktion von $DELTA$, welche von $VOL0/2$ nach $V2F$ glatt übergehen muß. Um auch ein glattes Verhalten am Spalt punkt zu erreichen muß dort die $DELTA$ -Ableitung Null werden. Wie beim dritten Versuch muß die Volumentrennfläche immer im Neck liegen. Dort sollte der Trennflächenort aus der Geometrie, bei konstanten Volumina, ermittelt werden. Hier muß die Funktion von $V2$ so gewählt werden, daß $Z3$ immer zwischen $C1$ und $C2$ liegt. Durch diese Vorgehensweise wird insbesondere die Berechnung von $DGNDX$ handhabbar einfach gehalten.

Als Volumenfunktion bietet sich als einfachste Möglichkeit eine Parabel folgender Art an :

$$V2(DELTA) = \frac{VOL0}{2} \left(1 - \left\{ 1 - \frac{(DELTA - DELZS)^2}{DELZS^2} \right\} \cdot ETA \right) \quad (3.2)$$

Diese Funktion ist glatt und hat eine verschwindende Ableitung am Spaltpunkt. Um zu prüfen ob Z3 im Neck bleibt, könnte man diese Funktion im Programm testen. Man kann sich diese Arbeit jedoch mit folgender Abschätzung sparen: Zu Beginn der Spaltung muß V2 so langsam abnehmen, daß Z3 immer links von C2 bleibt. Für hinreichend kleines DELTA (im Bild unten D) wirkt jedes CR3 wie der Konusfall.



Für ihn gibt es ein $V_{2H}(D)$. Um die gegebene Z3-Bedingung zu erfüllen muß V2 langsamer abnehmen als V_{2H} . Aus der obigen Definition von V2 erhalten wir direkt die Ableitung nach D :

$$\left. \frac{dV_2}{dD} \right|_{D=0} = - \frac{VOL0 \cdot ETA}{DELZS} = - \frac{\frac{4\pi}{3} R^3 \cdot ETA}{DELZS} = - \frac{\pi}{2} R^2 \cdot \frac{8}{3} \frac{R \cdot ETA}{DELZS} \quad (3.3)$$

Für die Ableitung von V_{2H} gilt :

$$V_{2H} = \frac{2\pi}{3} R^3 \quad \frac{dV_{2H}}{dD} = \frac{dV_{2H}}{dR} \cdot \frac{dR}{dD} = 2\pi R^2 \cdot \frac{dR}{dD}$$

Die Ableitung $\frac{dR}{dD}$ läßt sich mit dem Satz über implizite Funktionen und dem Gesamtvolumen $VOL0(R(D), D) = \pi R^2 (\frac{4}{3} R + D)$ berechnen :

$$\frac{dR}{dD} = - \left(\frac{\partial VOL0}{\partial R} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial VOL0}{\partial D} = - \frac{1}{4\pi R^2 + 2\pi R D} \cdot \pi R^2 = - \frac{R}{4R + 2D}$$

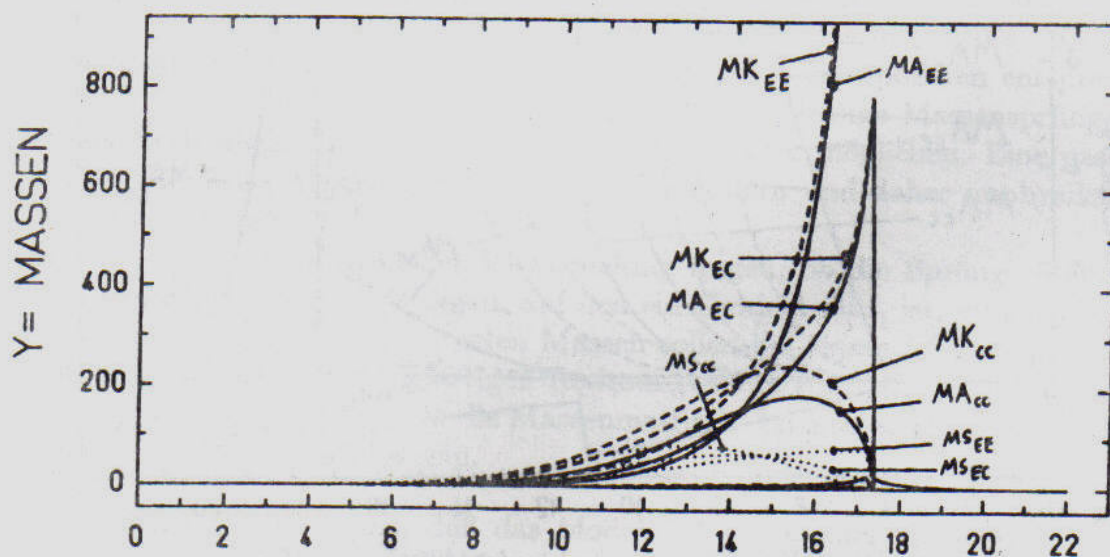
$$\left. \frac{dR}{dD} \right|_{D=0} = -\frac{1}{4} \rightarrow \left. \frac{dV_{2H}}{dD} \right|_{D=0} = 2\pi R^2 \cdot \left(-\frac{1}{4}\right) = -\frac{\pi}{2} R^2 \quad (3.4)$$

Mit diesen Resultaten führt die Forderung daß V_2 langsamer abnehmen soll als V_{2H} , direkt zur Bedingung $DELZS > \frac{8}{3} \cdot R \cdot ETA$. Da diese Bedingung nicht immer erfüllt wird, ist dieser Parabelansatz unbrauchbar.

Als nächstes versuchte ich es mit einer kosinusartigen Funktion für V_2 . Sie ist in dem Graphen des vorigen Bildes als durchgezogene Linien skizziert (Die gestrichelten Linien gehören zu dem verworfenen Parabelansatz) und in der folgenden Formel gegeben :

$$V_2 = \frac{VOL_0}{2} \left(1 - \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi \cdot DELTA}{DELZS}\right) \right) \right\} \cdot ETA \right) \quad (3.5)$$

Die $DELTA$ -Ableitung dieser Funktion ist, aufgrund des auftretenden Sinustermes, im Ursprung und am Spaltpunkt gleich Null (siehe Anhang IIa). Die obige Abschätzung wird demnach erfüllt. Also programmierte ich dieses neue Modell und gab ihm den Namen DKM. Es zeigte sich daß Z_3 immer schön im Neck bleibt und die ETA -Symmetrie Bedingung problemlos erfüllt wird. Auch die Massen sind nun glatte Funktionen ohne Sprungstellen. Das folgende Bild zeigt diese DKM-Massen für den gleichen Spaltprozess der bei den TBM-Bildern gezeigt wurde:

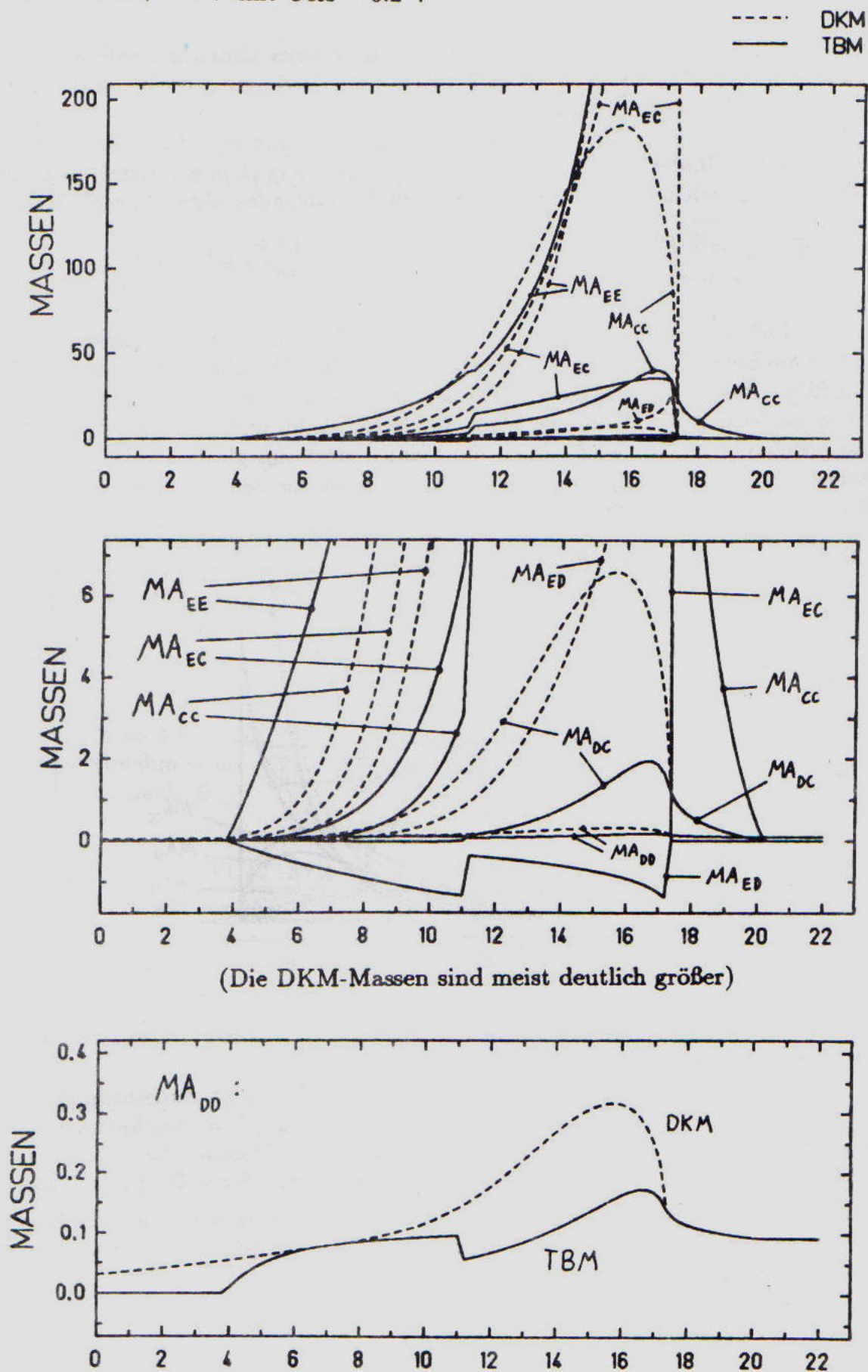


Sie sind zum Teil etwa fünf mal größer als beim Modell TBM. Das liegt daran, daß DKM mehr Masse zum Fließen bringt.

Ich schaute mir dann auch die Potentialenergieflächen von DKM an und entdeckte ein seltsames Tal bei $CR_3 = 0$. Für größere $DELTA$ geht es jedoch in den ansteigenden Potentialrücken über. Es gibt also keinen "Schleichweg" um die Potentialbarriere herum. Daher kann man das Tal als unbedeutend und harmlos ansehen. (Siehe Graphikanhang).

Weiterhin ist nun der Radius R_2 am Anfang gleich dem Radius des Compoundkerns (RR). Daher wird die Vorstellung eines Fragmentteilchens ähnlich dem Alphateilchen, nicht mehr berücksichtigt.

Vergleich der schwerpunktkorrigierten Massen von TBM und DKM für die Reaktion $^{232}\text{U} \rightarrow ^{24}\text{Ne} + ^{208}\text{Pb}$ mit $CR3 = 0.2$:



Die beträchtlich größeren Massen von DKM schienen mir im ersten Augenblick unwahrscheinlich, wegen dem Gedanken, daß die Natur unnötigen Aufwand bei dem Massenfluß vermeidet. Untersuchungen von J.R. Nix [7] führten jedoch zu dem Resultat, das der annähernd rotationslose WW-Fluß im Vergleich mit dem Experiment auf zu kleine Massen führt. Um größere Massen zu erhalten, forderte er daher, daß der Massenfluß entweder rotationsbehaftet oder viskos sein muß. Nun erhalten wir das interessante Resultat, daß geringe Änderungen der geometrischen Parametrisierung auch zu erheblichen Massenunterschieden führen können.

3.4 Gibt es noch andere Möglichkeiten ?

Das alte TBM Modell liefert Potentialenergieflächen ohne das seltsame Tal von DKM. Die Vorstellung des vorgeformten Fragments wird berücksichtigt. Schließlich hat es die kleineren Massen. Da mit dem Drei-Kugel Modell insbesondere stark asymmetrische Spaltung untersucht werden soll, ist das Symmetrieproblem von TBM ansich nur ein kleinerer Schönheitsfehler. All dieses drängt eigentlich danach, daß man einfach die Sprungstellen von TBM etwas ausglättet. Das würde bedeuten, daß man den Definitionssprung bei *DELZV* irgendwie glatt interpoliert. Nach all den gemachten Untersuchungen scheint eine entsprechende Neudefinition der Geometrie jedoch ziemlich aussichtslos.

Das Drei-Kugel Modell ist ein Modell, welches die Natur nur approximieren kann. Daher kann man die Massen auch nicht als prozentgenaue Realitäten ansehen. Es wäre daher völlig legal, die berechneten Massen durch mathematisches Interpolieren entsprechend zu "schönen". Ich versuchte es und stellte dabei fest, daß einige Massensprünge und die jeweiligen Steigungen eine sinnvolle Interpolation kaum ermöglichen. Eine passende Interpolation würde die Massenkurven erheblich verändern und daher unphysikalische Information produzieren.

Letztlich kann man sich noch in der Verzweiflung fragen, ob die Sprünge überhaupt so schlimm sind. Ein rollender Waggon, auf den ein Gewicht fällt, ist auch ein System mit Massensprungstelle. Die berechneten Massen sollen bei einem Pfadintegralprojekt von Herrn H. Klein und bei WKB-artigen Rechnungen von Herrn R. Herrman benutzt werden. Bei diesen Projekten taucht die Massenmatrix in Integralen auf. Daher dürften die Sprungstellen an sich harmlos sein.

Allgemein ist noch zu bemerken, daß das Modell DKM für eher symmetrische Spaltung geeignet ist und das Modell TBM insbesondere zur Beschreibung der stark asymmetrischen Spaltung sinnvoll ist.

Kapitel 4

Die potentielle Energie

Zur einfachen Berechnung der Kernbindungsenergie kann man ein Tröpfchenmodell wie die Bethe-Weizsäcker-Formel verwenden. Ein solches makroskopisches Modell liefert gute Durchschnittswerte. Um die Eigenschaften der einzelnen Nuklide zu erhalten muß man jedoch erheblich aufwendigere mikroskopische Rechnungen durchführen (quantenmechanische Schalenkorrekturen).

In meinem Programm ist ein einfaches "LDM" und ein verfeinertes "YPE" Tröpfchenmodell implementiert. Diese Kernpotentialmodelle wurden auch schon von K. Depta programmiert [18]. Dieses Programm war jedoch für eine Erweiterung ungeeignet und daher schrieb ich auch den Potentialteil komplett neu. Ich benutzte die gleichen Massenformeln mit gleichen Konstanten, wodurch sich eine gute Testmöglichkeit ergab.

4.1 Das verfeinerte Tröpfchenmodell

Bei der klassischen Bethe-Weizsäcker-Formel wird die Energieänderung bei Verformung nur durch die Änderung der Oberflächen- und Coulombenergie berücksichtigt. Bei dem folgenden verfeinerten Modell wird der Oberflächenterm durch das Yukawa-plus-exponential Potential ersetzt (siehe Anhang Ib). Weiterhin wird die Coulombenergie mit einer Randunschärfenkorrektur erweitert (siehe Anhang Ia). Schließlich kommen noch einige kleine Korrekturterme hinzu. Diese Massenformel wurde von P. Möller und J. R. Nix in Nuclear Physics [19] veröffentlicht und in allen Termen ausführlich diskutiert.

Sie hat folgendes Aussehen:

$$\begin{aligned}
 E(Z, N, Form) = & M_H \cdot Z + M_n \cdot N & M_H = 7.289034 \text{ MeV} & \text{Massenüberschuß} \\
 & & M_n = 8.071431 \text{ MeV} & \\
 - a_v (1 - \kappa_v \cdot I^2) \cdot A & & a_v = 16.0053 \text{ MeV} & \kappa_v = 1.959 \text{ Volumenenergie} \\
 + \frac{a_s (1 - \kappa_s \cdot I^2)}{8 \pi^2 r_0^2 a_y^3} \int_V \int_V \frac{d^3 r_1 d^3 r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \left(2 - \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a_y} \right) e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a_y}} & & a_s = 21.14 \text{ MeV} & \text{verallgemein.} \\
 & & \kappa_s = 2.4 & \text{Yukawa-plus-} \\
 & & a_y = 0.68 \text{ fm} & \text{exponential} \\
 & & r_0 = 1.16 \text{ fm} & \text{Energie} \\
 + \frac{1}{2} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} R^3} \right)^2 \int_V \int_V \frac{d^3 r_1 d^3 r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} & & \text{scharfe Coulombenergie} & \\
 & & R \text{ Radius des Compound Kern} &
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{1}{2} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} R^3} \right)^2 \int_V \int_V \frac{d^3 r_1 d^3 r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \left(1 + \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a_d} \right) e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a_d}} & (a_d = 0.7000357 \text{ fm}) \\
 & & \text{Oberflächendiffusitäts} \\
 & & \text{Korrektur} \\
 & - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{3/2} \cdot \frac{e^2 Z^{4/3}}{R} & \text{Austausch-Coulombenergie} \\
 & + W \cdot |I| & I = \frac{N-Z}{A} \quad W = 34 \text{ MeV} \quad \text{Wignerenergie} \\
 & - \frac{r_p^2 e^2}{8} \left[\frac{145}{48} - \frac{327}{2880} (k_f \cdot r_p)^2 + \frac{1527}{1209600} (k_f \cdot r_p)^4 \right] \cdot \frac{Z^2}{R^3} & k_f = \left(\frac{9\pi Z}{4} \right)^{1/3} \cdot \frac{1}{R} \quad r_p = 0.8 \text{ fm} \\
 & & \text{Protonen Formfaktor} \\
 & + c_0 \cdot A^0 & c_0 = 6.4 \text{ MeV} \quad A^0\text{-Energie} \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

Der Massenüberschuß-Beitrag ist keine physikalische Bindungsenergie sondern lediglich eine Normierung auf C^{12} als Nullpunkt. Diese Normierung ist nicht immer sinnvoll. Sie hat auch keinen Einfluß auf relative Bindungsenergien wie die Spaltbarriere.

4.2 Die Rechnungen zur scharfen Coulombenergie

Die formabhängigen sechsfachen Volumenintegrale werden nicht direkt wie in der Massenformel angegeben integriert. Zum Einen lassen sie sich zu numerisch günstigeren zweifachen bzw. dreifachen Integralen umformen. Zum Anderen soll die Ladungsverteilung der Spaltprodukte beliebig sein. Das Coulombintegral wird zu folgendem zweifachen Integral umgeformt (siehe Anhang Id) :

$$E_c = \frac{1}{2} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} R^3} \right)^2 \int_V \int_V \frac{d^3 r_1 d^3 r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{2\pi}{3} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} R^3} \right)^2 \int_{z_a}^{z_b} \int_{z_a}^{z_b} FC(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \quad (4.2)$$

Für den Kugelfall läßt sich das Integral explizit lösen. Man erhält dann :

$$E_c = E_{COU0} = \frac{3(Ze)^2}{5R} = COULKO \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} \quad COULKO = \frac{3e^2}{5r_0} = 0.744815 \quad (4.3)$$

Das doppelte Integral über die z -Achse wird in drei Teile zerlegt. Mit dieser Zerlegung erhält man für $DELTA > DELZF$ explizit die jeweilige "Selbstenergie" der Fragmente und einen Wechselwirkungsterm. Außerdem kann man mit dieser Zerlegung die gewünschte Freiheit in der Ladungsasymmetrie während des ganzen Spaltablaufes erreichen.

$$\begin{aligned}
 BC11 &= VFAKC \int_{z_a}^{z_3} \int_{z_a}^{z_3} FC(z_1, z_2) dz_1 dz_2 & BC12 &= VFAKC \cdot 2 \int_{z_a}^{z_3} \int_{z_3}^{z_b} FC(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \\
 BC22 &= VFAKC \int_{z_3}^{z_b} \int_{z_3}^{z_b} FC(z_1, z_2) dz_1 dz_2 & VFAKC &= \frac{5}{8\pi R^5}
 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Die Funktion $FC(z_1, z_2)$ wird in Anhang Id vollständig hergeleitet. Sie sieht folgendermaßen aus :

$$\begin{aligned}
 FC(z_1, z_2) &= \left\{ P_1 P_2 \frac{K - 2D}{3} \left(2(P_1^2 + P_2^2) - (z_2 - z_1)^2 + \frac{3}{2}(z_2 - z_1) \left(\frac{dP_1^2}{dz_1} - \frac{dP_2^2}{dz_2} \right) \right) \right. \\
 &\quad \left. + K \cdot \left(\frac{P_1^2 P_2^2}{3} + \left[P_1^2 + \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dP_1^2}{dz_1} \right] \cdot \left[P_2^2 - \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dP_2^2}{dz_2} \right] \right) \right\} \cdot \frac{1}{a_\rho} \\
 a_\rho &= \sqrt{(P_1 + P_2)^2 + (z_2 - z_1)^2} & FC(z, z) &= \frac{4}{3} P^3(z)
 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die Ausdrücke K und D ergeben sich aus den vollständigen elliptischen Integralen :

$$\begin{aligned}
 K(k^2) &= \int_0^{\pi/2} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2(\alpha)}} & k^2 &= \frac{4 P_1 P_2}{a_\rho^2} \\
 D &= \frac{K - E}{k^2} & E(k^2) &= \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2(\alpha)} d\alpha
 \end{aligned}$$

Aufgrund der speziellen Wahl des Vorfaktors $VFAKC$ kann man mit den relativen Ladungsdichten ρ_i/ρ_0 und der Coulombenergie des kugelförmigen Compound Kern $ECOU0$ die sich ergebende Coulombenergie folgendermaßen erhalten.

$$E_c = ECOU = ECOU0 \cdot \left(\frac{\rho_1^2}{\rho_0^2} BC11 + \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_0^2} BC12 + \frac{\rho_2^2}{\rho_0^2} BC22 \right) \quad (4.6)$$

Diese Darstellung hat den zusätzlichen Vorteil, daß sie problemlos auch mit empirisch gefitteten Coulombenergiekonstanten verwendet werden kann. Diese Konstanten gehen lediglich in den Kugelausdruck $ECOU0$ ein. Bei dem einfachen Tröpfchenmodell LDM wird davon Gebrauch gemacht.

4.3 Coulombkorrektur der diffusen Oberfläche

In Anhang Ia wird gezeigt, wie man eine Ladungsverteilung mit diffuser Oberfläche durch Faltung mit einer Yukawa Funktion erreichen kann. Dabei entsteht lediglich ein additiver Korrekturterm zur Coulombenergie der homogenen und scharf begrenzten Ladungsverteilung. Dieser Korrekturterm ist durch folgendes Integral gegeben :

$$\Delta E_c = -\frac{1}{2} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} R^3} \right)^2 \iiint_V \frac{d^3 r_1 d^3 r_2}{r_{12}} \left(1 + \frac{r_{12}}{2a_d} \right) e^{-\frac{r_{12}}{a_d}} = -\pi a_d \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} R^3} \right)^2 \int_{z_a}^{z_b} \int_{z_a}^{z_b} FD(z_1, z_2) dz_1 dz_2$$

$$r_{12} = |\vec{r}_{12}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{P_1^2 + P_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2 P_1 P_2 \cos \varphi} \quad (4.7)$$

Die obige Umformung des Volumenintegrals zu einem z -Achsen Integral ist eine Spezialisierung der allgemeinen Umformung von Volumenintegralen zu Oberflächenintegralen. Der Formalismus dazu wird in Anhang Ic beschrieben. Die allgemeine Form der oberflächen transformierten Coulombkorrektur ergibt sich zu :

$$\Delta E_c = \frac{a_d}{2} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} R^3} \right)^2 \oint_S \oint_S \frac{[d\vec{S}_1 \cdot \vec{r}_{12}][d\vec{S}_2 \cdot \vec{r}_{12}]}{r_{12}^4} \left\{ 2a_d r_{12} - 5a_d^2 + (5a_d^2 + 3a_d r_{12} + \frac{1}{2} r_{12}^2) e^{-\frac{r_{12}}{a_d}} \right\} \quad (4.8)$$

Für den zylindersymmetrischen Fall ergibt sich die Funktion $FD(z_1, z_2)$ zu :

$$FD(z_1, z_2) = - \int_0^{2\pi} \frac{[\vec{S}_1 \cdot \vec{r}_{12}][\vec{S}_2 \cdot \vec{r}_{12}]}{r_{12}^4} \left\{ 2a_d r_{12} - 5a_d^2 + (5a_d^2 + 3a_d r_{12} + \frac{1}{2} r_{12}^2) e^{-\frac{r_{12}}{a_d}} \right\} d\varphi$$

$$[\vec{S}_1 \cdot \vec{r}_{12}][\vec{S}_2 \cdot \vec{r}_{12}] = - \left[P_1^2 + \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dP_1^2}{dz_1} - P_1 P_2 \cos \varphi \right] \left[P_2^2 - \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dP_2^2}{dz_2} - P_1 P_2 \cos \varphi \right] \quad (4.9)$$

Wenn z_1 gleich z_2 ist, erhält man den Diagonalterm von $FD(z_1, z_2)$:

$$FD(z, z) = \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} \left\{ 2a_d R_{12} - 5a_d^2 + (5a_d^2 + 3a_d R_{12} + \frac{1}{2} R_{12}^2) e^{-\frac{R_{12}}{a_d}} \right\} d\varphi$$

$$R_{12} = |\vec{r}_1(z) - \vec{r}_2(z)| = P(z) \cdot 2 \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \quad (4.10)$$

Fuer eine Kugel mit dem Radius R läßt sich der Integralausdruck explizit lösen und wir erhalten die Energiekorrektur für kugelförmige Ladungsverteilung mit unscharfen Rand :

$$DCO0 = 1 - \frac{15}{8} \left(\frac{a_d}{R} \right) + \frac{21}{8} \left(\frac{a_d}{R} \right)^2 - \frac{3}{4} \left[1 + \frac{9}{2} \left(\frac{a_d}{R} \right) + 7 \left(\frac{a_d}{R} \right)^2 + \frac{7}{2} \left(\frac{a_d}{R} \right)^3 \right] e^{-\frac{2R}{a_d}}$$

$$\Delta E_c = EDCO0 = - \frac{3 a_d^2 (Ze)^2}{R^3} \cdot DCO0 \quad (4.11)$$

Wie schon bei der Coulombenergie wird das doppelte Integral über die z -Achse in drei Teile zerlegt :

$$\begin{aligned}
 BD11 &= VFAKD \int_{z_a}^{z_3} \int_{z_a}^{z_3} FD(z_1, z_2) dz_1 dz_2 & BD12 &= VFAKD \cdot 2 \int_{z_a}^{z_3} \int_{z_3}^{z_b} FD(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \\
 BD22 &= VFAKD \int_{z_3}^{z_b} \int_{z_3}^{z_b} FD(z_1, z_2) dz_1 dz_2 & VFAKD &= \frac{3}{16\pi R^3 a_d \cdot DCOO} \quad (4.12)
 \end{aligned}$$

Schließlich erhalten wir aus diesen Termen, den relativen Ladungsdichten und der Korrekturenergie des kugelförmigen Compound Kern einen allgemein gültigen Ausdruck für die Coulombkorrektur :

$$\Delta E_c = EDCO = EDCO0 \cdot \left(\frac{\rho_1^2}{\rho_0^2} BD11 + \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_0^2} BD12 + \frac{\rho_2^2}{\rho_0^2} BD22 \right) \quad (4.13)$$

Die Darstellung der Energien mit Hilfe der $Bx11$, $Bx12$, $Bx22$ ermöglicht ein leichtes und schnelles Berechnen beliebiger Ladungsasymmetrien. Man kann die drei rechenzeitintensiven $Bx..$ auch gut auf Magnetplatte abspeichern. Aus diesen abgespeicherten drei Größen lassen sich die Energien dann schnell rekonstruieren.

