

Wolfgang Renner präsentiert:

Erstes Palaver über:

Die Berechnung der Energieverhältnisse eines sich spaltenden Atomkernes

Für diesen Zweck braucht man ein geeignetes Modell der Kernmaterie:

I Kernmodelle welche voll quantenmechanisch die Verhältnisse in einem Kern auf Mesonenaustausch-Prozesse zurückführen sind zwar interessante Studienobjekte, jedoch für unsere Zwecke ungeeignet.

Die numerische Berechnung ist, trotz vielen Vereinfachungen, sehr aufwendig und die Resultate zeigen nur grob die experimentellen Daten.

II Nimmt man an, daß es im Kern ein mittleres Potential gibt, für das es Einteilchen-Lösungen der Schrödinger-Gleichung gibt, ergibt sich das Schalenmodell (Nilson-Oszillator). Das Schalenmodell erlaubt beispielsweise die korrekte Beschreibung von "magischen Zahlen". Es eignet sich jedoch nicht zur Beschreibung der gesamten Kernbindungsenergie.

III Die gesamte Kernbindungsenergie wird am besten von nicht quantenmechanischen Tröpfchenmodellen wiedergegeben (Weizsäcker Formel). Man bezeichnet dies auch als makroskopisches Kernmodell.

IV Nimmt man zu diesem "makroskopischen" Anteil eine "mikroskopische" Korrektur, welche sich aus dem Schalenmodell ergibt, erhält man ein Kernmodell welches eine recht genaue und schnelle Berechnung von Kernenergien erlaubt.

Mein Vortrag wird sich im folgenden nur noch mit dem makroskopischen Anteil beschäftigen, welcher den quantitativen Hauptbeitrag liefert und auf einem verfeinerten Tröpfchenmodell mit zusätzlichen Korrekturtermen beruht.

Makroskopische Kernmodelle

Bei diesen Modellen beschreibt man die Kernmaterie vom Prinzip wie eine homogene, inkompressible und geladene Flüssigkeit.

Analog zur Hydrostatik betrachtet man zunächst einen Volumen- und Oberflächenterm und die Coulombenergie. Man erhält damit die Bethe-Weizsäckerformel unter folgenden Voraussetzungen:

- ① Das Volumen sei proportional der Nukleonenzahl A : $V = \frac{4\pi}{3} R^3 = \frac{4\pi}{3} r_0^3 A$
- ② Das Kerntropfchen habe Kugelform, d.h. Energieterme proportional A^p
- ③ Empirisch begründet wird ein Asymmetrieglied in die Volumenkonstante eingeführt. Qualitativ kann man dies mit einem Fermigasmodell verstehen.
- ④ Ebenfalls empirisch wird noch ein Paar kraftterme eingeführt.

Theoretisch wird die Paar kraft u. anderem mit der BCS-Theorie beschrieben.

$$\Rightarrow E_B = -a_v(1 - \kappa_v I^2) \cdot A + a_s \cdot A^{2/3} + a_c \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} + \begin{cases} +a_p A^{-1/2} & uu \\ 0 & u\bar{u} \\ -a_p A^{-1/2} & \bar{u}\bar{u} \end{cases}$$

$I = \frac{N-Z}{A}$ E_v E_s E_c $E_{\text{Rest}} = \text{Paarenergie}$

Die Konstanten a_v, κ_v, a_s, a_c und a_p werden durch Anpassen an Meßdaten von Kerngrundzustandsmassen bestimmt. Für $A \geq 30$ werden dann die Bindungsenergien