4.4 Das Yukawa-plus-exponential Potential

Im Anhang Ib wird das Yukawa-plus-exponential Potential mathematisch hergeleitet und physikalisch begründet. Es ist eine Art bessere Oberflächenenergie. Hier wird nun der realisierte Weg für die numerische Berechnung gezeigt. Er ist völlig analog zur Rechnung der Unschärfenkorrektur von der Coulombenergie. Entsprechend werden die Größen r_{12} , R_{12} und $[\vec{S}_1 \cdot \vec{r}_{12}][\vec{S}_2 \cdot \vec{r}_{12}]$ nicht noch einmal angegeben.

$$E_y = \frac{c_s}{8\pi^2 r_0^2 a_y^3} \int_V \int_V \frac{d^3 r_1 d^3 r_2}{r_{12}} \left(2 - \frac{r_{12}}{2a_y} \right) e^{-\frac{r_{12}}{a_y}} = \frac{c_s}{4\pi r_0^2 a_y^2} \int_{z_a}^{z_b} \int_{z_a}^{z_b} FY(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \quad (4.14)$$

Oben wurde wieder der spezialisierte Fall angegeben. Die allgemeine Form der oberflächen transformierten Yukawa-plus-exponential Funktion ist :

$$E_y = -\frac{c_s}{8\pi^2 r_0^2 a_y^2} \oint_S \oint_S \frac{[d\vec{S}_1 \cdot \vec{r}_{12}][d\vec{S}_2 \cdot \vec{r}_{12}]}{r_{12}^4} \left\{ 2a_y^2 - (2a_y^2 + 2a_y r_{12} + r_{12}^2) e^{-\frac{r_{12}}{a_y}} \right\} \quad (4.15)$$

Für den zylindersymmetrischen Fall ergibt sich die Funktion $FY(z_1, z_2)$ zu :

$$FY(z_1, z_2) = -\int_0^{2\pi} \frac{[\vec{S}_1 \cdot \vec{r}_{12}][\vec{S}_2 \cdot \vec{r}_{12}]}{r_{12}^4} \left\{ 2a_y^2 - (2a_y^2 + 2a_y r_{12} + r_{12}^2) e^{-\frac{r_{12}}{a_y}} \right\} d\varphi \quad (4.16)$$

Wenn z_1 gleich z_2 ist, erhält man den Diagonalterm von $FY(z_1, z_2)$:

$$FY(z, z) = \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} \left\{ 2a_y^2 - (2a_y^2 + 2a_y R_{12} + R_{12}^2) e^{-\frac{R_{12}}{a_y}} \right\} d\varphi \quad (4.17)$$

Für eine Kugel mit dem Radius R läßt sich der Integralausdruck explizit lösen und wir erhalten die Yukawa-plus-exponential Energie für eine Kugel :

$$SUR0 = 1 - 3 \left(\frac{a_y}{R} \right)^2 + \left(\frac{R}{a_y} + 1 \right) \cdot \left[2 + 3 \left(\frac{a_y}{R} \right) + 3 \left(\frac{a_y}{R} \right)^2 \right] e^{-\frac{2R}{a_y}}$$

$$E_y = ESUR0 = c_s \cdot A^{2/3} \cdot SUR0 \quad c_s = CSN0 = a_s (1 - \kappa_s \cdot I_0^2) \quad (4.18)$$

Um einen stetigen Übergang der ladungsasymmetrie abhängigen Oberflächenkonstanten c_s vom Compound Kern zu den Fragmenten zu erreichen wird das doppelte Integral über die z -Achse auch hier in drei Teile zerlegt :

$$BY11 = VFAKY \int_{z_a}^{z_3} \int_{z_a}^{z_3} FY(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \quad BY12 = VFAKY \cdot 2 \int_{z_a}^{z_3} \int_{z_3}^{z_b} FY(z_1, z_2) dz_1 dz_2$$

$$BY22 = VFAKY \int_{z_3}^{z_b} \int_{z_3}^{z_b} FY(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \quad VFAKY = \frac{1}{4\pi R^2 a_y^2 \cdot SUR0} \quad (4.19)$$

Nun erhalten wir wie gehabt den allgemeinen Ausdruck für die Yukawa-plus-exponential Energie. Sie kann nun auch für beliebige Oberflächenkonstanten schnell aus den drei Größen $BY..$ gebildet werden :

$$E_y = ESUR = ESUR0 \cdot (CS11 \cdot BY11 + CS12 \cdot BY12 + CS22 \cdot BY22)$$

$$CS11 = \frac{CSN1}{CSN0} \quad CS12 = \begin{cases} \frac{\sqrt{CSN1 \cdot CSN2}}{CSN0} & \text{für } CSN1 \cdot CSN2 > 0 \\ -\frac{\sqrt{|CSN1 \cdot CSN2|}}{CSN0} & \text{für } CSN1 \cdot CSN2 < 0 \end{cases} \quad CS22 = \frac{CSN2}{CSN0} \quad (4.20)$$

Die Koeffizienten $CSN1$ und $CSN2$ werden genauso berechnet wie $CSN0$. Es wird dabei jedoch die jeweils gültige Ladungsasymmetrie I_1 und I_2 benutzt.

4.5 Das einfache Tröpfchenmodell LDM

Dieses Modell wendet die Bethe-Weizsäcker-Formel auf verformte Kerne an. Das heißt nur Oberflächenenergie und Coulombenergie bilden die Spaltbarriere. Da die Ladungsasymmetrie berücksichtigt wird, trägt die Volumenenergie und der Wignerterm jedoch auch zur Bindungsenergie beim Spaltprozeß bei. Im übrigen wurden keine Paarkraftterme eingeführt, weil sie zu den mikroskopischen Beiträgen zählen und daher hier nicht behandelt werden. Das Modell LDM beruht nun auf folgender Massenformel [20] :

$$\begin{aligned}
 E(Z, N, Form) = & -a_v (1 - \kappa_v \cdot I^2) \cdot A & a_v = 15.4941 \text{ MeV} & \text{Volumenenergie} \\
 & & \kappa_v = 1.7826 & \\
 & + a_s (1 - \kappa_s \cdot I^2) \cdot A^{2/3} & (ESUR0) & a_s = 17.9439 \text{ MeV} & \text{Oberflächenenergie} \\
 & & & \kappa_s = 1.7826 & \\
 & + COULK0 \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} & (ECO00) & COULK0 = 0.7053 & \text{Coulombenergie} \\
 & - 7 \cdot e^{-6|I|} & I = \frac{N-Z}{A} & & \text{Wignerenergie} \quad (4.21)
 \end{aligned}$$

Die Coulombenergie wird mit dem neuen *ECO00* genau wie für YPE gezeigt berechnet. Die Oberflächenenergie wird einfach aus der geometrischen Oberfläche des Kerns berechnet :

$$\begin{aligned}
 BS11 &= \frac{1}{2R^2} \left\{ R1^2 \cdot (1 + KOS1) + R3 \left[\rho_3 \left(\arcsin\left(\frac{U1-Z3}{R3}\right) - \arcsin\left(\frac{C1-Z3}{R3}\right) \right) - SR3 \cdot (U1 - C1) \right] \right\} \\
 BS22 &= \frac{1}{2R^2} \left\{ R2^2 \cdot (1 + KOS2) + R3 \left[\rho_3 \left(\arcsin\left(\frac{C2-Z3}{R3}\right) - \arcsin\left(\frac{U2-Z3}{R3}\right) \right) - SR3 \cdot (C2 - U2) \right] \right\} \\
 ESUR &= ESUR0 \cdot (CS11 \cdot BS11 + CS22 \cdot BS22) \quad (4.22)
 \end{aligned}$$

Die Koeffizienten *CS..* sind genau wie weiter oben definiert. Die Größen *BS11* und *BS22* sind in ihrer Definition ansich abhängig von *DELTA*. Dies gilt auch generell für die relativen Ladungsdichten der Coulombenergie und für die ganzen Korrekturterme (besonders bei YPE). Doch wer sich für diese Details interessiert muß das Programmlisting studieren.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Gamov Zeitschrift für Physik 51(1928)204
- [2] O. Hahn und F. Strassmann Die Naturwissenschaften 27(1939)11
- [3] N. Bohr und J.A. Wheeler Physical Review 56(1939)426
- [4] C.F.v. Weizsäcker Zeitschrift für Physik 96(1939)431
- [5] S. Frankel and M. Metropolis Physical Review 72(1947)914
- [6] J.N.P. Lawrence Physical Review 139(1965)1227
- [7] J.R. Nix Nuclear Physics A130(1969)241
- [8] J. Maruhn Diplom- und Doktorarbeit Frankfurt 1971 ..
- [9] A. Sandulescu, D.N. Poenaru and W. Greiner Sov. J. Nucl. 11[6](1980)528
- [10] H.J. Rose and G.A. Jones Nature 307(1984)245
- [11] K. Depta, A. Sandulescu, J.A. Maruhn, W. Greiner Preprint Frankfurt/M 1987
- [12] D. Schnabel Diplomarbeit Frankfurt/M 1988
- [13] L.D. Landau und E.M. Lifschitz Lehrbuch Band III
- [14] T. Mayer-Kuckuk Kernphysik Lehrbuch
- [15] D.L. Hill and J.A. Wheeler Physical Review 89(1952)1102
- [16] J.R. Nix Report UCRL-17958 (July 1,1968) Berkeley unpublished Seite 112-116
- [17] J.R. Nix Report UCRL-17958 (July 1,1968) Berkeley unpublished Seite 117-120
- [18] K. Depta Doktorarbeit/M 1988
- [19] P. Möller and J.R. Nix Nuclear Physics A361(1981)117
- [20] W.D. Myers and W.J. Swiatecki Arkiv Fyzik 36(1967)343

Danksagung

Meinem Lehrer Herrn Prof. Dr. W. Greiner danke ich herzlich dafür, daß er mich freundlich in das Institut für Theoretische Physik in Frankfurt a.M. aufgenommen hat. Sein leitender Geist und sein stetes, aufmunterndes Interesse haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. J.A. Maruhn für seine nette und unaufdringliche Betreuung. Im Gespräch mit Ihm haben sich viele Probleme geklärt.

Weiterhin danke ich Herrn Prof. Dr. A. Sandulescu und Herrn Dr. D.N. Poenaru für fruchtbare Gespräche und ihr Interesse an meiner Arbeit.

Auch die konstruktive Zusammenarbeit mit den Herren R. Herrmann, D. Schnabel und H. Klein muß dankend erwähnt werden.

Schließlich gebührt dem Rechenzentrum der GSI in Darmstadt Dank für die Bereitstellung der benötigten Rechenkapazität und dem hilfreichen Einsatz bei Problemen.

Herrn Holzmann danke ich für den sorgfältigen Druck dieser Diplomarbeit.

Anhang Ia

Die Berechnung der Coulombenergie mit diffuser Oberfläche

Mikroskopische Betrachtungen und auch Meßdaten fordern eine diffuse Kernoberfläche. Bei Kugelform läßt sich eine diffuse Abnahme der Ladungsdichte mit einer Woods-Saxon Funktion erreichen:

$$\rho(r) = \rho_0 \cdot \left[1 + e^{\frac{r-R}{a}} \right]^{-1}$$

Dieser Ansatz führt jedoch auf Schwierigkeiten, wenn man beliebige Kernformen behandeln will. Elegant und problemlos erzeugt man eine Ladungsdichte mit diffusem Rand durch Faltung mit einer Yukawa Funktion über eine homogene Ladungsdichte in Kernform:

$$\rho(\vec{r}_1) = \rho_0 \int_V \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{4\pi a^2 \cdot |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3 r_2 = \rho_0 \int_V g(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) d^3 r_2 \quad \begin{array}{l} V \hat{=} \text{scharfes Kernvolumen} \\ a = \text{unscharfe Parameter} \end{array}$$

Mit der Yukawa Faltung läßt sich nicht nur eine Oberflächendiffusität erzeugen. Ebenso kann man damit ein Kernpotential für beliebig geformte Kerne erhalten:

$$U(\vec{r}_1) = \frac{-U_0}{4\pi a^2} \int_V \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3 r_2 \quad V \hat{=} \text{Kernform}$$

Für ein kugelförmiges Volumen läßt sich dieses Integral explizit lösen:

$$U_i(r) = -U_0 \cdot \left[1 - \left(1 + \frac{R}{a}\right) \cdot e^{-\frac{R}{a}} \cdot \frac{\sinh(r/a)}{r/a} \right] \quad r \leq R$$

$$U_a(r) = -U_0 \cdot \left[\frac{R}{a} \cosh\left(\frac{R}{a}\right) - \sinh\left(\frac{R}{a}\right) \right] \cdot \frac{e^{-r/a}}{r/a} \quad r > R \quad R = \text{Kernradius}$$

Plotet man dieses Potential zeigt sich eine große Ähnlichkeit mit einem Woods-Saxon Potential.

Um die Coulombenergie zu berechnen verwenden wir die oben definierte Ladungsdichte:

$$\rho(\vec{r}_i) = \rho_0 \int_V g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) d^3 r_j$$

Diese Ladungsdichte wird nun in das bekannte Coulombenergie Integral eingesetzt:

$$E_c = \frac{1}{2} \iint_{\infty \infty} d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{\rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{\rho_0}{2} \iint_{VV} d^3 r_3 d^3 r_4 \iint_{\infty \infty} d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot g(|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|) \cdot g(|\vec{r}_2 - \vec{r}_4|)$$

Das bekannte Faltungstheorem kann auf drei Funktionen erweitert werden:

$$\iint_{\infty \infty} d^3 r_1 d^3 r_2 f_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot f_2(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) \cdot f_3(\vec{r}_2 - \vec{r}_4) = (2\pi)^{3/2} \int_{\infty} d^3 k f_1(\vec{k}) \cdot f_2(-\vec{k}) \cdot f_3(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_3 - \vec{r}_4)}$$

Für f_1 nehmen wir den Abstandsbetrag und für f_2 bzw. f_3 die Dichtefunktion:

$$f_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Rightarrow f_1(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{k^2}$$

$$f_{2,3}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \Rightarrow f_{2,3}(k) = g(k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \cdot \frac{1}{(1 + a^2 k^2)}$$

Mit diesen fouriertransformierten Funktionen und dem obigen Faltungstheorem ergibt sich die Coulombenergie zu:

$$E_c = 4\pi \frac{\rho_0^2}{2} \iint_{VV} d^3 r_3 d^3 r_4 \int_{\infty} d^3 k \frac{1}{k^2} \cdot g^2(k) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_3 - \vec{r}_4)}$$

Das hintere Integral über das unendliche Volumen läßt sich aufgrund der Rotationssymmetrie von $g(k)$ auf eindimensionale Form bringen:

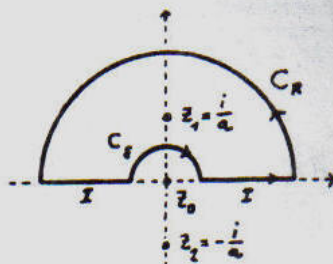
$$\int_{\infty} d^3 k f(k) \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \int_0^\infty f(k) \cdot e^{ikr \cos\vartheta} k^2 dk = 2\pi \int_0^\infty f(k) \cdot \left[\frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \right] \cdot k^2 dk = \frac{4\pi}{r} \int_0^\infty f(k) \cdot k \cdot \sin(kr) dk$$

Damit erhalten wir nun für das Coulombintegral:

$$E_c = (4\pi)^2 \frac{S_0^2}{2} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k} \sin(k|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \frac{S_0^2}{\pi} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ik|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{k(1+a^2 k^2)^2} dk$$

Das k -Integral kann nun mit komplexer Contourintegration gelöst werden.

$$I = \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{izr}}{z(1+a^2 z^2)^2} dz$$



Dabei wird $k \rightarrow z$ komplex gewählt. Mit dem Residuensatz gilt:

$$I_c = I + I_\epsilon + I_R = 2\pi i \operatorname{Res} z_1 \quad \text{Pole: } z_0 = 0, z_1 = \frac{i}{a}, z_2 = -\frac{i}{a}$$

Mit dem Lemma von Jordan gilt für das Integral über den großen Bogen $I_R = 0$. Der Pol bei z_0 wird umschifft. Das Residuum von z_1 ergibt sich zu:

$$\operatorname{Res} z_1 = \frac{d}{dz} \left[(z - z_0)^2 \cdot \frac{e^{izr}}{z(1+a^2 z^2)^2} \right]_{z=z_1 = \frac{i}{a}} = -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{r}{a} \right) \cdot e^{-\frac{r}{a}}$$

Mit $z = \epsilon \cdot e^{i\varphi}$ und $dz = i\epsilon \cdot e^{i\varphi}$ ergibt sich für das Integral I_ϵ :

$$I_\epsilon = \int_{\pi}^0 \frac{e^{ir\epsilon}}{\epsilon(1+a^2 \epsilon^2)^2} d\epsilon = \int_{\pi}^0 \frac{e^{ir\epsilon e^{i\varphi}}}{\epsilon e^{i\varphi} (1+a^2 \epsilon^2 e^{i2\varphi})^2} i\epsilon e^{i\varphi} d\varphi \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -i \int_0^\pi \frac{e^0}{1} d\varphi = -i\pi$$

Damit ergibt sich nun für das gesuchte Integral I :

$$I = 2\pi i \operatorname{Res} z_1 - I_\epsilon = -i\pi \left(1 + \frac{1}{2} \frac{r}{a} \right) \cdot e^{-\frac{r}{a}} + i\pi$$

Setzen wir dieses Ergebnis in den Ausdruck für E_c ein erhalten wir:

$$E_c = \frac{\rho_0^2}{4\pi} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{a} - \frac{1}{a} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a} \right) \cdot e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} \right]$$

Die Coulombenergie ergibt sich damit als Summe eines Terms für scharfe Oberfläche plus einer Korrektur für die Diffusität:

$$E_c(\text{scharf}) = \frac{\rho_0^2}{2} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\Delta E_c = -\frac{\rho_0^2}{2} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a} \right) \cdot e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}$$

Für ein kugelförmiges Volumen mit Radius R_0 lassen sich die Integrale explizit lösen:

$$E_c(\text{scharf}) = \frac{3}{5} Z^2 e^2 / R_0$$

$$\Delta E_c = -\frac{3Z^2 e^2 a^2}{R_0^3} \left\{ 1 - \frac{15}{8} \frac{a}{R_0} + \frac{21}{8} \left(\frac{a}{R_0} \right)^2 - \frac{3}{4} e^{-\frac{2R_0}{a}} \left[1 + \frac{9}{2} \frac{a}{R_0} + 7 \left(\frac{a}{R_0} \right)^2 + \frac{7}{2} \left(\frac{a}{R_0} \right)^3 \right] \right\}$$

Die doppelten Volumenintegrale lassen sich zu doppelten Oberflächenintegrale umformen:

$$E_c(\text{scharf}) = -\frac{\rho_0^2}{12} \oint_S \oint_S \frac{[d\vec{S}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)][d\vec{S}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\Delta E_c = \frac{\rho_0^2}{2a} \oint_S \oint_S \frac{[d\vec{S}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)][d\vec{S}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]}{(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a)^4} \cdot \left[2 \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a} - 5 + \left(5 + 3 \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a} + \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}{2a^2} \right) \cdot e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a}} \right]$$

Es fallen dabei zwei Integrationsdimensionen weg. Die numerische Integration wird dementsprechend einfacher.

Anhang Ib

Yukawa-plus-exponential Oberflächenenergie

In der Bethe-Weizsäcker Formel wird der Anteil der Kernkräfte zur Verformungsenergie lediglich mit dem Oberflächenterm berücksichtigt. Die Kernkraft bei elastischer Streuung kann gar nicht beschrieben werden. Als Abhilfe kann man die Kernkraft mit einem Ausdruck analog zur Coulombenergie beschreiben. Wir benutzen hierbei jedoch eine kurzreichweitige Yukawafunktion:

$$E_Y(a, c_s) = - \frac{c_s}{8\pi^2 r_0^2 a^4} \iint_{VV} \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} d^3r_1 d^3r_2 \quad \xrightarrow{V \hat{=} \text{Kugel}} \quad \frac{c_s}{r_0^2} \left[-\frac{2}{3} \frac{R^3}{a} + R^2 - a^2 + (a+R)^2 \cdot e^{-\frac{2R}{a}} \right]$$

In dem Ausdruck für die Kugel findet man unter anderem einen Volumenterm und einen in R quadratischen Oberflächenterm. Um die Volumenenergie separat mit einer eigenen Konstante behandeln zu können, wird der R^3 -Term weggaddiert:

$$\text{Mit } \frac{c_s}{r_0^2} \left[-\frac{2}{3} \frac{R^3}{a} \right] = -\frac{2}{3} \cdot \frac{c_s}{a r_0^2} \cdot r_0^3 A = -\frac{2}{3} \cdot \frac{r_0}{a} \cdot c_s \cdot A \quad \text{ergibt sich:}$$

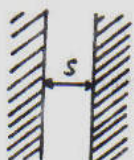
$$E_s(a, c_s) = E_Y(a, c_s) + \frac{2}{3} \frac{r_0}{a} \cdot c_s \cdot A \quad \xrightarrow{\text{Kugel}} \quad \frac{c_s}{r_0^2} \left[R^2 - a^2 + (a+R)^2 \cdot e^{-\frac{2R}{a}} \right]$$

für $a \rightarrow 0$ ergibt sich daraus der Oberflächenterm der Bethe-Weizsäcker Formel.

Dieses Modell ist jedoch noch mit zwei erheblichen Problemen behaftet:

1. Die Bestimmung von a durch Schwerionenprozesse liefert Widersprüche.
2. Die Sättigung der anziehenden Kraft zwischen berührender Kernmaterie fehlt.

Die Wechselwirkungsenergiedichte $\mathcal{E}$ zwischen zwei unendlichen Scheiben aus Kernmaterie soll für $s = 0$ ein Minimum haben. Für die Funktion $E_Y(a, c_s)$ ergibt sich als Wechselwirkungsenergie:



$$\mathcal{E}_Y(a, c_s, s) = - \frac{c_s}{2\pi r_0^2} \cdot e^{-s/a}$$

Sie hat kein Minimum bei $s = 0$. Die Sättigungsbedingung $\frac{d}{ds}\mathcal{E}(s)|_{s=0} = 0$ kann jedoch erfüllt werden, wenn man mit der Differenz von zwei Yukawafunktionen arbeitet:

$$\frac{d}{ds} \mathcal{E}(s) = \frac{d}{ds} \left[\mathcal{E}_Y(a_1, c_{s1}, s) - \mathcal{E}_Y(a_2, c_{s2}, s) \right] = 0 \quad \Big|_{s=0}$$

Daraus ergibt sich die Relation $c_{s1}/a_1 = c_{s2}/a_2$. Die effektive Oberflächenkonstante ist $c_s = c_{s1} - c_{s2}$. Das ergibt:

$$c_{s1} = \frac{a_1}{a_1 - a_2} \cdot c_s \quad \text{und} \quad c_{s2} = \frac{a_2}{a_1 - a_2} \cdot c_s$$

Damit ergibt sich die Oberflächenfunktion zu:

$$E_s = E_Y(a_1, c_{s1}) - E_Y(a_2, c_{s2}) = \frac{a_1 E_Y(a_1, c_s) - a_2 E_Y(a_2, c_s)}{a_1 - a_2}$$

Versucht man damit Schwerionenstreudaten zu reproduzieren, dann findet man daß a_1 etwa gleich a_2 sein muß. Damit kann man obigen Ausdruck für E_s als Differentialquotient auffassen und erhält:

$$E_s = \frac{\partial}{\partial a} \left[a \cdot E_Y(a, c_s) \right] \quad \text{Setzt man die Yukawafunktion ein und differenziert}$$

$$\text{gibt es:} \quad E_s = \frac{c_s}{8\pi^2 r_0^2 a^2} \iint_{VV} \left[2 \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} - e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} \right] d^3 r_1 d^3 r_2$$

Diese verallgemeinerte Oberflächenenergie erfüllt nun alle Forderungen. Man spricht von dem "Yukawa-plus-exponential Modell". Auch dieses doppelte Volumenintegral wird zur numerischen Integration zu einem doppelten Oberflächenintegral umgeformt:

$$E_s = - \frac{c_s}{8\pi^2 r_0^2} \oint \oint_s \frac{[d\vec{s}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)][d\vec{s}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \left[2 - \left(2 + 2 \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a} + \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}{a^2} \right) \cdot e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a}} \right]$$

Für einen kugelförmigen Kern erhält man:

$$E_s(\text{Kugel}) = c_s \cdot \frac{R^2}{r_0^2} \cdot \left\{ 1 - 3 \left(\frac{a}{R} \right)^2 + \left(\frac{R}{a} + 1 \right) \cdot \left[2 + 3 \left(\frac{a}{R} \right) + 3 \left(\frac{a}{R} \right)^2 \right] \cdot e^{-\frac{2R}{a}} \right\}$$

Der führende Term ist wieder die gewohnte Oberflächenenergie. Literatur: [H.J. Krappe, J.R. Nix und A.J. Sierk, Phys. Rev. Lett. 42(1979)215], [H.J. Krappe, J.R. Nix und A.J. Sierk, Phys. Rev. 20(1979)992]

Anhang Ic

Die Transformation von Volumen- auf Oberflächenintegrale

Die doppelten Volumenintegrale der Coulombenergie und Yukawa-plus-exponential Oberflächenenergie wurden zu doppelten Oberflächenintegralen umgeformt. Ich möchte hier den Formalismus dazu kurz skizzieren. Allgemein sieht die Umformung folgendermaßen aus:

$$\iint_{V \times V} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 f(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \oint_S \oint_S [d\vec{S}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] [d\vec{S}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] \cdot F(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Die Umformung basiert auf dem Gauß'schen Divergenztheorem. Dabei muß die skalare Funktion $f(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ als Divergenz einer vektorartigen Funktion dargestellt werden. Die folgende Formel zeigt, wie sich dieses optimal erreichen läßt (Um Indexchaos zu vermeiden setzen wir: $\vec{x} = \vec{r}_1$, $\vec{y} = \vec{r}_2$, $x = |\vec{x}|$, $y = |\vec{y}|$, $\vec{z} = \vec{x} - \vec{y}$, $z = |\vec{z}|$):

$$f(\vec{x} - \vec{y}) = \sum_j \sum_i \frac{\partial}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial x_i} (x_j - y_j)(x_i - y_i) \cdot F(\vec{x} - \vec{y}) = \sum_j \frac{\partial}{\partial y_j} \left\{ (x_j - y_j) \cdot \underbrace{\left[F(\vec{x} - \vec{y}) + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (x_i - y_i) \cdot F(\vec{x} - \vec{y}) \right]}_{\tilde{F}(\vec{x} - \vec{y})} \right\}$$

Hiermit ergibt das Gauß'sche Divergenztheorem direkt die obige Formel. Das Problem ist nun eine entsprechende Funktion $F(\vec{x} - \vec{y})$ zu finden. Zur Vereinfachung soll $f(\vec{x} - \vec{y})$ und $F(\vec{x} - \vec{y})$ rotationssymmetrisch sein ($f(\vec{x} - \vec{y}) = f(|\vec{x} - \vec{y}|) = f(z)$), was auch für unsere Zwecke ausreicht.

Die Funktion $\tilde{F}(z)$ erfüllt ein einfaches Gauß-theorem. Wählt man den Spezialfall eines Kugelvolumens um den Ort $\vec{x}$ ($\vec{x} = 0$) erhält man die Bestimmungsgleichung für $\tilde{F}(z)$:

$$\int_{V_y} f(|\vec{0} - \vec{y}|) d\vec{y} = \int_{V_y} \sum_j \frac{\partial}{\partial y_j} (-y_j) \cdot \tilde{F}(|-\vec{y}|) d\vec{y} = \oint_S d\vec{S}_y \cdot (-\vec{y}) \cdot \tilde{F}(|\vec{y}|) \quad \text{Kugel:}$$

$$4\pi \int_0^R f(r) \cdot r^2 dr = 4\pi \cdot R \vec{R} \cdot (-\vec{R}) \cdot \tilde{F}(R) = -4\pi R^3 \cdot \tilde{F}(R) \Rightarrow \tilde{F}(z) = -\frac{1}{z^3} \int_0^z f(r) \cdot r^2 dr$$

Für die Coulomb- und Yukawafunktion ergibt sich damit beispielsweise:

$$\tilde{F}_C(z) = -\frac{1}{z^3} \int_0^z \frac{1}{r} \cdot r^2 dr = -\frac{1}{z^3} \cdot \frac{z^2}{2} = -\frac{1}{2z}$$

$$\tilde{F}_Y(z) = -\frac{1}{z^3} \int_0^z \frac{e^{-r/a}}{r/a} \cdot r^2 dr = -\frac{1}{z^3} a^2 \left[-\left(1 - \frac{z}{a}\right) \cdot e^{-z/a} + 1 \right] = -\frac{a^3}{z^3} \left[1 - \left(1 + \frac{z}{a}\right) \cdot e^{-z/a} \right]$$

Nun haben wir $\tilde{F}(z)$. Im gleichen Sinne wie oben wählen wir nun $\vec{y} = 0$. Damit erhalten wir schließlich die Bestimmungsgleichung für $F(z)$:

$$\tilde{F}(\vec{x}) = F(\vec{x}) + \underbrace{\vec{\nabla}_x \cdot \vec{x}}_{\text{Divergenz in Kugelkoordinaten}} F(x) \quad \text{Mit Divergenz in Kugelkoordinaten und } F(x) = x^{-4} G(x)$$

$$\tilde{F}(x) = F(x) + \frac{1}{x^4} \frac{d}{dx} x^3 F(x) = x^{-4} G(x) + \frac{1}{x^4} \frac{d}{dx} x^{-1} G(x) = \cancel{x^{-4} G(x)} + \frac{1}{x^3} (-x^{-2}) G(x) + x^{-3} \frac{d}{dx} G(x)$$

$$\Rightarrow \tilde{F}(x) = x^{-3} \frac{d}{dx} G(x) \quad \text{bzw.} \quad G(x) = \int_0^x x'^3 \cdot \tilde{F}(x') dx' \quad \text{oder} \quad F(z) = \frac{1}{z^4} \int_0^z x^3 \tilde{F}(x) dx$$

Damit können wir jetzt $F(z)$ für die Coulomb- und Yukawafunktion berechnen:

$$F_C(z) = \frac{1}{z^4} \int_0^z x^3 \cdot \frac{-1}{2x} dx = -\frac{1}{2z^4} \int_0^z x^2 dx = -\frac{1}{2z^4} \cdot \frac{z^3}{3} = -\frac{1}{6} \cdot \frac{1}{z}$$

$$F_Y(z) = \frac{1}{z^4} \int_0^z x^3 \cdot \frac{-a^3}{x^2} \left[1 - \left(1 + \frac{x}{a}\right) \cdot e^{-x/a} \right] dx = -\frac{a^4}{z^4} \left[\frac{z}{a} - 2 + \left(\frac{z}{a} + 2\right) \cdot e^{-z/a} \right]$$

Der Ausdruck für $F_Y(z)$ wurde schrittweise mit speziellen Betrachtungen berechnet. Wir können ihn nun jedoch benutzen um einen allgemeinen Formalismus zur Erzeugung von $F(z) = F(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ zu entwickeln. Dazu betrachten wir die Fourierdarstellung der Funktion $f(z) = f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$:

$$f(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty f(k) \cdot \frac{\sin(k \cdot z)}{z} \cdot k dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty f(k) \cdot \frac{e^{ikz} - e^{-ikz}}{2iz} \cdot k dk$$

Nimmt man jetzt den oben abgeleiteten Ausdruck $F_Y(z)$ der Yukawafunktion und substituiert $-\frac{1}{a} = \pm ik$ dann erhält man:

$$\frac{\pm e^{\pm ikz}}{iz} = \frac{1}{k^3} \sum_j \sum_i \frac{\partial}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \frac{(x_j - y_j)(x_i - y_i)}{z^4} \left[\mp ikz - 2 + (\mp ikz + 2) \cdot e^{\pm ikz} \right] \right\}$$

Damit bekommt man folgenden Ausdruck für $f(z)$ ($\pm e^{\pm ikz} \rightarrow \sin(kz), \cos(kz)$) :

$$f(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty f(k) \cdot \left(\frac{1}{k^3} \sum_j \sum_i \frac{\partial}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \frac{(x_j - y_j)(x_i - y_i)}{z^4} \left[-2 + kz \sin(kz) + 2 \cos(kz) \right] \right\} \right) \cdot k dk$$

Holt man nun die von k unabhängigen Integrale vor das Integral

$$f(z) = \sum_j \sum_i \frac{\partial}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{(x_j - y_j)(x_i - y_i)}{z^4} \left\{ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \frac{f(k)}{k^2} \left[-2 + kz \sin(kz) + 2 \cos(kz) \right] dk \right\}$$

sieht man, daß das verbleibende Integral gerade die gesuchte Funktion

$F(z) = F(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ ist:

$$F(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^4} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \frac{f(k)}{k^2} \left[-2 + k \cdot |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \cdot \sin(k \cdot |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) + 2 \cos(k \cdot |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \right] dk$$

Wenn $f(k)$ eine gerade Funktion ist, kann man auch schreiben ($r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$) :

$$F(r_{12}) = \frac{1}{r_{12}^4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty \frac{f(k)}{k^2} \left[-ik r_{12} - 2 + (-ik r_{12} + 2) \cdot e^{ik r_{12}} \right] dk$$

Dieses Integral kann mit komplexer ContourIntegration gelöst werden.

Literatur: [K.T.R. Davies und J.R. Nix, Phys. Rev. 14(1976)1977]

Anhang Id

Die Umformung des Coulombintegrals in eine effizient integrierbare Form

Mit dem hergeleiteten Resultat $F(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = -\frac{1}{6} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ ergibt sich das Oberflächenintegral zu:

$$E_c = \frac{\rho_0^2}{2} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = -\frac{\rho_0^2}{12} \iint_{SS} \frac{[d\vec{S}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] [d\vec{S}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

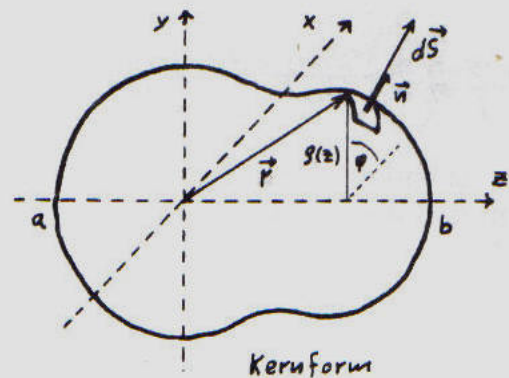
Ab nun wollen wir uns auf axialsymmetrische Kernformen beschränken und gehen zweckmäßigerweise zu Zylinderkoordinaten über. Dann gilt:

$$dS = s \sqrt{1 + s'^2} dz d\varphi \quad s' = \frac{ds(z)}{dz}$$

$$\vec{n} = \left(\frac{\cos \varphi}{\sqrt{1+s'^2}}, \frac{\sin \varphi}{\sqrt{1+s'^2}}, \frac{-s'}{\sqrt{1+s'^2}} \right)$$

$$d\vec{S} = dS \cdot \vec{n} = (s \cdot \cos \varphi, s \cdot \sin \varphi, -s s') dz d\varphi$$

$$\text{Mit: } \frac{1}{2} \frac{d}{dz} s^2(z) = \frac{1}{z} \cdot z \cdot s \cdot s' = s \cdot s'$$



$$\begin{aligned} d\vec{S}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) &= (s_1 \cos \varphi_1, s_1 \sin \varphi_1, -\frac{1}{2} \frac{ds_1^2}{dz_1}) \cdot (s_1 \cos \varphi_1 - s_2 \cos \varphi_2, s_1 \sin \varphi_1 - s_2 \sin \varphi_2, z_1 - z_2) \\ &= \left[s_1^2 - s_1 s_2 \cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \frac{ds_1^2}{dz_1} \right] \quad \text{ebenso:} \end{aligned}$$

$$d\vec{S}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = - \left[s_2^2 - s_1 s_2 \cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \frac{ds_2^2}{dz_2} \right] \quad \text{schließlich:}$$

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} = \sqrt{s_1^2 + s_2^2 - 2s_1 s_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + (z_2 - z_1)^2}$$

Aufgrund der Axialsymmetrie kann eine der φ_i -Integrationen trivial ausgeführt werden:

$$E_c = -\frac{S_0^2}{12} \cdot 2\pi \cdot \int_{a_a}^{b_b} \int_0^{2\pi} \frac{\left[S_1^2 + \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dS_1^2}{dz_1} - S_1 S_2 \cos \varphi \right] \left[S_2^2 - \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dS_2^2}{dz_2} - S_1 S_2 \cos \varphi \right]}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2 S_1 S_2 \cos \varphi}} d\varphi dz_1 dz_2$$

Alle unsere formabhängigen Volumenintegrale werden für die numerische Integration zu solchen dreifach-Integralen umgeformt. Speziell im Coulombfall kann die verbleibende φ -Integration auf numerisch gut approximierbare elliptische Integrale zurückgeführt werden:

$$E_c = \frac{S_0^2}{12} \cdot 2\pi \cdot \int_{a_a}^{b_b} \int_0^{2\pi} \frac{\left[S_1^2 + \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dS_1^2}{dz_1} \right] \left[S_2^2 - \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{dS_2^2}{dz_2} \right] + \left[-(S_1^2 + S_2^2) + \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \cdot (S_1^2 - S_2^2) \right] S_1 S_2 \cos \varphi + S_1^2 S_2^2 \cos^2 \varphi}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2 S_1 S_2 \cos \varphi}} d\varphi dz_1 dz_2$$

Das letzte Integral besteht aus drei Summanden, deren φ -Integration wir jetzt einzeln behandeln:

Mit: $\cos(\varphi) = 1 - 2 \sin^2(\frac{\varphi}{2})$ und $\cos(\varphi) \hat{=} -\cos(\varphi)$ da Integration über ganze Periode

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2 S_1 S_2 \cos \varphi}} = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\sqrt{(S_1 + S_2)^2 + (z_2 - z_1)^2 - 4 S_1 S_2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}}$$

Mit: $a_p^2 = (\rho_1 + \rho_2)^2 + (z_2 - z_1)^2$, $\alpha = \frac{\varphi}{2}$, $d\varphi = 2d\alpha$ und $\sin(\alpha) = \sin(\pi - \alpha)$

$$I_1 = \int_0^{\pi} \frac{2 d\alpha}{\sqrt{a_p^2 - 4 S_1 S_2 \sin^2 \alpha}} = \frac{4}{a_p} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - \frac{4 S_1 S_2}{a_p^2} \sin^2 \alpha}} = \frac{4}{a_p} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}} = \frac{4}{a_p} \cdot K(k^2)$$

$K(k^2)$ ist ein vollständiges elliptisches Integral erster Gattung. $k^2 = \frac{4\rho_1\rho_2}{a_p^2}$

Für den zweiten Summanden ergibt sich:

$$I_2 = \int_0^{2\pi} \frac{\cos \varphi d\varphi}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2 S_1 S_2 \cos \varphi}} = -\frac{4}{a_p} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos(2\alpha) d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}} = -\frac{4}{a_p} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{(1 - 2 \sin^2 \alpha) d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}}$$

Um nicht lange umzuformen betrachten wir einfach folgenden Ausdruck:

$$D = \frac{K-E}{k^2} = \frac{1}{k^2} \left\{ \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha} d\alpha \right\} = \frac{1}{k^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1-(1-k^2 \sin^2 \alpha)}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} d\alpha = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2 \alpha d\alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}}$$

Damit läßt sich nun direkt das Ergebnis von I_2 hinschreiben:

$$I_2 = -\frac{4}{a_s} \cdot (K-2D) \quad E(k^2) \quad \text{ist ein vollständiges ellipt. Integral zweiter Gattung}$$

Das dritte Integral ist problematisch und läßt nur mit einem raffinierten Trick lösen:

$$\text{Mit: } r_{12}^2 = s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2s_1 s_2 \cdot \cos \varphi$$

$$I_{3a} = s_1^2 s_2^2 \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2 \varphi}{r_{12}} d\varphi = s_1^2 s_2^2 \cdot \frac{4}{a_s} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1 - \sin^2(2\alpha)}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} d\alpha = s_1^2 s_2^2 \cdot \frac{4}{a_s} \left\{ K - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2(2\alpha) d\alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} \right\}$$

$$\text{Mit: } s_1 s_2 \cos \varphi = \frac{1}{2} [s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - r_{12}^2] \quad \text{wird}$$

$$I_{3b} = \frac{s_1 s_2}{2} \int_0^{2\pi} \frac{[s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - r_{12}^2] \cdot \cos \varphi}{r_{12}} d\varphi = \frac{s_1 s_2}{2} \cdot \frac{4}{a_s} (K-2D) \cdot \{s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2\} - \frac{s_1 s_2}{2} \int_0^{2\pi} \underbrace{r_{12} \cdot \cos \varphi d\varphi}_{I_4}$$

Nun kann das Integral I_4 durch partielle Integration umgeformt werden:

$$I_4 = -4a_s \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{f}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} \cdot g' d\alpha \quad \text{Mit: } \frac{d}{d\alpha} \sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha} = \frac{-k^2 \sin \alpha \cos \alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}}$$

$$I_4 = -4a_s \left\{ \sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha} \cdot \frac{\sin(2\alpha)}{2} \right|_0^{\frac{\pi}{2}} + \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{+k \sin \alpha \cos \alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} \cdot \frac{\sin(2\alpha)}{2} d\alpha \right\} = -4a_s \cdot \frac{k}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2(2\alpha) d\alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}}$$

$$a_s k^2 = a_s \cdot \frac{4s_1 s_2}{a_s^2} = \frac{4s_1 s_2}{a_s} \quad \text{Nun ergibt sich damit für } I_{3b} :$$

$$2 \cdot I_{3b} = -s_1 s_2 \cdot \frac{4}{a_s} \cdot (K-2D) \cdot \{s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2\} + \frac{4}{a_s} \cdot s_1^2 s_2^2 \cdot \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2(2\alpha) d\alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}}$$

Addiert man I_{3a} dazu, dann fällt das problematische Integral weg:

$$I_3 = \frac{1}{3}(2 \cdot I_{3b} + I_{3a}) = -\frac{4}{a_p} \cdot s_1 s_2 \cdot \frac{(k-2D)}{3} \cdot \{s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2\} + \frac{4}{a_p} \cdot s_1^2 s_2^2 \cdot \frac{K}{3}$$

Faßt man nun alle Resultate zusammen, erhält man für das Coulombintegral:

$$E_c = \frac{s_0^2}{12} \cdot 2\pi \cdot 4 \iint_{a,a}^{b,b} \left\{ s_1 s_2 \cdot \frac{(k-2D)}{3} \cdot \left[2(s_1^2 + s_2^2) - (z_2 - z_1)^2 + \frac{3}{2}(z_2 - z_1) \cdot \left(\frac{ds_1^2}{dz_1} - \frac{ds_2^2}{dz_2} \right) \right] \right. \\ \left. + K \cdot \left\{ \frac{s_1^2 s_2^2}{3} + \left[s_1^2 + \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{ds_1^2}{dz_1} \right] \left[s_2^2 - \frac{1}{2}(z_2 - z_1) \frac{ds_2^2}{dz_2} \right] \right\} \right\} \cdot \frac{1}{a_p} \cdot dz_1 dz_2$$

Es verbleibt also ein doppeltes Integral über die z-Achse. Dieses Integral läßt sich effizient mit Gauß-Legendre Integration numerisch berechnen. Es wird als Davies-Sierk Formel bezeichnet [K.T.R Davies und A.J. Sierk , J. Comput. Phys. 18(1975)311].

Mit den folgenden Chebychev Approximationen lassen sich die vollständigen elliptischen Integrale berechnen:

$$K(k^2) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}} \quad E(k^2) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha} \, d\alpha$$

Mit $x = 1 - k^2$ ergibt sich folgende Polynomnäherung:

$$K(k^2) \approx \sum_{i=0}^n a_i x^i + \ln\left(\frac{1}{x}\right) \cdot \sum_{i=0}^n b_i x^i \quad a_0 = \ln(4) \quad , \quad b_0 = \frac{1}{2}$$

$$E(k^2) \approx \sum_{i=0}^n c_i x^i + \ln\left(\frac{1}{x}\right) \cdot \sum_{i=0}^n d_i x^i \quad c_0 = 1 \quad , \quad d_0 = 0$$

Die höheren Koeffizienten $a_1, a_2, \dots, d_n$ kann man in Tabellen finden [J. Cody , Math. Comput. 19(1965)105]. Man erhält schon für wenige Koeffizienten gute Approximationen. Die Genauigkeit beträgt etwa 10^{-2n} ($n \geq 2$).

Anhang IIa

Die Berechnung der partiellen Ableitungen $\frac{\partial g}{\partial x}$

Die Geometrie wird mit $R1, KOS1, \rho_3, KOS2, R2$ bestimmt. Diese fünf Größen bezeichnen wir nun mit y , sie sind Funktionen von den verallgemeinerten Koordinaten $ETA, DELTA, CR3$ welche nun x heißen. Es gibt nun fünf Funktionen g für die gilt: $y = g(x)$. Die Größen y wurden numerisch ermittelt. Die Funktionen $g(x)$ sind daher unbekannt. Dennoch brauchen wir für die Geschwindigkeitsfelder der WW-Massen die partiellen Ableitungen $DGNDX(i, j) = \partial g_i / \partial x_j$ ($i = 1 \dots 5, j = 1 \dots 3$). Glücklicherweise lassen sie sich mit dem Satz über implizite Funktionen exakt bestimmen. Für die Geometrie brauchen wir auch $R3$. Da $R3 = \frac{SR3}{CR3}$ ist, behandeln wir es als dritte verallgemeinerte Koordinate, anstelle von $CR3$, worauf es sich leicht zurückführen läßt. Die Volumenerhaltung, die ETA -Beziehung, glatter Neckanfang und -ende und die Längenbeziehung sind fünf charakteristische Bedingungen des Drei-Kugel Modells. Man kann sie als Funktionen $F(y, x) = F(g(x), x) = 0$ schreiben und damit die gesuchten Ableitungen berechnen:

$$\left(\frac{\partial g}{\partial x} \right) = \begin{pmatrix} \frac{\partial R1}{\partial ETA}, \dots, \frac{\partial R1}{\partial CR3} \\ \frac{\partial KOS1}{\partial ETA}, \dots, \frac{\partial KOS1}{\partial CR3} \\ \vdots \\ \frac{\partial R2}{\partial ETA}, \dots, \frac{\partial R2}{\partial CR3} \end{pmatrix} = - \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^{-1} \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right) = - \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial R1}, \frac{\partial F_1}{\partial KOS1}, \dots, \frac{\partial F_1}{\partial R2} \\ \frac{\partial F_2}{\partial R1}, \dots, \frac{\partial F_2}{\partial R2} \\ \vdots \\ \frac{\partial F_5}{\partial R1}, \frac{\partial F_5}{\partial KOS1}, \dots, \frac{\partial F_5}{\partial R2} \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial ETA}, \frac{\partial F_1}{\partial DELTA}, \frac{\partial F_1}{\partial R3}, \frac{\partial F_1}{\partial CR3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial ETA}, \dots, \frac{\partial F_2}{\partial CR3} \\ \vdots \\ \frac{\partial F_5}{\partial ETA}, \dots, \frac{\partial F_5}{\partial R3}, \frac{\partial F_5}{\partial CR3} \end{pmatrix}$$

In dieser Arbeit werden zwei verschiedene Geometrien behandelt ("TBM" und "DKM"). Der Unterschied muß in den Funktionen $F_1(y, x)$ und $F_2(y, x)$ berücksichtigt werden. Nun betrachten wir zuerst Typ TBM. Für $DELTA \leq DELZV$ wird das Gesamtvolumen erhalten mit $R2 = R2F$. Für $F_1(y, x)$ und $F_2(y, x)$ ergibt sich hierbei:

$$\begin{aligned} F_1(y, x) &= \frac{R1^3}{3} \cdot (1 + KOS1)^2 \cdot (2 - KOS1) + \frac{R2^3}{3} \cdot (1 + KOS2)^2 \cdot (2 - KOS2) \\ &\quad + SR3 \cdot \left\{ R3 \cdot g3^2 \cdot (KOS1 + KOS2) + \frac{R3^3}{3} \cdot (KOS1 \cdot (3 - KOS1^2) + KOS2 \cdot (3 - KOS2^2)) \right\} \\ &\quad - g3 \cdot R3^2 \cdot (KOS1 \cdot SIN1 + KOS2 \cdot SIN2 + \arcsin(KOS1) + \arcsin(KOS2)) \\ &\quad - \frac{VOL\emptyset}{\pi} = 0 \end{aligned}$$

Gesamtvolumen Erhaltung

$$F_2(y, x) = \frac{R2^3}{3} - \frac{VOL\emptyset}{8\pi} \cdot (1 - ETA) = 0$$

ETA - Beziehung

Für $DELTA > DELZV$ (gibt es nur bei $CR3 > 0$) wird das Volumen links von $Z3$ gleich $VOL1F$ gesetzt und rechts von $Z3$ gleich $VOL2F$. Für $DELTA > DELZS$ werden allgemein im folgenden die entstehenden Neckspitzen durch den Ausdruck zwischen den Doppelpunkten berücksichtigt. Im übrigen ist für $DELTA > DELZF$ $DGNDX(i,j) = 0$ und wird dort auch nicht benötigt. $F_1(y,x)$ und $F_2(y,x)$ ist nun für $DELTA > DELZV$ folgendermaßen gegeben:

$$F_1(y,x) = \frac{R1^3}{3} \cdot (1 + \cos 1)^2 \cdot (2 - \cos 1) + R3 \cdot S3^2 \cdot \cos 1 + \frac{R3^3}{3} \cdot (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2)) - S3 \cdot R3^2 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \arcsin(\cos 1))$$

$$: + S3 \cdot R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - \frac{1}{3}(2 \cdot R3^2 + S3^2) \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2} : \quad \text{für } DELTA > DELZS$$

$$- \frac{VOL\phi}{2\pi} \cdot (1 + ETA) = 0 \quad \text{Volumen-1 Erhaltung}$$

$$F_2(y,x) = \frac{R2^3}{3} \cdot (1 + \cos 2)^2 \cdot (2 - \cos 2) + R3 \cdot S3^2 \cdot \cos 2 + \frac{R3^3}{3} \cdot (\cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2)) - S3 \cdot R3^2 \cdot (\cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 2))$$

$$: + S3 \cdot R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - \frac{1}{3}(2 \cdot R3^2 + S3^2) \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2} : \quad \text{für } DELTA > DELZS$$

$$- \frac{VOL\phi}{2\pi} \cdot (1 - ETA) = 0 \quad \text{Volumen-2 Erhaltung}$$

Nun können wir direkt die Ableitungen $\frac{\partial F}{\partial y}$ und $\frac{\partial F}{\partial x}$ für diese Funktionen $F_1(y,x)$ bilden:

$$\frac{\partial F_1}{\partial R1} = R1^2 \cdot (1 + \cos 1)^2 \cdot (2 - \cos 1)$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \cos 1} = R1^3 \cdot \sin 1^2 + SR3 \cdot R3 \cdot (S3 - SR3 \cdot R3 \cdot \sin 1)^2 \quad \left[\text{für } DELTA > DELZV \text{ ohne } SR3 \right]$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial S3} = 2 \cdot S3 \cdot SR3 \cdot R3 \cdot (\cos 1 + \cos 2) - R3^2 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 1) + \arcsin(\cos 2)) \quad DELTA \leq DELZV$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial S3} = 2 \cdot S3 \cdot R3 \cdot \cos 1 - R3^2 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \arcsin(\cos 1)) : + R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - S3 \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2} : \quad DELTA > DELZV$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \cos 2} = R_2^3 \cdot \sin^2 2 + S R_3 \cdot R_3 \cdot (S_3 - S R_3 \cdot R_3 \cdot \sin 2)^2 \quad \Delta \leq \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_1}{\partial \cos 2} = 0 \quad \Delta > \Delta_{LZV}$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial R_2} = R_2^2 \cdot (1 + \cos 2) \cdot (2 - \cos 2) \quad \Delta \leq \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_1}{\partial R_2} = 0 \quad \Delta > \Delta_{LZV}$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \eta} = 0 \quad \Delta \leq \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_1}{\partial \eta} = -\frac{VOL \phi}{2\pi} \quad \Delta > \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_1}{\partial \Delta} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial R_3} = & S R_3 \cdot \{ S_3^2 \cdot (\cos 1 + \cos 2) + R_3^2 \cdot (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2) + \cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2)) \} \\ & - 2 \cdot S_3 \cdot R_3 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 1) + \arcsin(\cos 2)) \quad \Delta \leq \Delta_{LZV} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial R_3} = & S_3^2 \cdot \cos 1 + R_3^2 \cdot (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2)) - 2 \cdot S_3 \cdot R_3 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \arcsin(\cos 1)) \\ : & + 2 \cdot R_3 \cdot (S_3 \cdot \arcsin(\frac{\sqrt{R_3^2 - S_3^2}}{R_3}) - \sqrt{R_3^2 - S_3^2}) : \quad \Delta > \Delta_{LZV} \end{aligned}$$

Entsprechend bekommen wir die Ableitungen auch für die Funktionen $F_2(y, x)$:

$$\frac{\partial F_2}{\partial R_1} = 0 \quad , \quad \frac{\partial F_2}{\partial \cos 1} = 0 \quad , \quad \frac{\partial F_2}{\partial S_3} = 0 \quad \Delta < \Delta_{LZV}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial S_3} = & 2 \cdot S_3 \cdot R_3 \cdot \cos 2 - R_3^2 \cdot (\cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 2)) \\ : & + R_3^2 \cdot \arcsin(\frac{\sqrt{R_3^2 - S_3^2}}{R_3}) - S_3 \cdot \sqrt{R_3^2 - S_3^2} : \quad \Delta > \Delta_{LZV} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \cos 2} = 0 \quad \Delta \leq \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_2}{\partial \cos 2} = R_2^3 \cdot \sin^2 2 + R_3 \cdot (S_3 - R_3 \cdot \sin 2)^2 \quad \Delta > \Delta_{LZV}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial R_2} = R_2^2 \quad \Delta \leq \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_2}{\partial R_2} = R_2^2 \cdot (1 + \cos 2) \cdot (2 - \cos 2) \quad \Delta > \Delta_{LZV}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \eta} = \frac{VOL \phi}{8\pi} \quad \Delta \leq \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_2}{\partial \eta} = \frac{VOL \phi}{2\pi} \quad \Delta > \Delta_{LZV} \quad , \quad \frac{\partial F_2}{\partial \Delta} = 0 \quad , \quad \frac{\partial F_2}{\partial R_3} = 0 \quad \Delta \leq \Delta_{LZV}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial R_3} = & S_3^2 \cdot \cos 2 + R_3^2 \cdot (\cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2)) - 2 \cdot S_3 \cdot R_3 \cdot (\cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 2)) \\ : & + 2 \cdot R_3 \cdot (S_3 \cdot \arcsin(\frac{\sqrt{R_3^2 - S_3^2}}{R_3}) - \sqrt{R_3^2 - S_3^2}) : \quad \Delta > \Delta_{LZV} \end{aligned}$$

Nun betrachten wir den anderen Geometrietyp DKM. Hier wird das Volumen links und rechts von Z_3 durch eine etwas aufwendigere Funktion von den verallgemeinerten Koordinaten beschrieben. Die Definition der η -Beziehung wechselt stetig bei Δ_{LZS} . Für $C R_3 < 0$ ist das System unabhängig von η . Die Funktionen $F_1(y, x)$ und $F_2(y, x)$ sehen nun folgendermaßen aus:

$$F_1(y, x) = \frac{R1^3}{3} \cdot (1 + \cos 1)^2 \cdot (2 - \cos 1) + SR3 \cdot \left\{ R3 \cdot S3^2 \cdot \cos 1 + \frac{R3^3}{3} \cdot (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2)) \right\} \\ - S3 \cdot R3^2 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \arcsin(\cos 1)) \\ + S3 \cdot R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - \frac{1}{3} \cdot (2 \cdot R3^2 + S3^2) \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2} \quad \text{Für } \Delta > \Delta_{LZS}$$

$$- \frac{VOL \phi}{2\pi} \cdot \left(1 + \left\{ 1 - \frac{1}{2} \cdot (1 + \cos\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta_{LZS}}\right)) \right\} \cdot \eta \right) = 0 \quad \text{Für } CR3 > 0 \text{ und } \Delta \leq \Delta_{LZS}$$

$$- \frac{VOL \phi}{2\pi} \cdot (1 + \eta) = 0 \quad \text{Für } CR3 > 0 \text{ und } \Delta > \Delta_{LZS}$$

$$- \frac{VOL \phi}{2\pi} = 0 \quad \text{Für } CR3 < 0$$

$$F_2(y, x) = \frac{R2^3}{3} \cdot (1 + \cos 2)^2 \cdot (2 - \cos 2) + SR3 \cdot \left\{ R3 \cdot S3^2 \cdot \cos 2 + \frac{R3^3}{3} \cdot (\cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2)) \right\} \\ - S3 \cdot R3^2 \cdot (\cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 2)) \\ + S3 \cdot R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - \frac{1}{3} \cdot (2 \cdot R3^2 + S3^2) \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2} \quad \text{Für } \Delta > \Delta_{LZS}$$

$$- \frac{VOL \phi}{2\pi} \cdot \left(1 - \left\{ 1 - \frac{1}{2} \cdot (1 + \cos\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta_{LZS}}\right)) \right\} \cdot \eta \right) = 0 \quad \text{Für } CR3 > 0 \text{ und } \Delta \leq \Delta_{LZS}$$

$$- \frac{VOL \phi}{2\pi} \cdot (1 - \eta) = 0 \quad \text{für } CR3 > 0 \text{ und } \Delta > \Delta_{LZS}$$

$$- \frac{VOL \phi}{2\pi} = 0 \quad \text{für } CR3 < 0$$

Die Ableitungen $\frac{\partial F}{\partial y}$ und $\frac{\partial F}{\partial x}$ für die Funktion $F_1(y, x)$ ergibt sich jetzt zu:

$$\frac{\partial F_1}{\partial R1} = R1^2 \cdot (1 + \cos 1)^2 \cdot (2 - \cos 1)$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \cos 1} = R1^3 \cdot \sin 1^2 + SR3 \cdot R3 \cdot (S3 - SR3 \cdot R3 \cdot \sin 1)^2$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial S3} = 2 \cdot S3 \cdot SR3 \cdot R3 \cdot \cos 1 - R3^2 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \arcsin(\cos 1)) \\ + R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - S3 \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2}$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \cos 2} = 0, \quad \frac{\partial F_1}{\partial R2} = 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \eta A} = \frac{VOL\phi}{2\pi} \left(\sin\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \cdot \frac{\pi \cdot \Delta \cdot \eta A}{2 \cdot \Delta L Z S^2} \cdot \frac{\partial \Delta L Z S}{\partial \eta A} - \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \right) \right\} \right) \quad \begin{array}{l} \Delta \leq \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array}$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \eta A} = -\frac{VOL\phi}{2\pi} \quad \begin{array}{l} \Delta > \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array}, \quad \frac{\partial F_1}{\partial \eta A} = 0 \quad \text{für } CR3 < 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial \Delta} = \frac{VOL\phi}{2\pi} \left(-\sin\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \cdot \frac{\pi \cdot \eta A}{2 \cdot \Delta L Z S} \right) \quad \begin{array}{l} \Delta \leq \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array}, \quad \frac{\partial F_1}{\partial \Delta} = 0 \quad \text{sonst}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial R3} &= SR3 \cdot \left\{ S3^2 \cdot \cos 1 + R3^2 \cdot (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2)) \right\} - 2 \cdot S3 \cdot R3 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \arcsin(\cos 1)) \\ &: + 2 \cdot R3 \cdot \left(S3 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - \sqrt{R3^2 - S3^2} \right) : \\ &+ \frac{VOL\phi}{2\pi} \left(\sin\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \cdot \frac{\pi \cdot \Delta \cdot \eta A}{2 \cdot \Delta L Z S^2} \cdot \frac{\partial \Delta L Z S}{\partial R3} \right) \quad \leftarrow \text{nur für } \begin{array}{l} \Delta \leq \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array} \end{aligned}$$

Ebenso bekommen wir die Ableitungen auch für die Funktion $F_2(y, x)$:

$$\frac{\partial F_2}{\partial R1} = 0, \quad \frac{\partial F_2}{\partial \cos 1} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial S3} &= 2 \cdot S3 \cdot SR3 \cdot R3 \cdot \cos 2 - R3^2 \cdot (\cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 2)) \\ &: + R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - S3 \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2} : \end{aligned}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \cos 2} = R2^3 \cdot \sin^2 2 + SR3 \cdot R3 \cdot (S3 - SR3 \cdot R3 \cdot \sin 2)^2$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial R2} = R2^2 \cdot (1 + \cos 2)^2 \cdot (2 - \cos 2)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \eta A} = -\frac{VOL\phi}{2\pi} \left(\sin\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \cdot \frac{\pi \cdot \Delta \cdot \eta A}{2 \cdot \Delta L Z S^2} \cdot \frac{\partial \Delta L Z S}{\partial \eta A} - \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \right) \right\} \right) \quad \begin{array}{l} \Delta \leq \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \eta A} = \frac{VOL\phi}{2\pi} \quad \begin{array}{l} \Delta > \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array}, \quad \frac{\partial F_2}{\partial \eta A} = 0 \quad \text{für } CR3 < 0$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \Delta} = -\frac{VOL\phi}{2\pi} \left(-\sin\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \cdot \frac{\pi \cdot \eta A}{2 \cdot \Delta L Z S} \right) \quad \begin{array}{l} \Delta \leq \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array}, \quad \frac{\partial F_2}{\partial \Delta} = 0 \quad \text{sonst}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial R3} &= SR3 \cdot \left\{ S3^2 \cdot \cos 2 + R3^2 \cdot (\cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2)) \right\} - 2 \cdot S3 \cdot R3 \cdot (\cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 2)) \\ &: + 2 \cdot R3 \cdot \left(S3 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) - \sqrt{R3^2 - S3^2} \right) : \\ &- \frac{VOL\phi}{2\pi} \left(\sin\left(\frac{\pi \cdot \Delta}{\Delta L Z S}\right) \cdot \frac{\pi \cdot \Delta \cdot \eta A}{2 \cdot \Delta L Z S^2} \cdot \frac{\partial \Delta L Z S}{\partial R3} \right) \quad \leftarrow \text{nur für } \begin{array}{l} \Delta \leq \Delta L Z S \\ CR3 > 0 \end{array} \end{aligned}$$

Nun brauchen wir noch die drei Funktionen $F_3(y, x)$, $F_4(y, x)$, $F_5(y, x)$. Sie werden aus allgemeinen Geometrieeigenschaften des Drei-Kugel Modells gewonnen, sie sind daher für die Typen TBM und DKM gleich und werden nun gemeinsam behandelt.

Für die Funktion $F_3(y, x)$ nehmen wir die Forderung nach glattem Übergang von der ersten Kugel zum Neck. Damit erhalten wir:

$$F_3(y, x) = (R_1 + SR_3 \cdot R_3) \cdot \sin 1 - S_3 = 0$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial R_1} = \sin 1, \quad \frac{\partial F_3}{\partial \cos 1} = -(R_1 + SR_3 \cdot R_3) \cdot \frac{\cos 1}{\sin 1}, \quad \frac{\partial F_3}{\partial S_3} = -1, \quad \frac{\partial F_3}{\partial \cos 2} = 0, \quad \frac{\partial F_3}{\partial R_2} = 0$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial F_3}{\partial \Delta} = 0, \quad \frac{\partial F_3}{\partial R_3} = SR_3 \cdot \sin 1$$

Für die Funktionen $F_4(y, x)$ nehmen wir entsprechend den glatten Übergang vom Neck zur zweiten Kugel:

$$F_4(y, x) = (R_2 + SR_3 \cdot R_3) \cdot \sin 2 - S_3 = 0$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial R_1} = 0, \quad \frac{\partial F_4}{\partial \cos 1} = 0, \quad \frac{\partial F_4}{\partial S_3} = -1, \quad \frac{\partial F_4}{\partial \cos 2} = -(R_2 + SR_3 \cdot R_3) \cdot \frac{\cos 2}{\sin 2}, \quad \frac{\partial F_4}{\partial R_2} = \sin 2$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial F_4}{\partial \Delta} = 0, \quad \frac{\partial F_4}{\partial R_3} = SR_3 \cdot \sin 2$$

Als letzte Beziehung benutzen wir die Forderung das die y auch die richtige Länge Δ ergeben:

$$F_5(y, x) = (R_1 + SR_3 \cdot R_3) \cdot \cos 1 + (R_2 + SR_3 \cdot R_3) \cdot \cos 2 - \Delta = 0$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial R_1} = \cos 1, \quad \frac{\partial F_5}{\partial \cos 1} = R_1 + SR_3 \cdot R_3, \quad \frac{\partial F_5}{\partial S_3} = 0, \quad \frac{\partial F_5}{\partial \cos 2} = R_2 + SR_3 \cdot R_3, \quad \frac{\partial F_5}{\partial R_2} = \cos 2$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial F_5}{\partial \Delta} = -1, \quad \frac{\partial F_5}{\partial R_3} = SR_3 \cdot (\cos 1 + \cos 2)$$

Nun haben wir vollständige Matrizen $\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)$ und $\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)$ hergeleitet. Man muß jetzt nur noch die Matrix $\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)$ numerisch invertieren und mit $\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)$ multiplizieren und schon hat man die gesuchte Ableitung $\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)$.

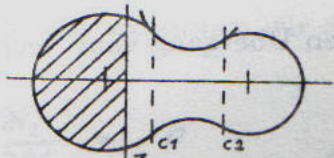
Anhang IIb

Die Koeffizienten A_i und C_i der Werner-Wheeler Massen

Für die Berechnung der Werner-Wheeler Massen und zur Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes brauchen wir die Koeffizienten A_i und C_i , welche sich, wie gezeigt wurde, folgendermaßen ergeben:

$$A_i = -\frac{1}{P(z)} \frac{\partial}{\partial q_i} \int_a^z P(z') dz' \quad \text{bzw.} \quad A_i = \frac{1}{P(z)} \frac{\partial}{\partial q_i} \int_z^b P(z') dz' \quad \text{und} \quad C_i = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} A_i$$

Zur praktischen Rechnung werden die Abschnitte I...IV getrennt behandelt. Zuerst betrachten wir die Abschnitte I und IV :



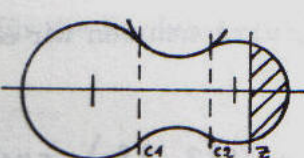
$$P(z) = R1^2 - z^2$$

$$A_x = -\frac{1}{P^2} \frac{\partial}{\partial x} I^{(I)}$$

$$I^{(I)} = \int_{-R1}^z P^2 dz' = \int_{-R1}^z (R1^2 - z'^2) dz' = \frac{2}{3} R1^3 + R1 \cdot z - \frac{z^3}{3}$$

$$A_x^{(I)} = -\frac{1}{P^2} \cdot \frac{\partial R1}{\partial x} \cdot \frac{\partial I^{(I)}}{\partial R1} = -\frac{\partial R1}{\partial x} \cdot \frac{2 \cdot R1}{R1 - z}$$

$$C_x^{(I)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} A_x = \frac{\partial R1}{\partial x} \cdot \frac{R1}{(R1 - z)^2}$$



$$P(z) = R2^2 - (D - z)^2$$

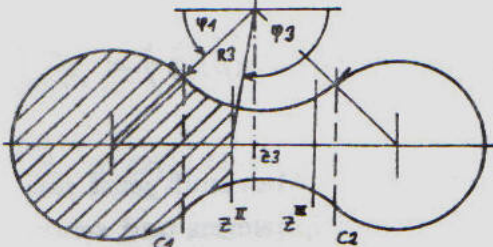
$$A_x = \frac{1}{P^2} \frac{\partial}{\partial x} I^{(IV)}$$

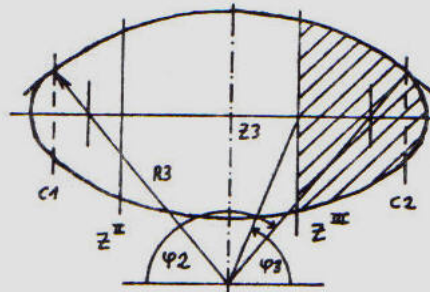
$$I^{(IV)} = \int_z^{D+R2} P^2 dz' = \frac{2}{3} R2^3 + R2 \cdot (D - z) - \frac{1}{3} (D - z)^3$$

$$A_x^{(IV)} = \frac{\partial R2}{\partial x} \cdot \frac{2 \cdot R2}{R2 - (D - z)} + \delta_{xD}$$

$$C_x^{(IV)} = \frac{\partial R2}{\partial x} \cdot \frac{R2}{(R2 - (D - z))^2}$$

Die Berechnung in Abschnitt II und III sind erheblich aufwendiger. Abschnitt II und III sind weitgehend gleich und können zusammen behandelt werden. Zur Veranschaulichung der Situation betrachten wir folgendes:





$$\cos 1 = \cos(\varphi_1)$$

$$\cos 2 = \cos(\varphi_2)$$

$$\cos 3 = \cos(\varphi_3)$$

$$\sin 3 = \sqrt{1 - \cos 3^2}$$

$$P(z) = \varphi_3 - SR3 \cdot \sqrt{R3^2 - (z - z_3)^2} = \varphi_3 - SR3 \cdot R3 \cdot \sin 3$$

$$P^2(z) = \varphi_3^2 + R3^2 - (z - z_3)^2 - 2 \cdot SR3 \cdot \varphi_3 \cdot \sqrt{R3^2 - (z - z_3)^2}$$

$$C1 - z_3 = -SR3 \cdot R3 \cdot \cos 1$$

$$C2 - z_3 = SR3 \cdot R3 \cdot \cos 2$$

$$z^I - z_3 = SR3 \cdot R3 \cdot \cos 3$$

$$z^II - z_3 = -SR3 \cdot R3 \cdot \cos 3$$

Hiermit können wir nun die Berechnung der A_x beginnen:

$$A_x^{(II)} = -\frac{1}{P(z)} \cdot \frac{\partial}{\partial x} I^{(II)} \quad I^{(II)} = \int_{-R1}^z P(z') dz' = \frac{R1^3}{3} \cdot (1 + \cos 1) \cdot (2 - \cos 1) + \int_{C1-z1}^{z-z1} (S3^2 + R3^2) - w^2 - 2 \cdot SR3 \cdot S3 \cdot \sqrt{R3^2 - w^2} dw$$

$$A_x^{(III)} = \frac{1}{P(z)} \cdot \frac{\partial}{\partial x} I^{(III)} \quad I^{(III)} = \int_z^{D+R2} P(z') dz' = \frac{R2^3}{3} \cdot (1 + \cos 2) \cdot (2 - \cos 2) + \int_{z-z1}^{C2-z1} (S3^2 + R3^2) - w^2 - 2 \cdot SR3 \cdot S3 \cdot \sqrt{R3^2 - w^2} dw$$

$z - z1 = SR3 \cdot R3 \cdot \cos 3$
 $C1 - z1 = -SR3 \cdot R3 \cdot \cos 1$
 $C2 - z1 = SR3 \cdot R3 \cdot \cos 2$
 $z - z1 = -SR3 \cdot R3 \cdot \cos 3$

Der Integrand der beiden hinteren Neckintegrale ist eine gerade Funktion in w . Daher ändert sich das Integral nicht, wenn man die Grenzen und ihre Vorzeichen vertauscht. In Anbetracht dessen, sieht man das $I^{(II)}$ völlig analog zu $I^{(III)}$ ist:

$$\text{Mit: } R1, R2 \rightarrow R, \quad \cos 1, \cos 2 \rightarrow \cos \quad \text{und}$$

$$DKSA = \cos \cdot \sin + \cos 3 \cdot \sin 3 + \arcsin(\cos) + \arcsin(\cos 3)$$

$$I^{(II)} = I^{(III)} = I = \frac{R^3}{3} \cdot (1 + \cos)^2 \cdot (2 - \cos) + SR3 \cdot \left(S3^2 \cdot R3 \cdot (\cos + \cos 3) + \frac{R3^3}{3} \cdot (\cos \cdot (3 - \cos^2) + \cos 3 \cdot (3 - \cos 3^2)) \right) - S3 \cdot R3^2 \cdot DKSA$$

Um das weitere Vorgehen zu verdeutlichen, betrachten wir folgende Ausdrücke:

$$M_x = \frac{\partial I}{\partial x} = \frac{\partial I}{\partial R} \cdot \frac{\partial R}{\partial x} + \frac{\partial I}{\partial \cos} \cdot \frac{\partial \cos}{\partial x} + \frac{\partial I}{\partial S3} \cdot \frac{\partial S3}{\partial x} + \frac{\partial I}{\partial R3} \cdot \frac{\partial R3}{\partial x} + \frac{\partial I}{\partial \cos 3} \cdot \frac{\partial \cos 3}{\partial x}$$

$$N = \frac{1}{P(z)} \Rightarrow A_x^{(II)} = -N \cdot M_x \quad A_x^{(III)} = N \cdot M_x \quad C_x^{(II)} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (N \cdot M_x) \quad C_x^{(III)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (N \cdot M_x)$$

Die Ableitungen von I nach den geometrischen Größen sind:

$$\frac{\partial I}{\partial x} = R^2 \cdot (1 + \cos)^2 \cdot (2 - \cos)$$

$$\frac{\partial I}{\partial \cos} = R^3 \cdot \sin^2 + SR3 \cdot R3 \cdot (S3 - SR3 \cdot R3 \cdot \sin)^2$$

$$\frac{\partial I}{\partial S3} = 2 \cdot SR3 \cdot S3 \cdot R3 \cdot (\cos + \cos 3) - R3^2 \cdot DKSA$$

$$\frac{\partial I}{\partial R3} = SR3 \cdot \left(S3^2 \cdot (\cos + \cos 3) + R3^2 \cdot (\cos \cdot (3 - \cos^2) + \cos 3 \cdot (3 - \cos 3^2)) \right) - 2 \cdot S3 \cdot R3 \cdot DKSA$$

$$\frac{\partial I}{\partial \cos 3} = SR3 \cdot R3 \cdot (S3 - SR3 \cdot R3 \cdot \sin 3)^2 = SR3 \cdot R3 \cdot P(z)^2$$

Die Ableitung $\frac{\partial KOS3}{\partial x}$ ist unbekannt. Mit der Definition von $KOS3$ kann sie jedoch auf die bekannten Ableitungen aus $DGNDX(i, j)$ zurückgeführt werden:

$$\begin{aligned} KOS3^{(II)} &= \frac{Z - Z3^{(II)}}{SR3 \cdot R3} & Z3^{(II)} &= (R1 + SR3 \cdot R3) \cdot KOS1 \\ KOS3^{(III)} &= -\frac{Z - Z3^{(III)}}{SR3 \cdot R3} & Z3^{(III)} &= D - (R2 + SR3 \cdot R3) \cdot KOS2 \end{aligned}$$

Wie schon das Integral I gleich war für Abschnitt II und III kann man auch $KOS3$ vereinheitlichen:

$$ZD = \begin{cases} Z & \text{für Abschnitt II} \\ D - Z & \text{für Abschnitt III} \end{cases} \quad SG = \begin{cases} -1 & \text{für II} \\ +1 & \text{für III} \end{cases}$$

Nun können wir $KOS3$ und seine Ableitungen allgemein hinschreiben:

$$\begin{aligned} KOS3 &= \frac{ZD - (R + SR3 \cdot R3) \cdot KOS}{SR3 \cdot R3} & \frac{\partial KOS3}{\partial Z} &= \frac{-SG}{SR3 \cdot R3} & \frac{\partial KOS3}{\partial D} &= \frac{1}{SR3 \cdot R3} \quad \text{für III} \\ \frac{\partial KOS3}{\partial R} &= \frac{-KOS}{SR3 \cdot R3} & \frac{\partial KOS3}{\partial KOS} &= -\frac{R + SR3 \cdot R3}{SR3 \cdot R3} & \frac{\partial KOS3}{\partial R3} &= \frac{R \cdot KOS - ZD}{SR3 \cdot R3^2} \end{aligned}$$

M_x ergibt sich damit schließlich zu:

$$\begin{aligned} M_x &= \frac{\partial R}{\partial x} \cdot \left[R^2 \cdot (1 + KOS)^2 \cdot (2 - KOS) - KOS \cdot P(z)^2 \right] \\ &+ \frac{\partial KOS}{\partial x} \cdot \left[R^3 \cdot \sin^2 + SR3 \cdot R3 \cdot (R3 - SR3 \cdot R3 \cdot \sin)^2 - (R + SR3 \cdot R3) \cdot P(z)^2 \right] \\ &+ \frac{\partial SR3}{\partial x} \cdot \left[2 \cdot SR3 \cdot R3 \cdot R3 \cdot (KOS + KOS3) - R3^2 \cdot DKSA \right] \\ &+ \frac{\partial R3}{\partial x} \cdot \left[SR3 \cdot (R3^2 \cdot (KOS + KOS3) + R3^2 \cdot (KOS \cdot (3 - KOS^2) + KOS3 \cdot (3 - KOS3^2))) \right. \\ &\quad \left. - 2 \cdot SR3 \cdot R3 \cdot DKSA + \frac{R \cdot KOS - ZD}{R3} \cdot P(z)^2 \right] \\ &+ P(z)^2 \quad \text{für Abschnitt III und } x = D \end{aligned}$$

Als erstes Endresultat haben wir nun: $A_x = SG \cdot N \cdot M_x$

Nun kommt C_x an die Reihe. Es gilt:

$$C_x = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} A_x = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (s_6 \cdot N \cdot M_x) = \left(-\frac{s_6}{2} \cdot \frac{\partial N}{\partial z} \right) \cdot M_x + N \cdot \left(-\frac{s_6}{2} \cdot \frac{\partial M_x}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial P(z)}{\partial z} = -s_6 \cdot \frac{\cos 3}{\sin 3} = -s_6 \cdot \cot 3 \quad \frac{\partial P(z)^2}{\partial z} = -2 \cdot s_6 \cdot P(z) \cdot \cot 3 \quad \frac{\partial N}{\partial z} = \frac{2 \cdot s_6}{P(z)} \cdot \cot 3$$

Die Differentiation von M_x nach z ergibt sich nun "straight forward". Sie ist jedoch beim ρ_3 und R_3 Term nicht ganz trivial:

$$\begin{aligned} -\frac{s_6}{2} \cdot \frac{\partial M_x}{\partial z} = P(z) \cdot \left\{ \begin{aligned} &\frac{\partial R}{\partial x} \cdot [-\cos \cdot \cot 3] + \frac{\partial \cos}{\partial x} \cdot [-(R + s_{R3} \cdot R_3) \cdot \cot 3] \\ &+ \frac{\partial s_3}{\partial x} \cdot [1] + \frac{\partial R_3}{\partial x} \cdot \left[\frac{R \cdot \cos - zD}{R_3} \cdot \cot 3 - s_{R3} \cdot \sin 3 \right] \\ &+ \cot 3 \quad \text{für Abschnitt III und } x = D \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

Nun erhalten wir das zweite Endresultat:

$$\text{Mit } -\frac{s_6}{2} \cdot \frac{\partial N}{\partial z} = -\frac{\cot 3}{P(z)} \quad \text{und} \quad N = \frac{1}{P(z)} \quad \text{ergibt sich:}$$

$$C_x = \left(-\frac{\cot 3}{P(z)} \cdot M_x + \{ \} \right) \cdot \frac{1}{P(z)}$$

Anhang IIc

Der Schwerpunkt und seine Bewegung

Der Schwerpunkt ist eine Funktion der verallgemeinerten Koordinaten $Z_s = Z_s(q_k)$. Man erhält ihn und seine Zeitableitung folgendermaßen:

$$Z_s(q_i) = \frac{\int p^2(z) \cdot z \, dz}{\int p^2(z) \, dz} = \frac{\pi}{\text{VOL}\emptyset} \cdot \int_a^b p^2(z) \cdot z \, dz \quad \dot{Z}_s = \sum_i \frac{\partial Z_s}{\partial q_i} \cdot \dot{q}_i = \frac{\partial Z_s}{\partial \eta} \cdot \dot{\eta} + \frac{\partial Z_s}{\partial D} \cdot \dot{D} + \frac{\partial Z_s}{\partial S} \cdot \dot{S}$$

$\eta = \text{ETA}, D = \text{DELTA}, S = \text{CR3}$

$$\text{Mit: } I_s = \int_a^b p^2(z) \cdot z \, dz \quad \frac{\partial Z_s}{\partial q_i} = \frac{\pi}{\text{VOL}\emptyset} \cdot \frac{\partial}{\partial q_i} I_s(R1, \cos1, S3, \cos2, R2, Z3, D, R3) = \frac{\pi}{\text{VOL}\emptyset} \cdot \left\{ \frac{\partial I_s}{\partial R1} \cdot \frac{\partial R1}{\partial q_i} + \dots \right\}$$

Nun muß zuerst das Integral I_s gelöst werden. Es wird in vier Abschnitte zerlegt:

$$I_s^{(I)} = \int_{-R1}^{C1} (R1^2 - z^2) \cdot z \, dz = -\frac{1}{4} R1^4 \cdot \sin1^4 \quad \text{Mit: } C1 = R1 \cdot \cos1$$

$$I_s^{(II)} = \int_{C2}^{D+R2} (R2^2 - (z-D)^2) \cdot z \, dz = \int_{C2-D}^{R2} (R2^2 - w^2) \cdot (w+D) \, dw = \int_{C2-D}^{R2} (R2^2 - w^2) \cdot w \, dw + D \cdot \int_{C2-D}^{R2} (R2^2 - w^2) \, dw$$

$$= \frac{1}{4} R2^4 \cdot \sin2^4 + D \cdot \frac{R2^3}{3} \cdot (1 + \cos2) \cdot (2 - \cos2) \quad \text{Mit: } D - C2 = R2 \cdot \cos2$$

Die Abschnitte II und III beschreiben den Neck. Für den zusammenhängenden Kern gilt $U1,2 = Z3$. Für $\text{DELZS} < \text{DELTA} < \text{DELZF}$ ist der Abstand der Neckspitzen zu $Z3$ gleich $\sqrt{R3^2 - \rho_3^2}$. Terme welche nur für diesen Fall gelten, werden hinter senkrechter Strichelung aufgeführt:

$$I_s^{(III)} = \int_{C1}^{U1} ((S3^2 + R3^2) - (z-Z3)^2 - 2 \cdot SR3 \cdot S3 \sqrt{R3^2 - (z-Z3)^2}) \cdot z \, dz = \int_{C1-Z3}^{U1-Z3} ((S3^2 + R3^2) - w^2 - 2 \cdot SR3 \cdot S3 \sqrt{R3^2 - w^2}) \cdot (w+Z3) \, dw$$

$U1 - Z3 = 0; -\sqrt{R3^2 - S3^2}$
 $C1 - Z3 = -SR3 \cdot R3 \cdot \cos1$

$$= \int_{C1-Z3}^{U1-Z3} ((S3^2 + R3^2) \cdot w - w^3 - 2 \cdot SR3 \cdot S3 \cdot \sqrt{R3^2 - w^2} \cdot w) \, dw + Z3 \cdot \int_{C1-Z3}^{U1-Z3} ((S3^2 + R3^2) - w^2 - 2 \cdot SR3 \cdot S3 \sqrt{R3^2 - w^2}) \, dw$$

$$= \left[\frac{1}{2} (S3^2 + R3^2) \cdot (R3^2 - S3^2) - \frac{1}{4} (R3^2 - S3^2) + \frac{2}{3} \cdot SR3 \cdot S3 \cdot (R3^2 - (R3^2 - S3^2))^{3/2} \right]^* - \left[\frac{1}{2} (S3^2 + R3^2) \cdot R3^2 \cdot \cos1^2 - \frac{1}{4} R3^4 \cdot \cos1^4 + \frac{2}{3} \cdot SR3 \cdot S3 \cdot (R3^2 - R3^2 \cdot \cos1^2)^{3/2} \right]$$

$\frac{1}{2} S3^2 \cdot R3^2 \cdot \cos1^2 + \frac{R3^4}{4} (\cos1^2 (2 - \cos1^2))$ $R3^2 \cdot \sin1^3$

$$+ Z3 \cdot \left\{ SR3 \cdot \left((S3^2 + R3^2) \cdot R3 \cdot \cos1 - \frac{R3^3}{3} \cdot \cos1^3 \right) - S3 \cdot R3^2 \cdot (\cos1 \cdot \sin1 + \arcsin(\cos1)) \right. \\ \left. - \frac{1}{3} (2 \cdot R3^2 + S3^2) \cdot \sqrt{R3^2 - S3^2} + S3 \cdot R3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R3^2 - S3^2}}{R3}\right) \right\}$$

$$\begin{aligned}
 I_s^{(III)} &= \int_{u_2}^{c_2} \left((s_3^2 + R_3^2) - (z - z_3)^2 - 2 \cdot s_3 \cdot R_3 \cdot \sqrt{R_3^2 - (z - z_3)^2} \right) \cdot z \, dz = \int_{u_2 - z_3 = 0}^{c_2 - z_3 = s_3 \cdot R_3 \cdot \cos 2} \left((s_3^2 + R_3^2) - w^2 - 2 \cdot s_3 \cdot R_3 \cdot \sqrt{R_3^2 - w^2} \right) \cdot (w + z_3) \, dw \\
 &= \left[\frac{1}{2} s_3^2 \cdot R_3^2 \cdot \cos 2^2 + \frac{R_3^4}{4} (\cos 2^2 \cdot (2 - \cos 2^2)) + \frac{2}{3} \cdot s_3 \cdot R_3 \cdot R_3^3 \cdot \sin 2^3 \right] \\
 &\quad - \left[\frac{1}{2} (s_3^2 + R_3^2) \cdot (R_3^2 - s_3^2) - \frac{1}{4} (R_3^2 - s_3^2)^2 + \frac{2}{3} s_3 \cdot R_3 \cdot (R_3^2 - (R_3^2 - s_3^2))^{3/2} \right]^* \\
 &\quad + z_3 \cdot \left\{ s_3 \cdot R_3 \cdot (s_3^2 \cdot R_3 \cdot \cos 2 + \frac{R_3^3}{3} (\cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2))) - s_3 \cdot R_3^2 \cdot (\cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 2)) \right. \\
 &\quad \left. ; - \frac{1}{3} (2 \cdot R_3^2 + s_3^2) \cdot \sqrt{R_3^2 - s_3^2} + s_3 \cdot R_3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R_3^2 - s_3^2}}{R_3}\right) \right\}
 \end{aligned}$$

Addiert man alles zusammen, dann heben sich die gestrichelten Ausdrücke gegenseitig weg und man erhält:

$$\begin{aligned}
 I_s &= I_s^{(I)} + I_s^{(II)} + I_s^{(III)} + I_s^{(IV)} = -\frac{1}{4} R_1^4 \cdot \sin 1^4 + \frac{1}{4} R_2^4 \cdot \sin 2^4 + D \cdot \frac{R_2^3}{3} \cdot (1 + \cos 2) \cdot (2 - \cos 2) \\
 &\quad + \frac{1}{2} s_3^2 \cdot R_3^2 \cdot (\cos 2^2 - \cos 1^2) + \frac{R_3^4}{4} (\cos 2^2 \cdot (2 - \cos 2^2) - \cos 1^2 \cdot (2 - \cos 1^2)) + \frac{2}{3} s_3 \cdot R_3 \cdot R_3^2 \cdot (\sin 2^3 - \sin 1^3) \\
 &\quad + z_3 \cdot \left\{ s_3 \cdot R_3 \cdot (s_3^2 \cdot R_3 \cdot (\cos 1 + \cos 2) + \frac{R_3^3}{3} (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2) + \cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2))) \right. \\
 &\quad \left. - s_3 \cdot R_3^2 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 1) + \arcsin(\cos 2)) \right. \\
 &\quad \left. ; - \frac{2}{3} (2 \cdot R_3 + s_3^2) \cdot \sqrt{R_3^2 - s_3^2} + 2 \cdot s_3 \cdot R_3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R_3^2 - s_3^2}}{R_3}\right) \right\}
 \end{aligned}$$

Um die Schwerpunktsgeschwindigkeit zu berechnen brauchen wir folgende Ableitungen:

$$\frac{\partial I_s}{\partial R_1} = -R_1^3 \cdot \sin 1^4$$

$$\frac{\partial I_s}{\partial \cos 1} = R_1^4 \cdot \sin 1^2 \cdot \cos 1 + R_3 \cdot (s_3 \cdot z_3 - R_3 \cdot \cos 1) \cdot (s_3 - s_3 \cdot R_3 \cdot \sin 1)^2$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial I_s}{\partial s_3} &= s_3 \cdot R_3^2 \cdot (\cos 2^2 - \cos 1^2) + \frac{2}{3} \cdot s_3 \cdot R_3 \cdot R_3^2 \cdot (\sin 2^3 - \sin 1^3) \\
 &\quad + z_3 \cdot \left\{ s_3 \cdot 2 \cdot s_3 \cdot R_3 \cdot (\cos 1 + \cos 2) - R_3^2 \cdot (\cos 1 \cdot \sin 1 + \cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 1) + \arcsin(\cos 2)) \right. \\
 &\quad \left. ; + 2 \cdot R_3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R_3^2 - s_3^2}}{R_3}\right) - 2 \cdot s_3 \cdot \sqrt{R_3^2 - s_3^2} \right\}
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial I_s}{\partial \cos 2} = R_2^3 \cdot \sin 2^2 \cdot (D - R_2 \cdot \cos 2) + R_3 \cdot (s_3 \cdot z_3 + R_3 \cdot \cos 2) \cdot (s_3 - s_3 \cdot R_3 \cdot \sin 2)^2$$

$$\frac{\partial I_s}{\partial R_2} = R_2^3 \cdot \sin 2^4 + D \cdot R_2^2 \cdot (1 + \cos 2)^2 \cdot (2 - \cos 2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_s}{\partial R_3} = & SR_3 \cdot \left(S_3^2 \cdot R_3 \cdot (\cos 1 + \cos 2) + \frac{R_3^3}{3} \cdot (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2) + \cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2)) \right) \\ & - S_3 \cdot R_3^2 \cdot \left(\cos 1 \cdot \sin 1 + \cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 1) + \arcsin(\cos 2) \right) \\ & ; - \frac{2}{3} (2 \cdot R_3^2 + S_3^2) \cdot \sqrt{R_3^2 - S_3^2} + 2 \cdot S_3 \cdot R_3^2 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R_3^2 - S_3^2}}{R_3}\right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial I_s}{\partial D} = \frac{R_2^3}{3} \cdot (1 + \cos 2)^2 \cdot (2 - \cos 2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_s}{\partial R_3} = & S_3^2 \cdot R_3 \cdot (\cos 2^2 - \cos 1^2) + R_3^3 \cdot (\cos 2^2 \cdot (2 - \cos 2^2) - \cos 1^2 \cdot (2 - \cos 1^2)) + 2 \cdot SR_3 \cdot S_3 \cdot R_3^2 \cdot (\sin 2^3 - \sin 1^3) \\ & + Z_3 \cdot \left\{ SR_3 \cdot \left(S_3^2 \cdot (\cos 1 + \cos 2) + R_3^2 \cdot (\cos 1 \cdot (3 - \cos 1^2) + \cos 2 \cdot (3 - \cos 2^2)) \right) \right. \\ & - 2 \cdot S_3 \cdot R_3 \cdot \left(\cos 1 \cdot \sin 1 + \cos 2 \cdot \sin 2 + \arcsin(\cos 1) + \arcsin(\cos 2) \right) \\ & ; + 4 \cdot S_3 \cdot R_3 \cdot \arcsin\left(\frac{\sqrt{R_3^2 - S_3^2}}{R_3}\right) - 4 \cdot R_3 \cdot \sqrt{R_3^2 - S_3^2} \left. \right\} \end{aligned}$$

Nun brauchen wir noch die Ableitungen von Z_3 :

$$\text{Mit } Z_3 = (R_1 + SR_3 \cdot R_3) \cdot \cos 1 \text{ ist: } \frac{\partial Z_3}{\partial R_1} = \cos 1, \frac{\partial Z_3}{\partial \cos 1} = R_1 + SR_3 \cdot R_3 \text{ und } \frac{\partial Z_3}{\partial R_3} = SR_3 \cdot \cos 1$$

$$\Rightarrow \frac{\partial Z_3}{\partial q_i} = \frac{\partial Z_3}{\partial R_1} \cdot \frac{\partial R_1}{\partial q_i} + \frac{\partial Z_3}{\partial \cos 1} \cdot \frac{\partial \cos 1}{\partial q_i} + \frac{\partial Z_3}{\partial R_3} \cdot \frac{\partial R_3}{\partial q_i}$$

Nun erhalten wir schließlich $\frac{\partial Z_s}{\partial q_i}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_s}{\partial q_i} = & \frac{\pi}{\omega L \emptyset} \cdot \left\{ \frac{\partial I_s}{\partial R_1} \cdot \frac{\partial R_1}{\partial q_i} + \frac{\partial I_s}{\partial \cos 1} \cdot \frac{\partial \cos 1}{\partial q_i} + \frac{\partial I_s}{\partial S_3} \cdot \frac{\partial S_3}{\partial q_i} + \frac{\partial I_s}{\partial \cos 2} \cdot \frac{\partial \cos 2}{\partial q_i} + \frac{\partial I_s}{\partial R_2} \cdot \frac{\partial R_2}{\partial q_i} \right. \\ & + \frac{\partial I_s}{\partial Z_3} \cdot \frac{\partial Z_3}{\partial q_i} + \frac{\partial I_s}{\partial R_3} \cdot \frac{\partial R_3}{\partial q_i} \left. \left(+ \frac{\partial I_s}{\partial D} \text{ falls } q_i = D \right) \right\} \end{aligned}$$

$\frac{\partial R_1}{\partial q_i}$, $\frac{\partial \cos 1}{\partial q_i}$, ... wurden von der Programmsektion ... DGNDX berechnet und im Feld DGNDX(i,j) abgelegt.

Im Programm ist $SPUNKT(1) = Z_s$, $SPUNKT(2) = Q-ETA = \frac{\partial Z_s}{\partial \eta}$,
 $SPUNKT(3) = Q-DELTA = \frac{\partial Z_s}{\partial D}$ und $Q-CR3 = \frac{\partial Z_s}{\partial \zeta}$.

$\dot{Z}_s$ ergibt sich damit wie am Anfang gezeigt.

Anhang IIIa

Die Struktur des Rechenprogramm

Mit dem Programm, dessen Strukturplan auf der nächsten Seite gegeben ist, wurden sämtliche Berechnungen durchgeführt. Es besteht aus sechs Sektionen xxxHAUPT, xxxGEO, xxxPOT, xxxDGNDX, xxxWW und xxxCPLOT. xxx steht für die beiden Geometrietypen TBM und DKM. Außer bei xxxGEO sind die Programme für beide Typen im wesentlichen gleich.

Programmsektion xxxHAUPT

Sie besteht aus dem Hauptprogramm welches den Input liest, den Rechenprozess verwaltet und Teile der Ausgabe ausführt. Weiterhin gehören noch einige Subroutinen dazu:

BLOCK DATA: Initialisiert einige mathematische und physikalische Konstanten.

GAUSSK: Die Gauß-Legendre Konstanten werden für die z - und φ -Integration zubereitet.

VSMDAT: Die Daten eines gelesenen VSAM-Vektors werden in die Programmvariablen eingetragen.

SBVSMI: Ein VSAM-Datensatz wird von Platte in den VSAM-Vektor eingelesen.

SBVSMO: Ein im Hauptprogramm gefüllter VSAM-Vektor wird als VSAM-Datensatz auf Platte geschrieben.

SATAN7: Nach Unit 7 (Recordlength 160) können folgende Daten zur graphischen Darstellung ausgegeben werden: PNT5, DMAS, DMKS, DMSP, BCDS, ENER und ESUM. SATAN7 schreibt dabei jeweils den entsprechenden Satan Text- und Header-Kopf.

Programmsektion xxxGEO

Hier wird die Geometrie mit Hilfe von volumenerhaltender Nullstellensuche durch folgende Programme berechnet:

POINT5: Organisiert die Berechnung der speziellen Punkte DELZB, DELZH usw. und schreibt sie falls erwünscht zur Terminalausgabe (Unit 6) und zur Unit 7.

VOLG3T: Berechnet das Gesamtvolumen der aus 3 Teilen bestehenden Kernform für positive und negative Neckkrümmung.

VOLHLB: Berechnet das Volumen einer Kernhälfte. Bei TBM nur für positive Neckkrümmung und bei DKM auch für negative Neckkrümmung.

FDVNEG: Dient der Berechnung von D_{max} bei negativer Neckkrümmung.



FDELZH: Dient der Berechnung von DELZH bei TBM.

FDELV2,FDELV1: Dient der Berechnung von DELZV bei TBM.

FDELS1,FDELS2: Dient der Berechnung von DELZS bei TBM und DKM.

FDELZS: Ist eine Funktion von ETA und CR3. Die indirekte Berechnung von DELZS ermöglicht das numerische Ermitteln von $\partial DELZS / \partial X$ welches bei DKM von DGNADX benötigt wird.

SATGVX: Erstellt einen Satankopf für die Ausgabe von GVX nach Unit 8 (R.L. 255).

GVONX: Organisiert die Berechnung der Geometriegrößen GVX ($R1, KOS1, RHO3$ usw.) als Funktion der verallgemeinerten Koordinaten X . Falls erwünscht erfolgt die Ausgabe nach Unit 6 und 8.

FR1NEG: Dient der Berechnung von $R1$ aus der Gesamtvolumenerhaltung für negative Neckkrümmung.

FR1POS: Dient der Berechnung von $R1$ aus der Gesamtvolumenerhaltung oder aus der Erhaltung von $VOL1F$ für positive Neckkrümmung.

FR2POS: Dient der Berechnung von $R2$ aus der Erhaltung von $VOL2F$.

DWURZ1,DWURZ2: Einfaches Nullstellensuchprogramm welches mit geschickter Mischung von Zwischenwertsatz und Regula-Falsi arbeitet.

Programmsektion xxxPOT

Hier wird das Kernbindungspotential mit einem einfachen Tröpfchenmodell LDM und einem verfeinerten makroskopischen Modell YPE berechnet:

POTAUE: Die Bindungsenergie für die kugelförmige Anfangsform und für die völlig getrennte Endform werden berechnet und ausgegeben. Außerdem werden einige Konstanten für die Integration zubereitet.

POTYPE: Organisiert und vollendet die Berechnung der YPE-Energien.

POTLDM: Organisiert und vollendet die Berechnung der LDM-Energien.

ZZWWAX: Bereitet eine effiziente Gauß-Integration durch Berechnung der indizierten Konstanten und Funktionswerte vor.

RHODRQ: Berechnet den axialen Kernradius $P(z)$, das Quadrat davon und dessen z -Ableitung.

BCBDBY: Führt die numerische Integrationen von YPE durch.

BCOUL: Führt die numerische Coulomb-Integration von LDM durch.

DELKE: Berechnet vollständige elliptische Integrale.

BSURF: Berechnet die relativen Oberflächenkoeffizienten für LDM.

Programmsektion xxxDGNDX

Hier werden die partiellen Ableitungen *DGNDX* mit dem Satz über implizite Funktionen berechnet:

SATDGX: Erstellt einen Satankopf für die Ausgabe von *DGNDX* nach Unit 8.

DGNADX: Berechnet *DGNDX* und gibt falls erwünscht nach Unit 6 und 8 aus.

INVERT: Invertiert die Matrix *DFNDY* numerisch mit LEQT2F.

LEQT2F: Externe IMSL-Routine zum lösen lineare Gleichungssysteme.

Programmsektion xxxWW

Hier werden die Geschwindigkeitsfelder, die Schwerpunktsbewegung und die Werner-Wheeler Massen berechnet:

SATMAS: Erstellt einen Satankopf für die Ausgabe der Massen *DMAS*, *DMKS* und *DMSP* nach Unit 8.

SCHWPT: Berechnet die Schwerpunktslage z , und die Schwerpunktsgeschwindigkeitskoeffizienten $Q-ETA$, $Q-DELTA$ und $Q-CR3$.

VFELD: Berechnet das Geschwindigkeitsfeld und bereitet daraus einen Flußgraphik Datensatz vor, welcher dann von CPLOT gezeichnet wird.

MASSEN: Berechnet sämtliche Massen und gibt falls erwünscht nach Unit 6 und 8 aus.

ABCPVZ: Berechnet die Geschwindigkeitsbasisfelder A_i und C_i und $P(z)$, $P^2(z)$.

Programmsektion xxxCPLOT

Hier wird der von VFELD erstellte Datensatz zu eine Calcomp-Graphik zur Darstellung des Materieflusses verarbeitet:

CPLOT: Zeichnet Kernshapes, Flußfeld und Beschreibung.

LINIE,PFEIL: Zeichnet Linien bzw Pfeile.

CALCOMP: GSI-Graphikprogramm zum Erstellen von Graphiken.

Die Struktur des Ausgabeprogramm

Das Ausgabeprogramm kann Daten (welche vom Rechenprogramm berechnet und in eine VSAM-Datei gespeichert wurden) lesen, eventuell weiterverarbeiten und schließlich (auch zur graphischen Darstellung) ausgeben. Es können Satanplots mit maximal 8 Linien (SATANK) oder mit maximal 16 Linien (SATANL) erzeugt werden. Außerdem können perspektivische HIDEAR- und CONTUR-Plots in Calcomp erzeugt werden. Die Wahl der jeweiligen Achsen und Daten wurde möglichst allgemein gehalten, wobei jedoch immer optimaler Kommentartext produziert wird. Subroutinenkurzbeschreibung:

STRNGS Erzeugt zur jeweiligen Achsenwahl passende Daten-Kommentartexte.

SATANK,SATANL: Erzeugt Satanköpfe für Satandatenatz mit 132/255 Zeichen.

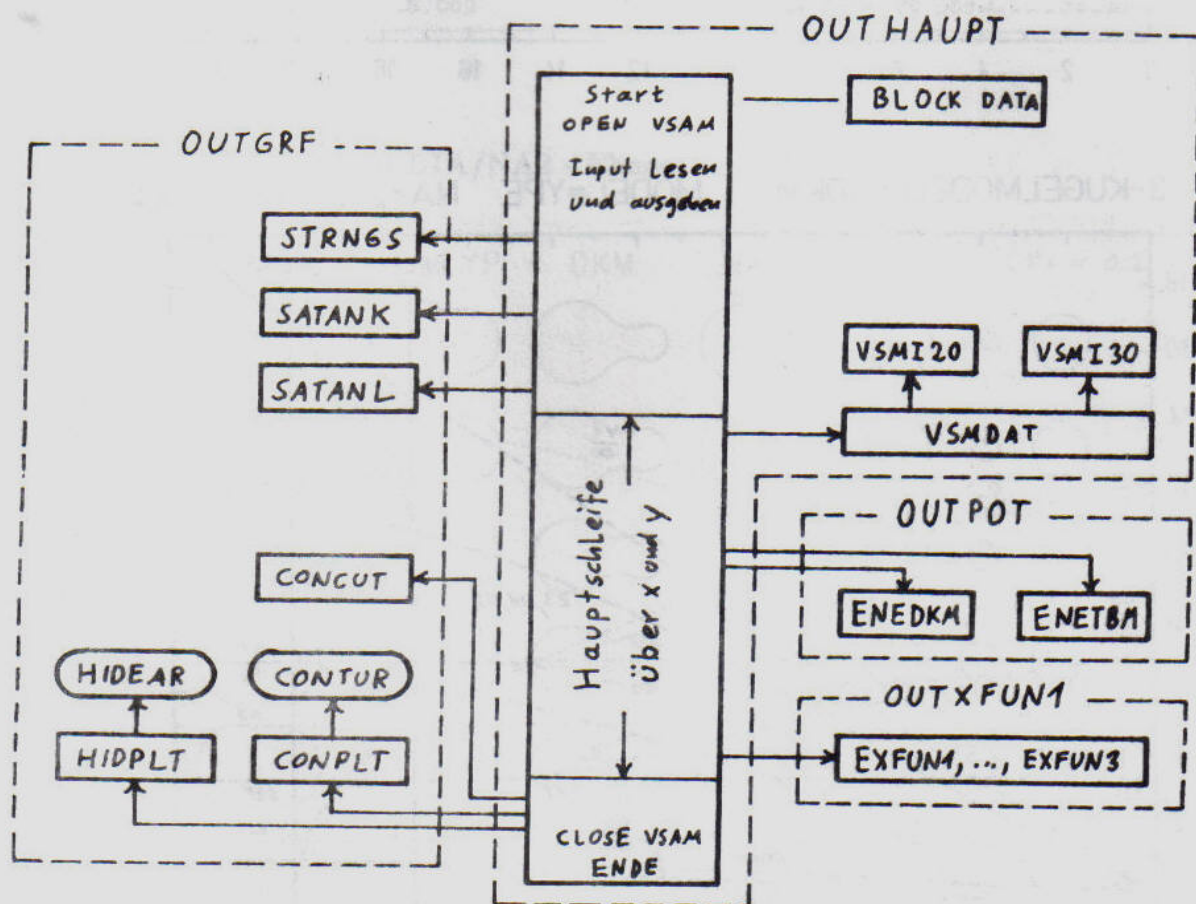
VSMDAT: Liest TBM oder DKM Daten von VSAM-Datei (Mit VSMI20 und VSMI30).

ENETBM,ENEDKM: Berechnet für das jeweilige Modell die potentiellen Energien.

EXFN1,.. Aufrufbare Funktionen zur weitergehenden Datenverarbeitung.

CONCUT: Berechnet automatisch passende Contur-Schnitthöhen und Stricharten.

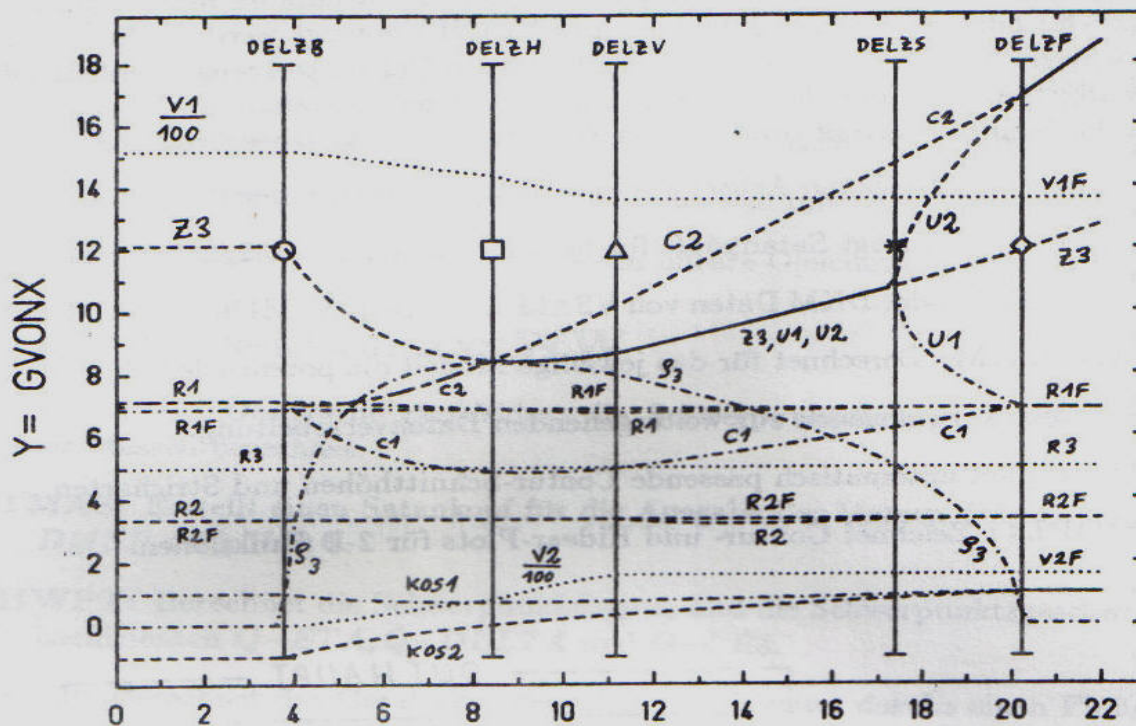
CONPLT,HIDPLT: Zeichnet Contur- und Hidear-Plots für 2-D Funktionen.



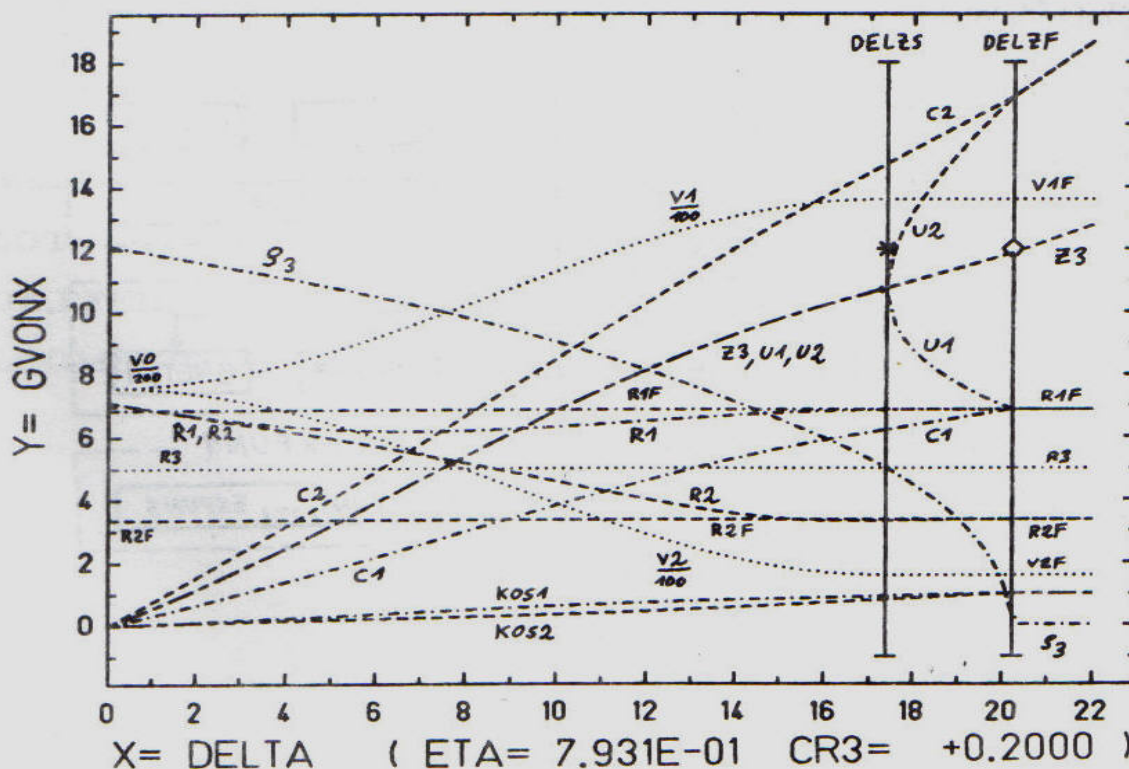
Graphiken

Geometrie $g(x)$ für die $^{232}\text{U} \rightarrow ^{24}\text{Ne} + ^{208}\text{Pb}$ Spaltung

3-KUGELMODELL: (TBM) MODEL=YPE NA=232 NA2= 24

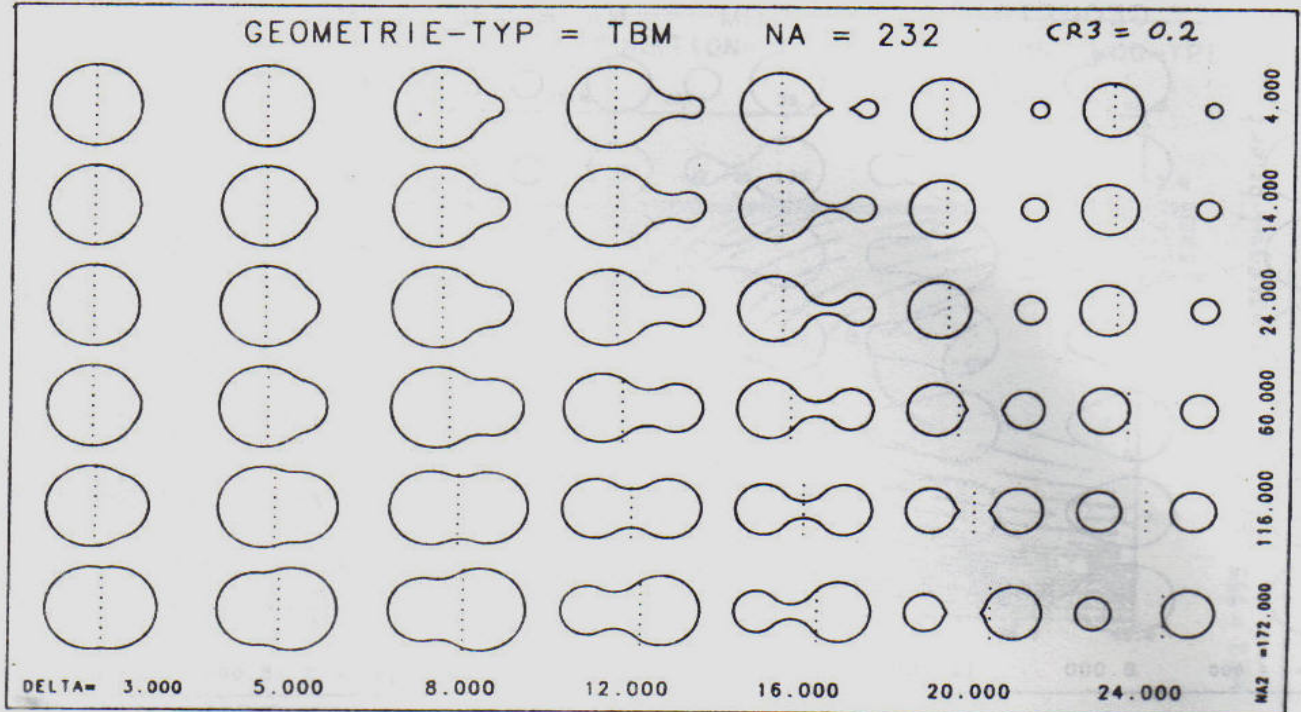


3-KUGELMODELL: (DKM) MODEL=YPE NA=232 NA2= 24

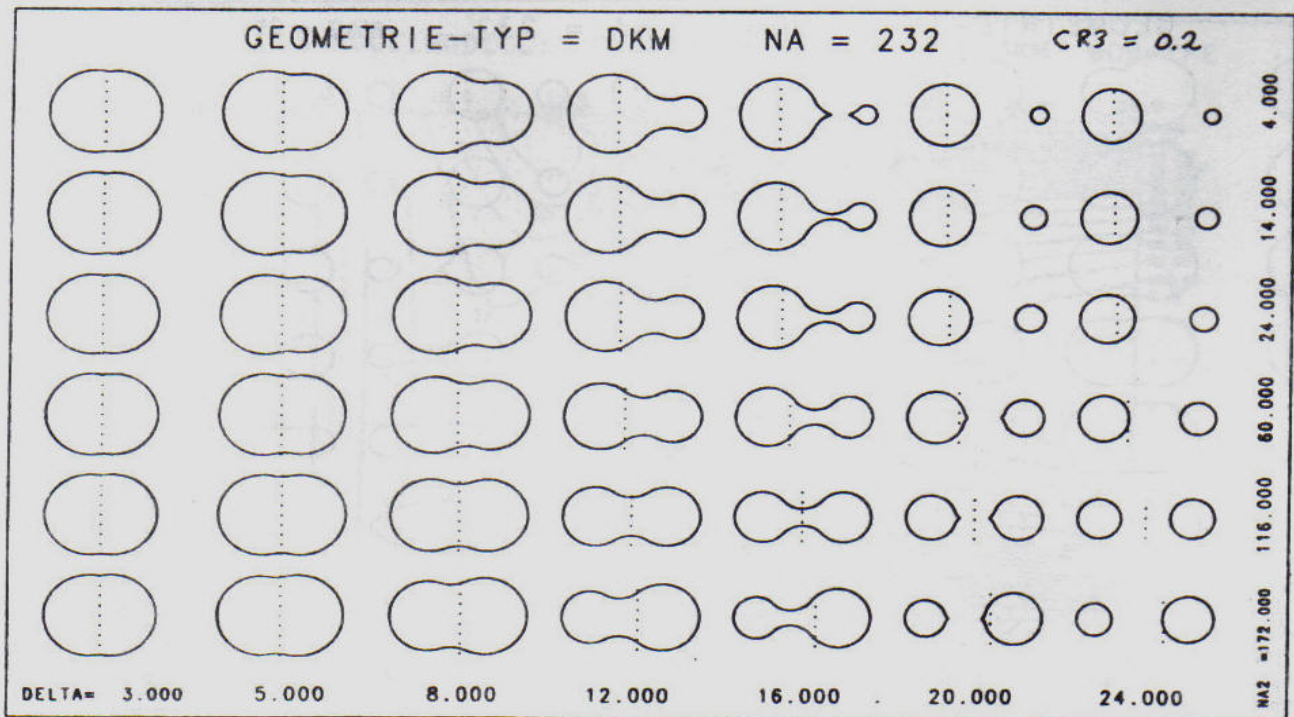


Kernformen (Shapes)

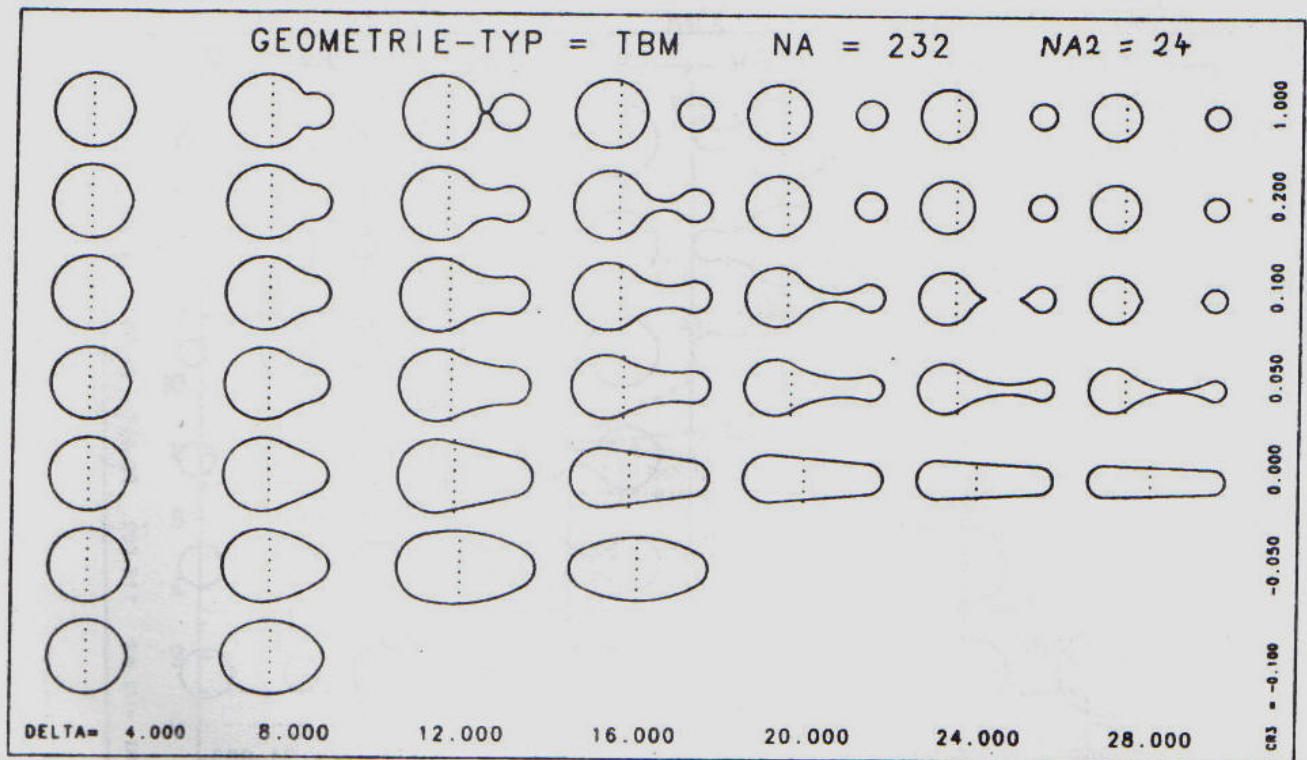
TBM-Shapes in der DELTA/NA2 - Ebene



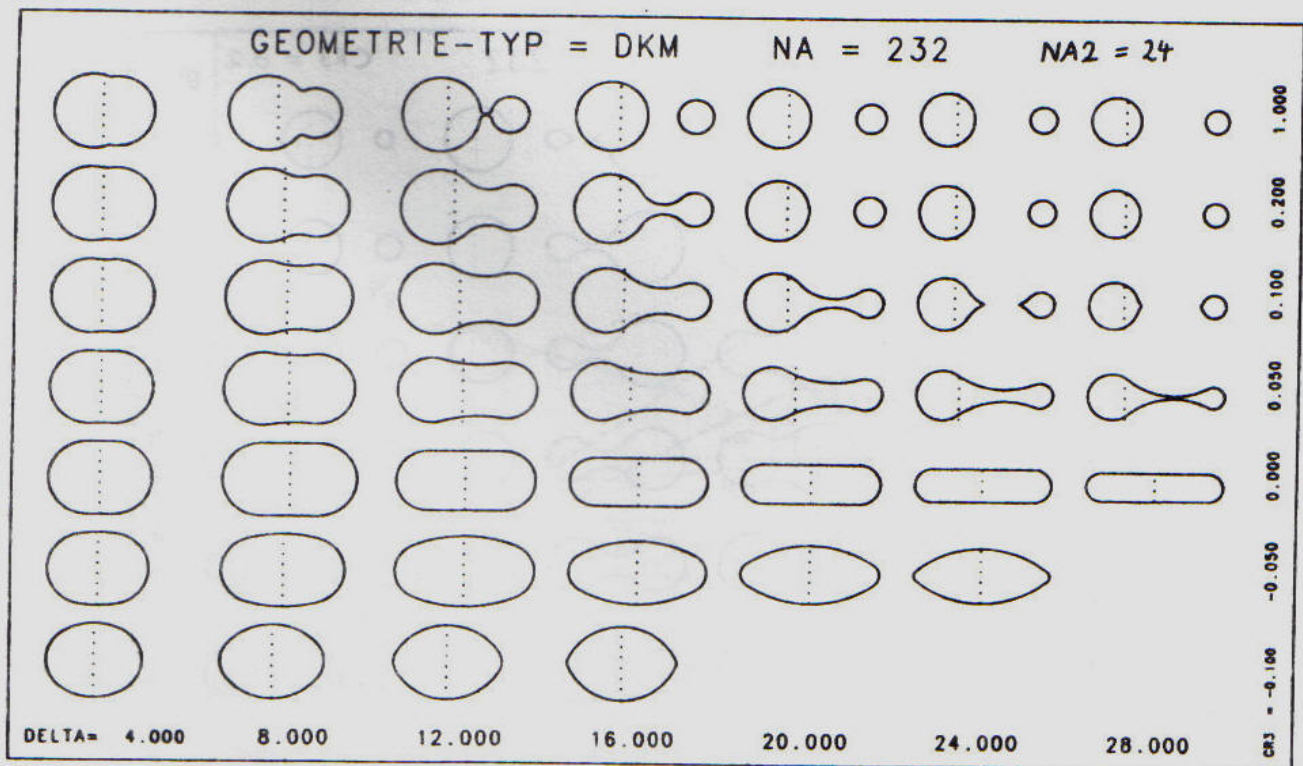
DKM-Shapes in der DELTA/NA2 - Ebene



TBM-Shapes in der DELTA/CR3 - Ebene

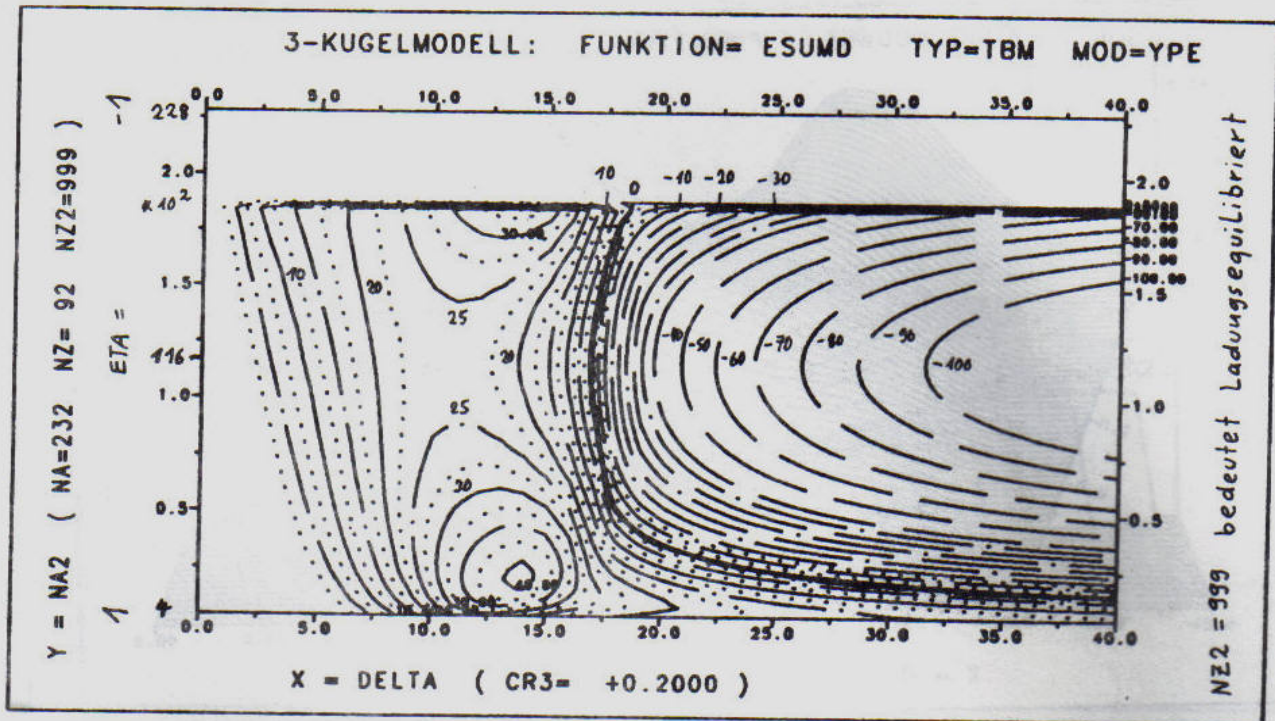


DKM-Shapes in der DELTA/CR3 - Ebene

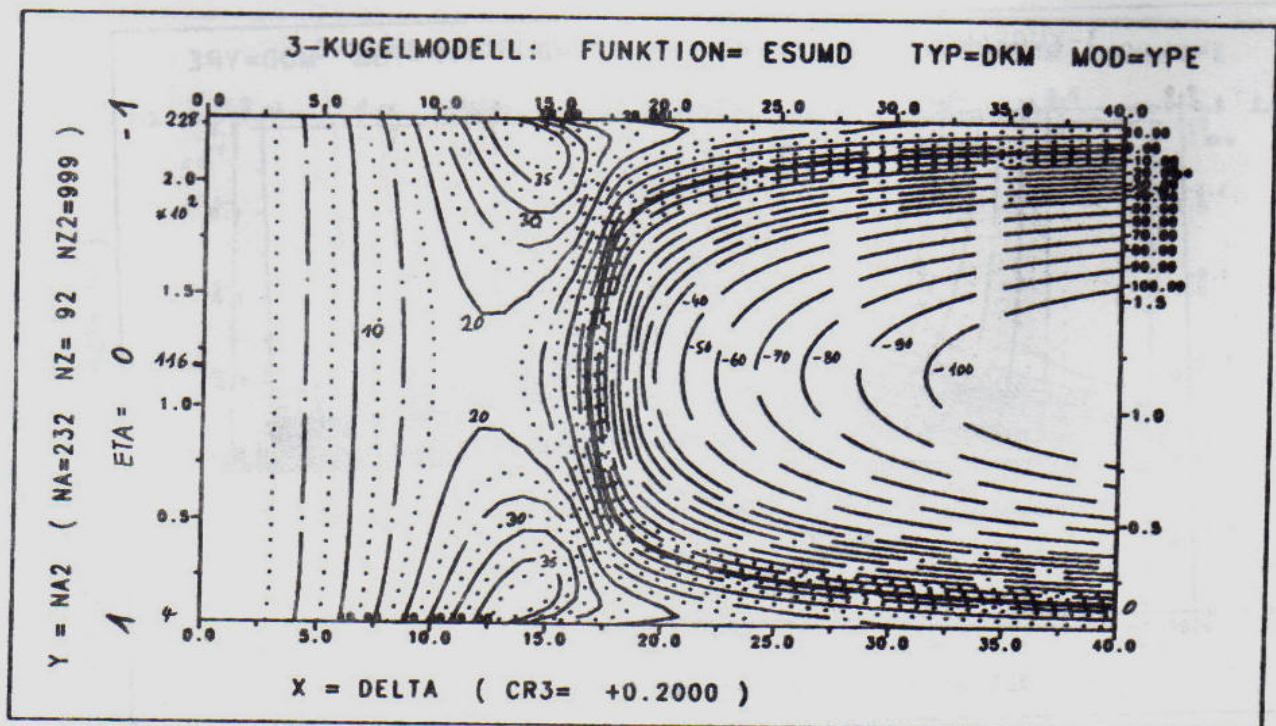


Die Potential-Energie-Fläche PEF (engl. PES)

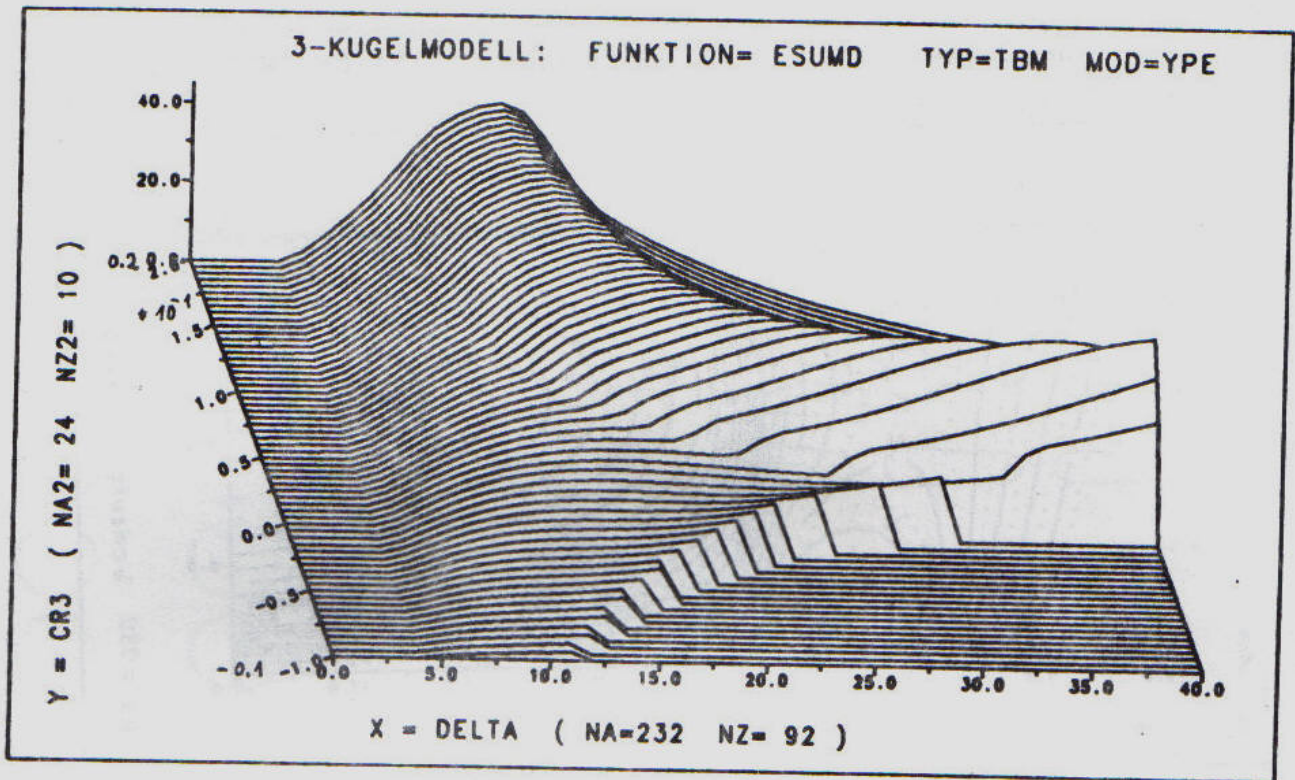
TBM - PEF in der DELTA/NA2 - Ebene [ist asymmetrisch]



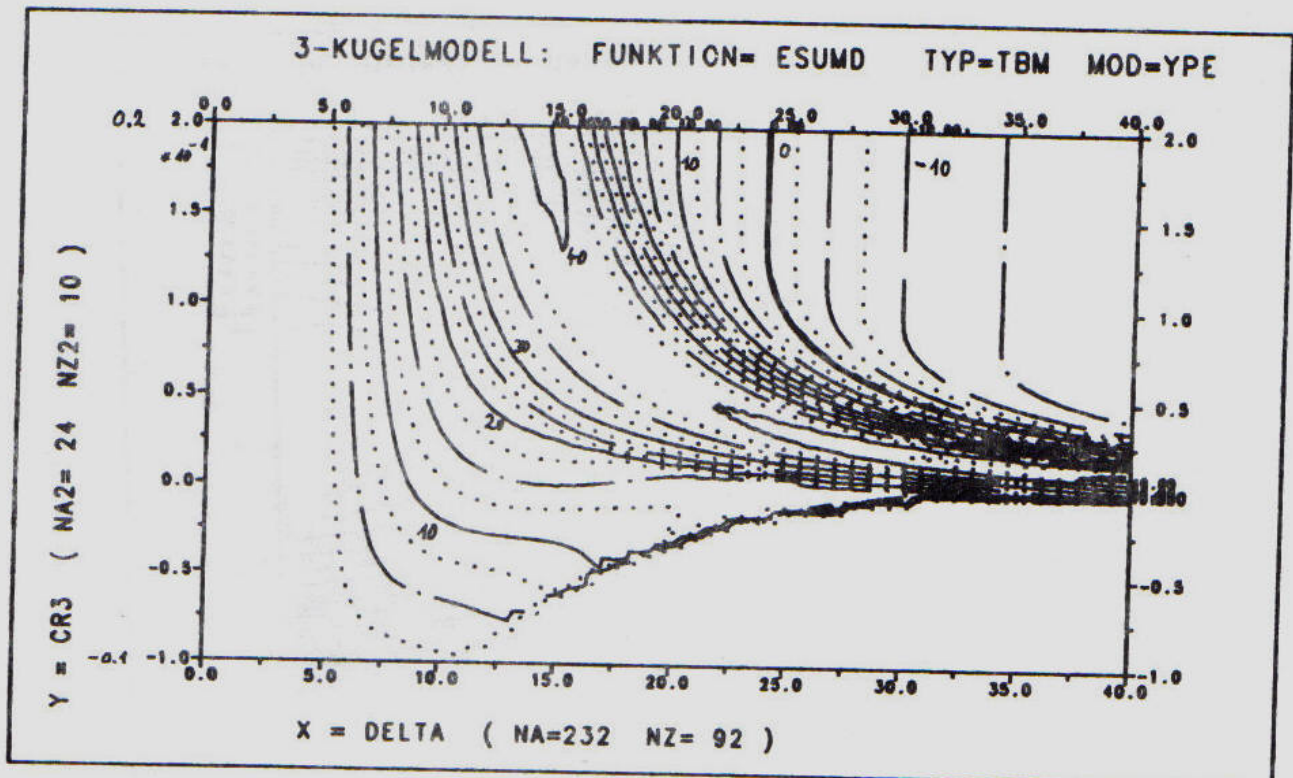
DKM - PEF in der DELTA/NA2 - Ebene [ist symmetrisch]



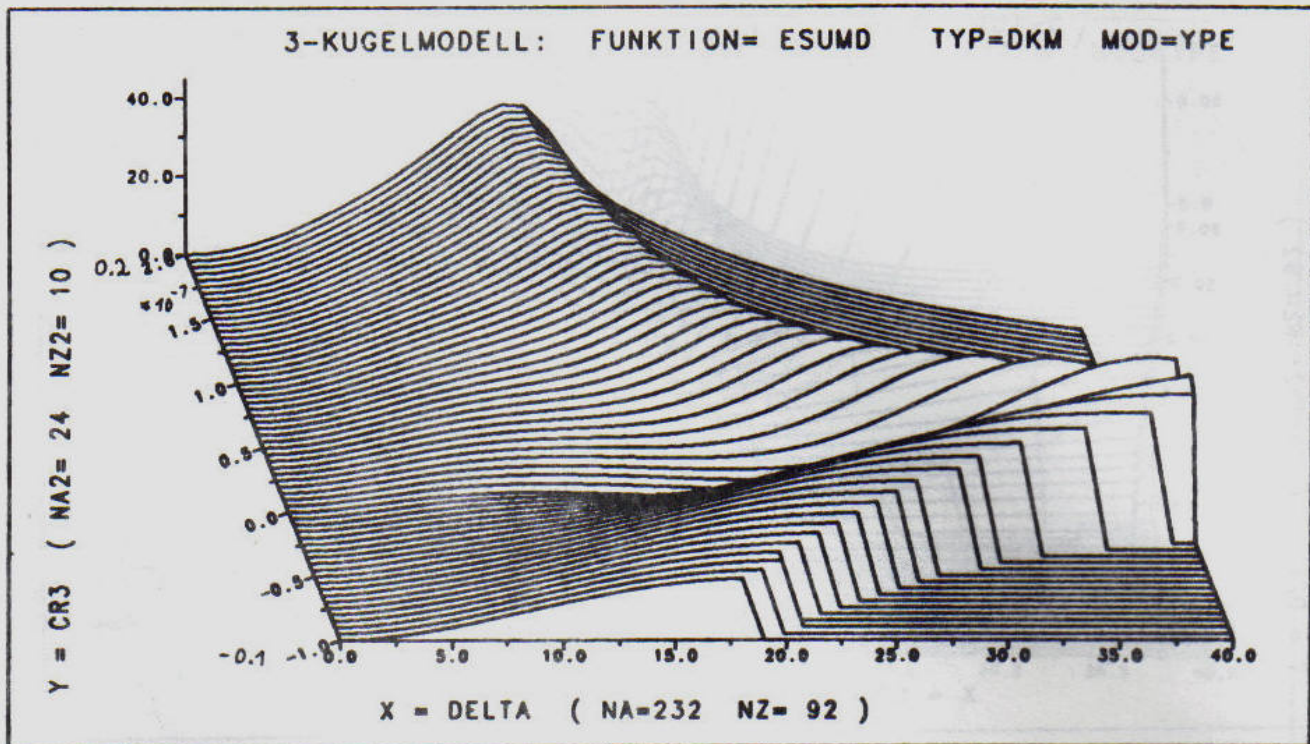
TBM - PEF in der DELTA/CR3 - Ebene (perspektivisch)



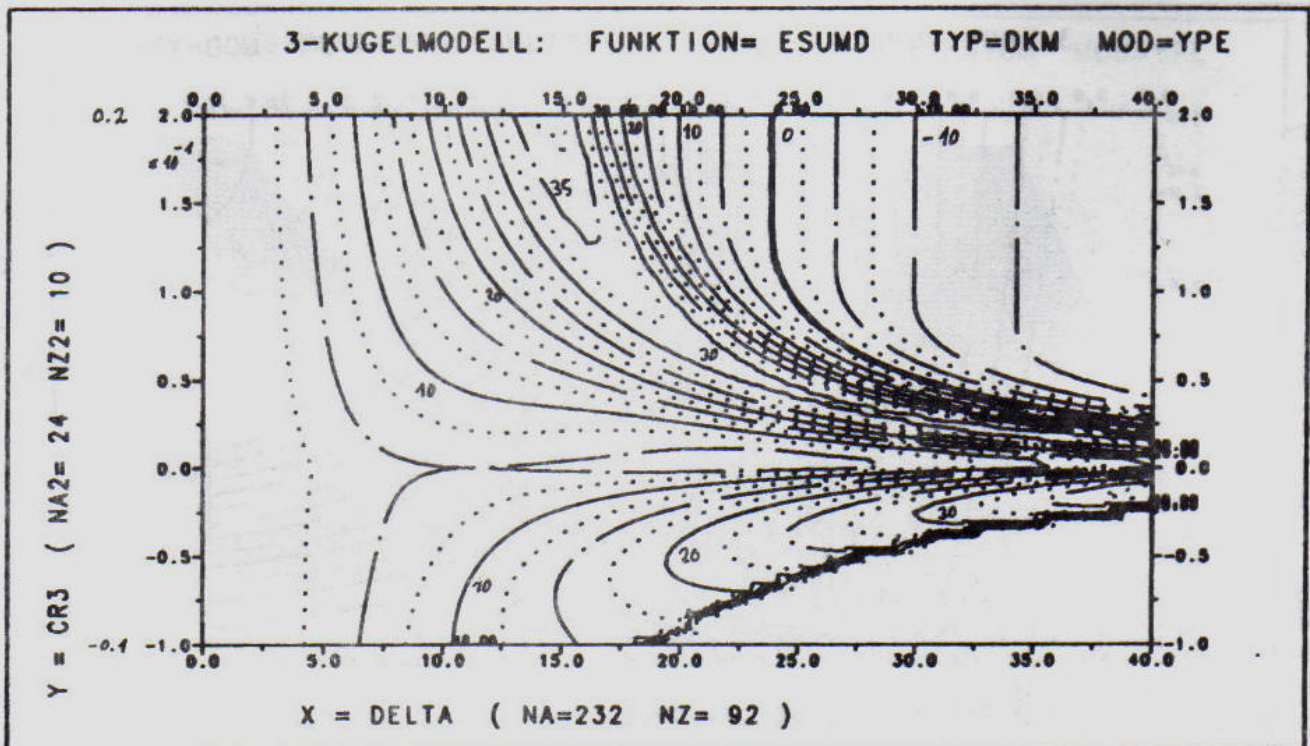
TBM - PEF in der DELTA/CR3 - Ebene (Contour-plot)



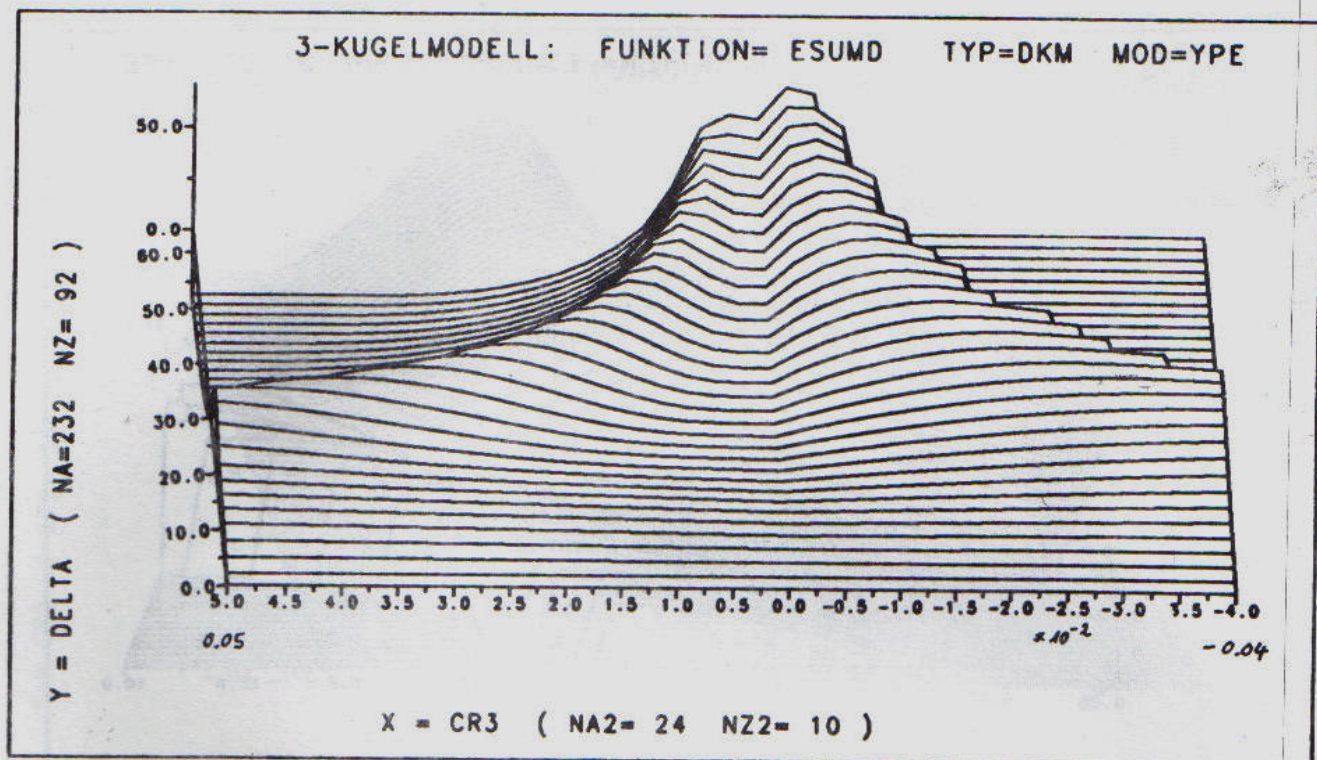
DKM - PEF in der DELTA/CR3 - Ebene (perspektivisch)



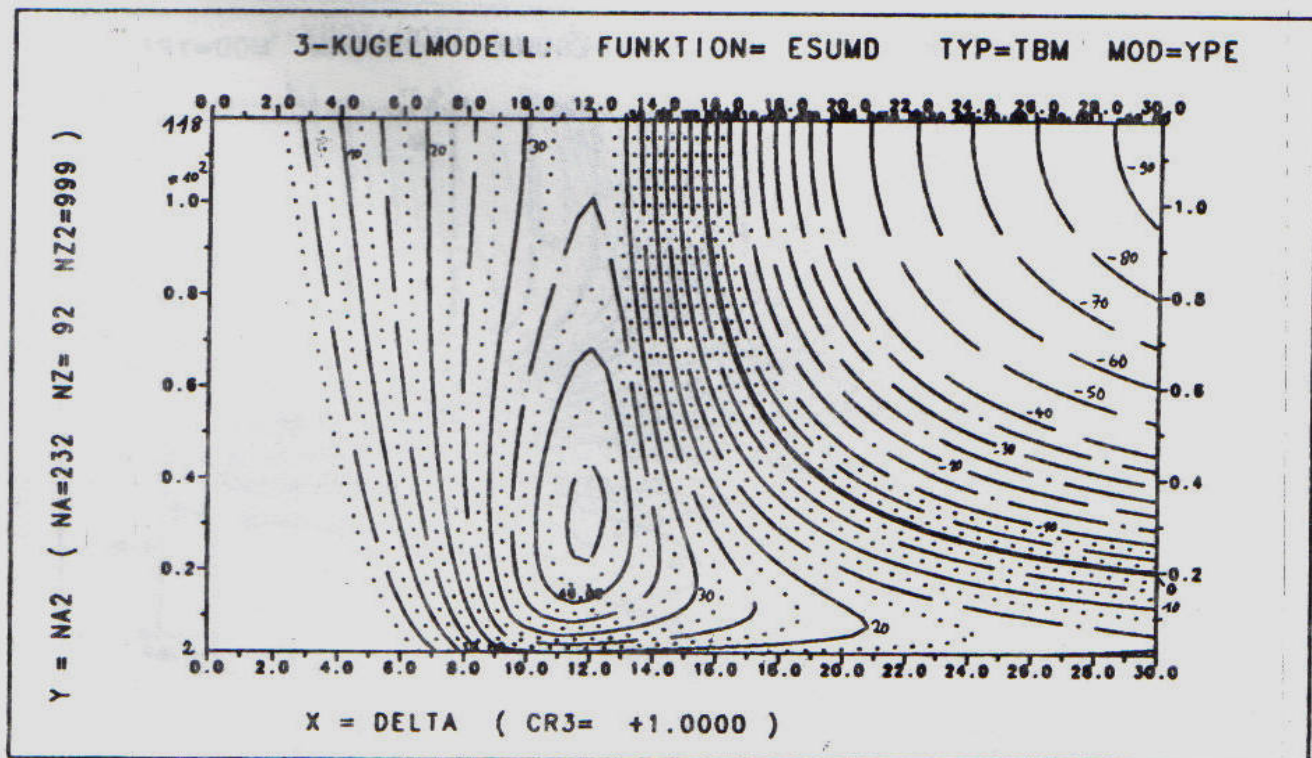
DKM - PEF in der DELTA/CR3 - Ebene (Contour-plot)



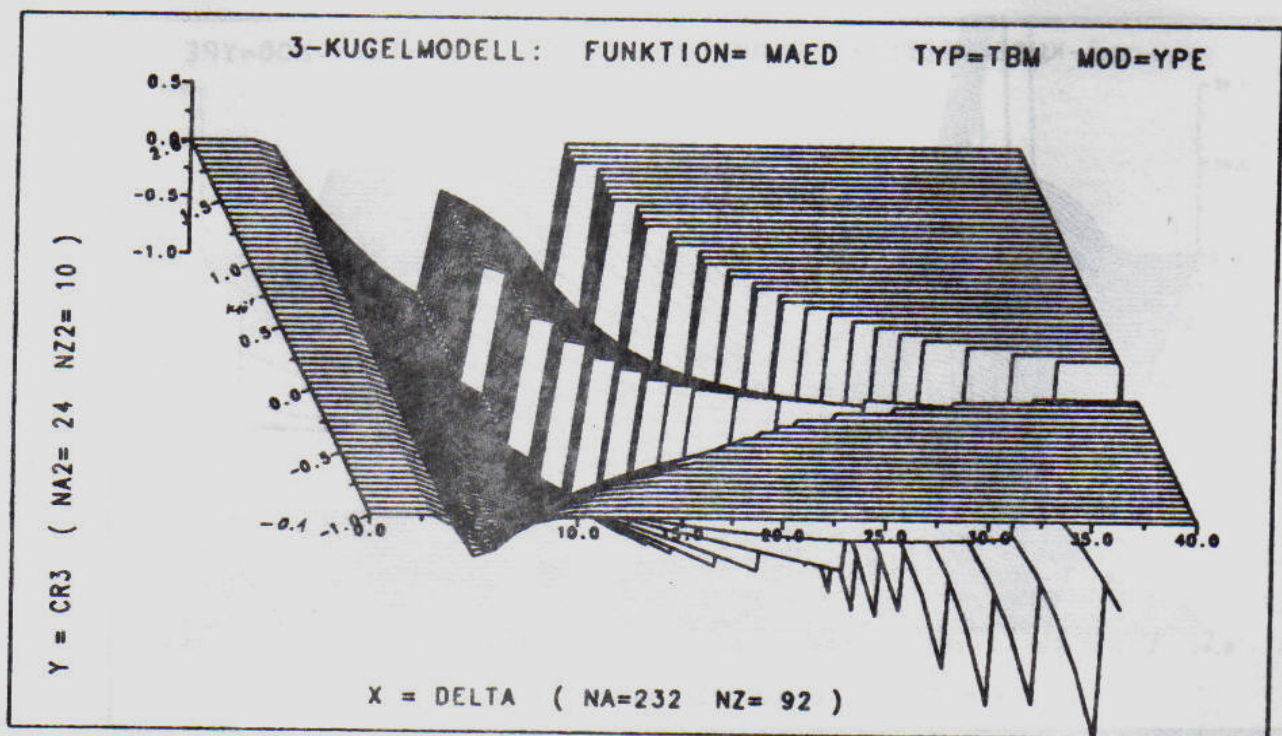
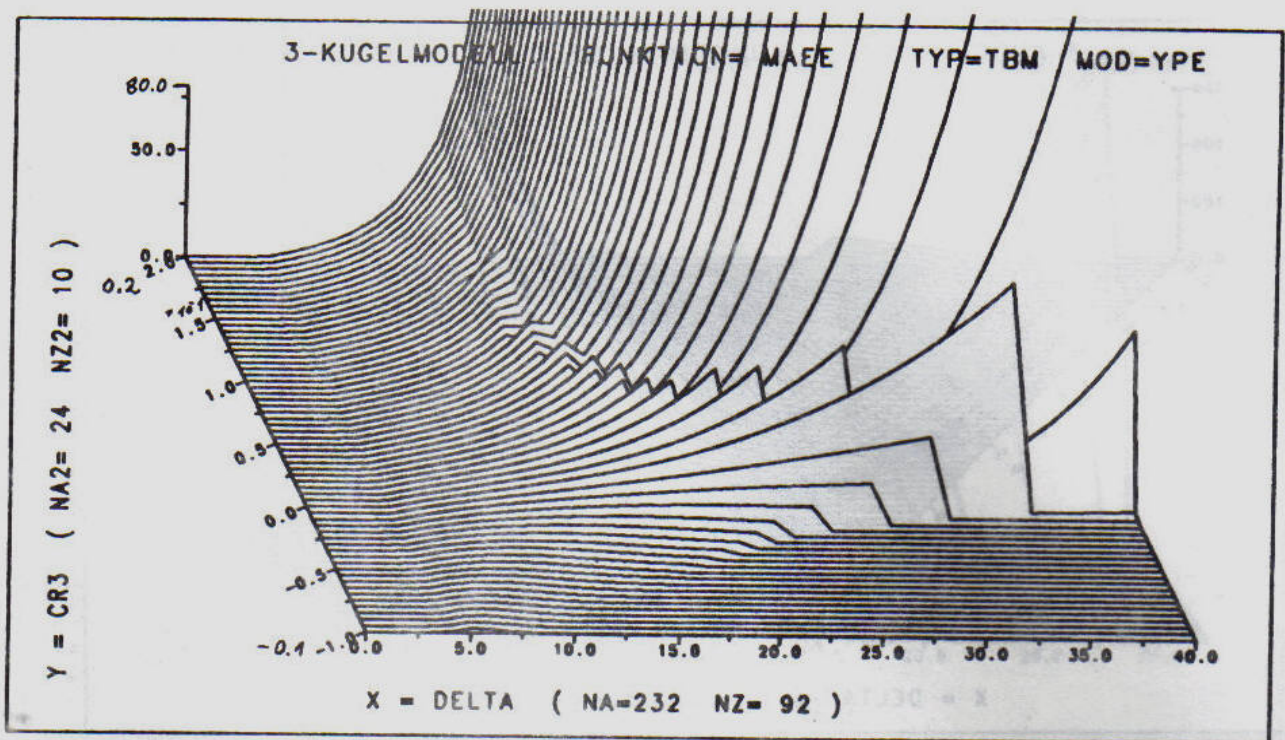
Blick in das seltsame DKM-Energietal um $CR3 = 0$. Es ist harmlos.



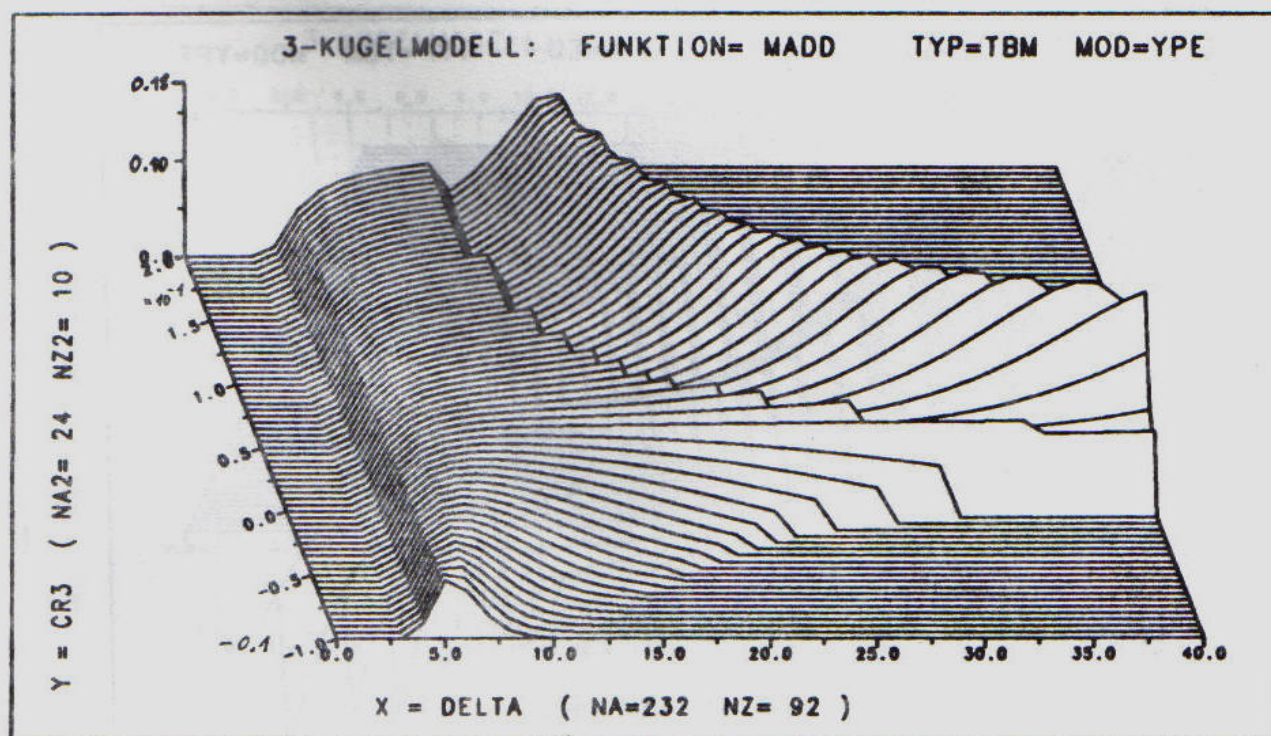
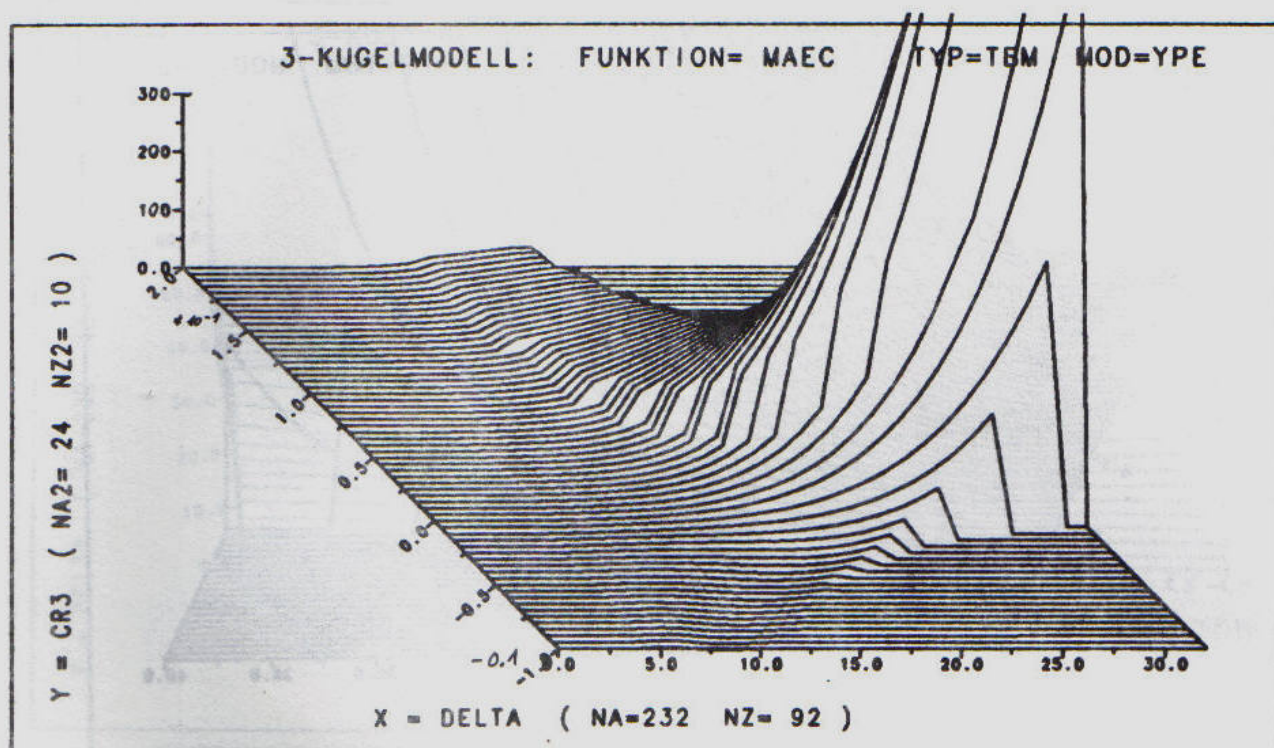
TBM - PEF in der DELTA/NA2 - Ebene für $CR3 = 1$

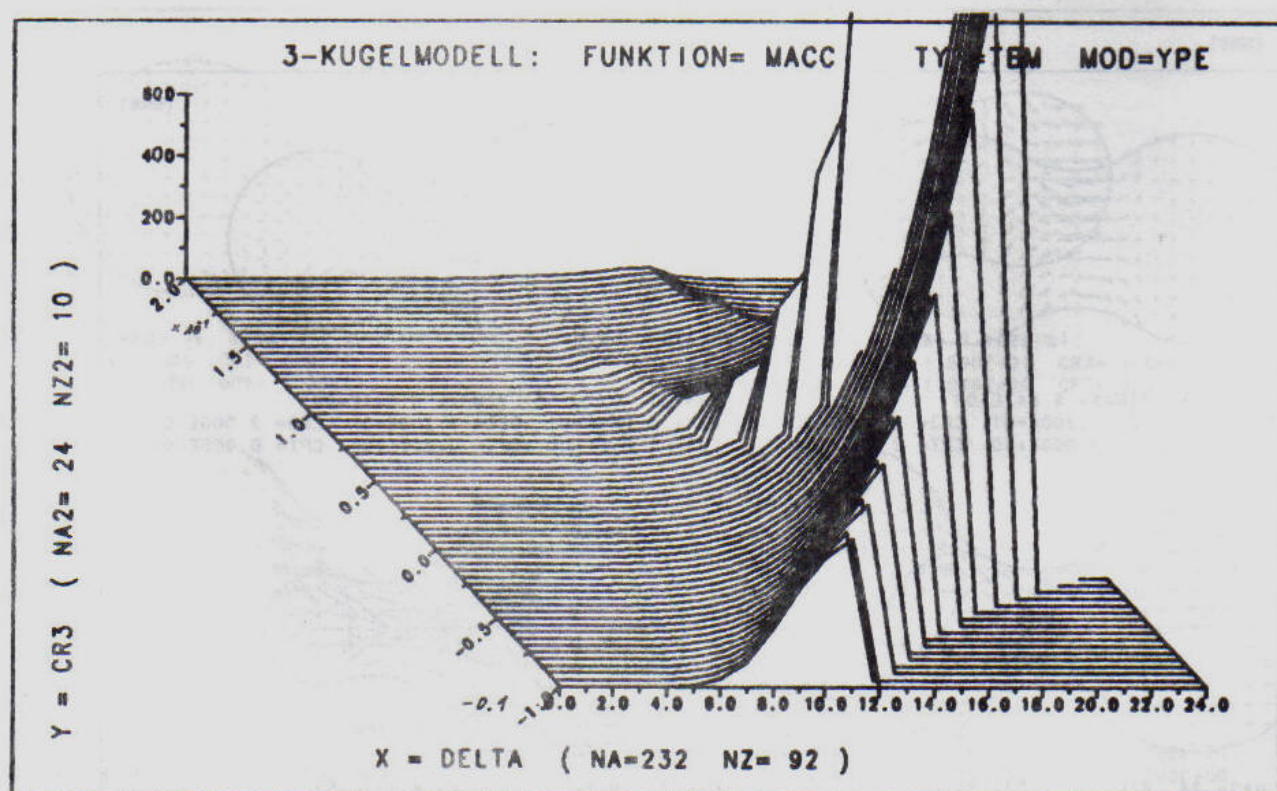
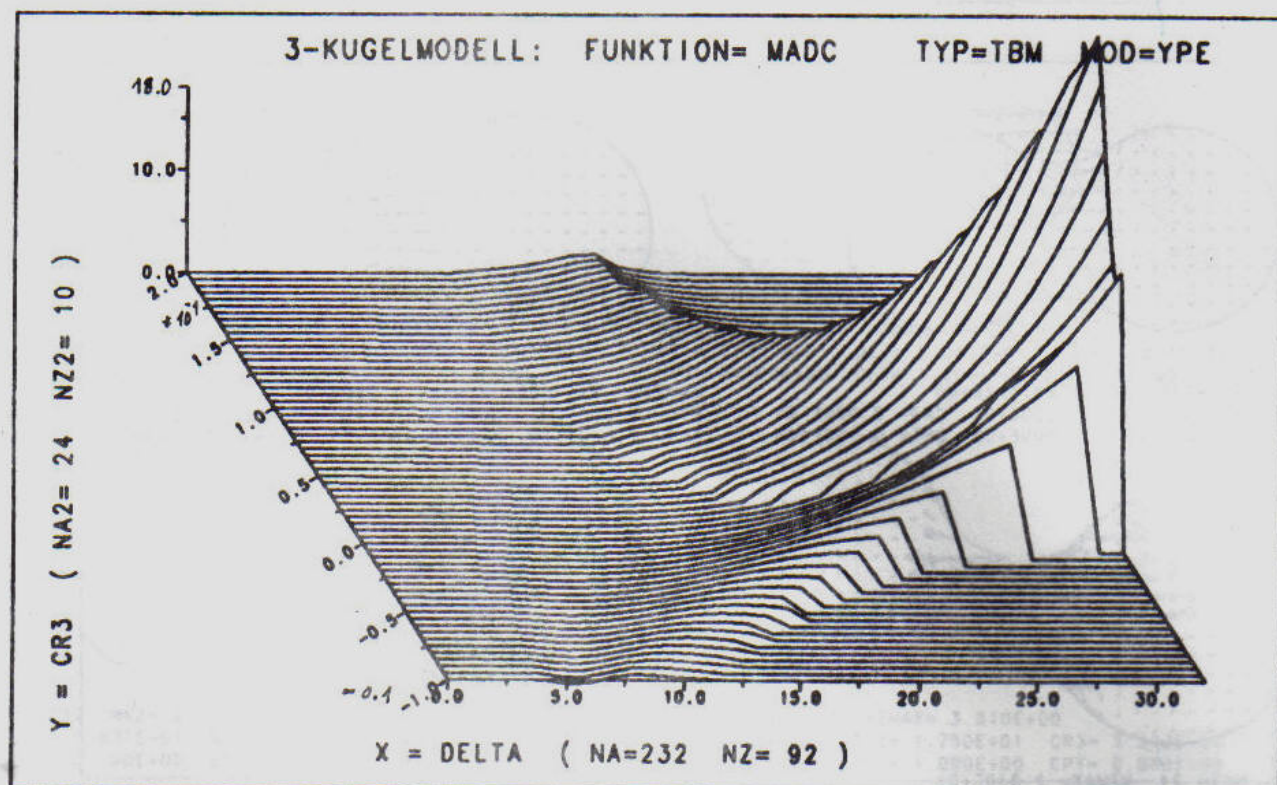


TBM-Massen in der DELTA/CR3 - Ebene

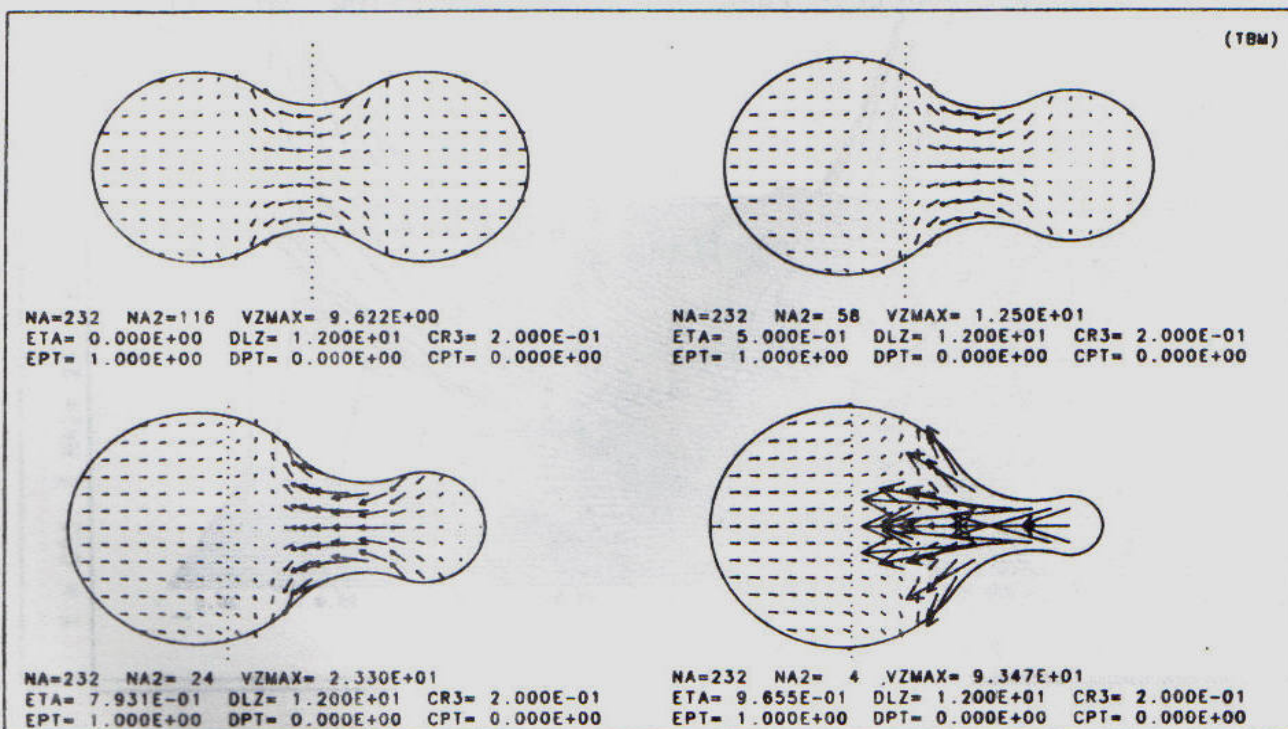


Die treppenförmigen Sprünge in der CR3-Richtung kommen vom Rechengitter.

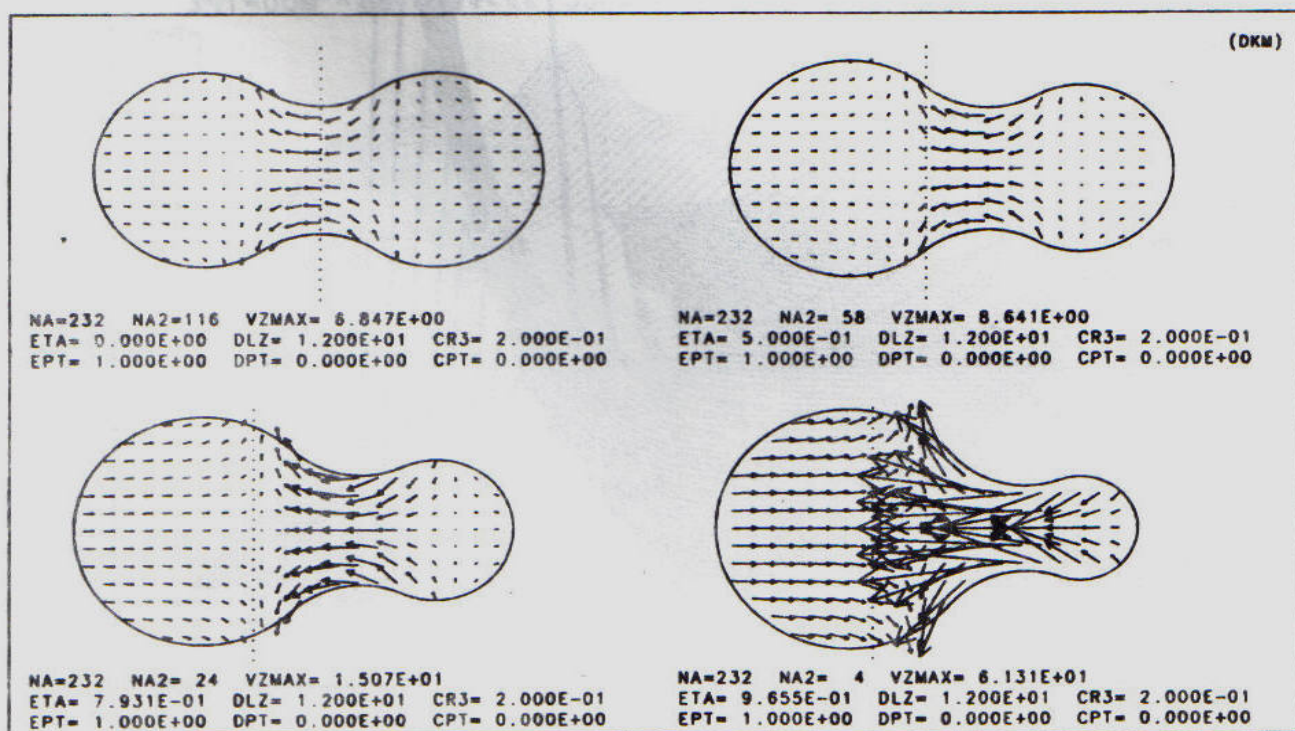




Flußgeschwindigkeitsfelder für TBM und DKM

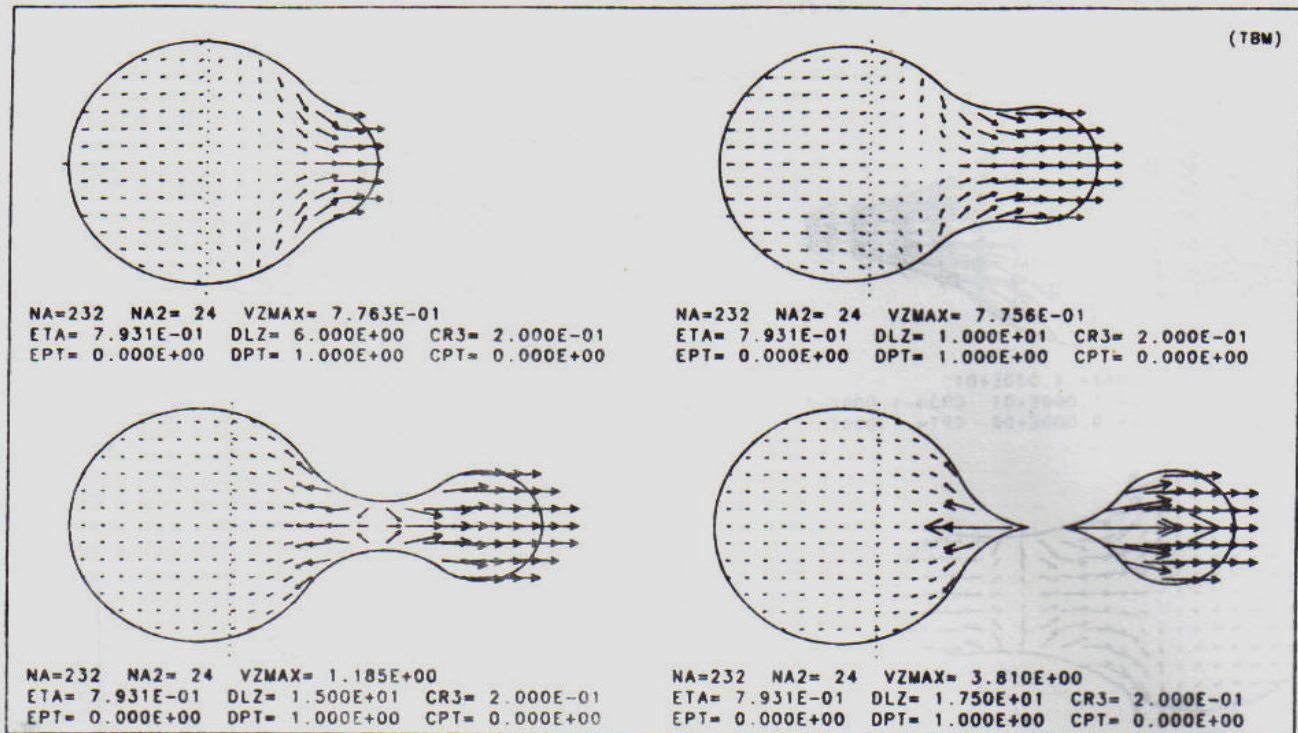


$$\dot{\eta} = \text{EPT} = \frac{d}{dt} \text{ETA} = 1$$

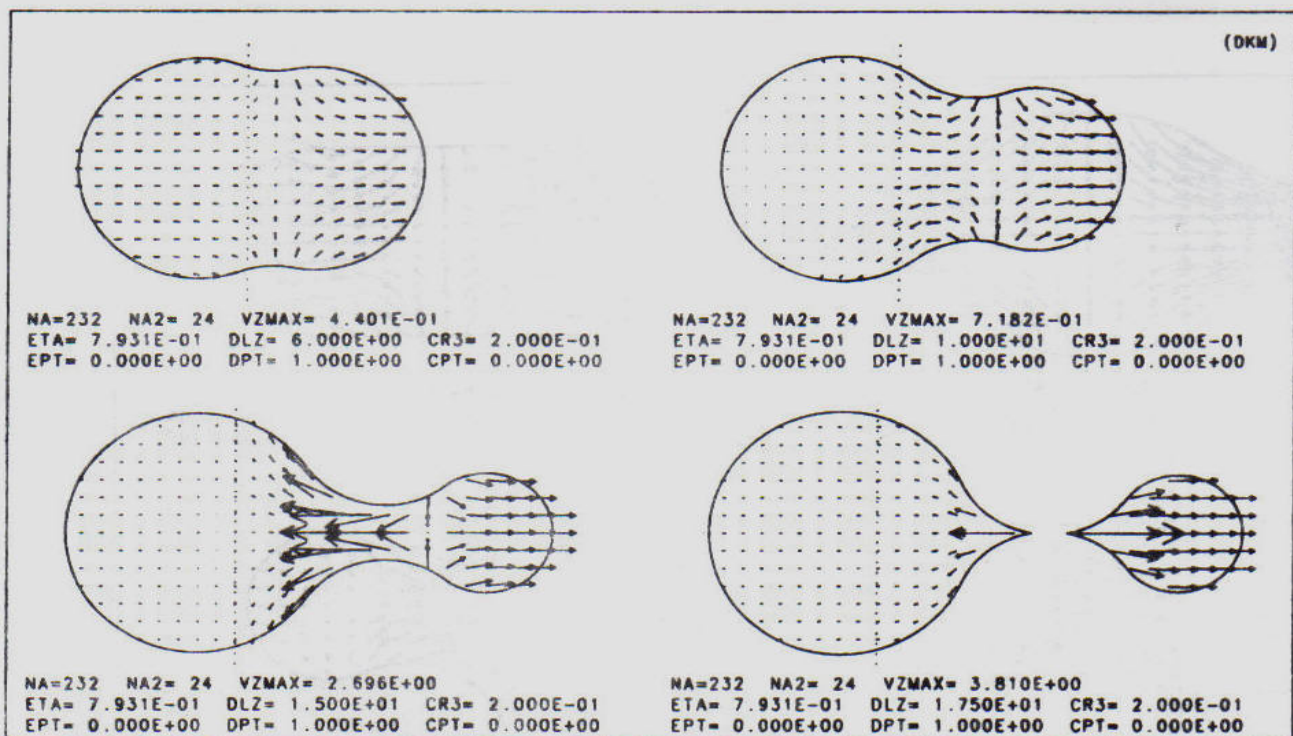


$$v_z(z) = (A_\eta - Q_\eta) \cdot \dot{\eta} + (A_D - Q_D) \cdot \dot{D} + (A_\zeta - Q_\zeta) \cdot \dot{\zeta}$$

$$v_\rho(z, \rho) = \rho \cdot (C_\eta \cdot \dot{\eta} + C_D \cdot \dot{D} + C_\zeta \cdot \dot{\zeta})$$



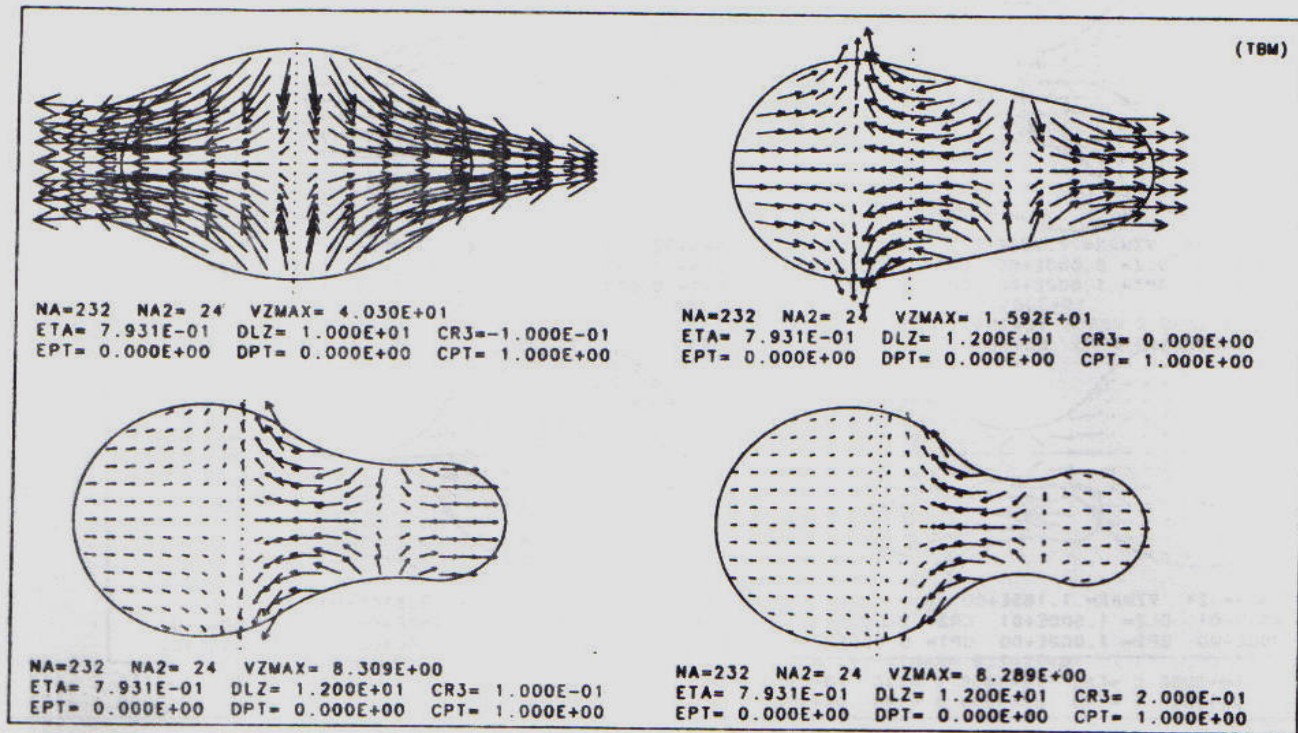
$$\dot{D} = \text{DPT} = \frac{d}{dt} \text{DELTA} = 1$$



$A_q(z)$ und $C_q(z)$ sind die Werner-Wheeler Koeffizienten.

$Q_q = \frac{\partial z_s}{\partial q}$ sind die Schwerpunktbewegungs-Koeffizienten.

($q = \eta, (D = DELTA), (\zeta = CR3)$)



$$\dot{\zeta} = CPT = \frac{d}{dt} CR3 = 1$$

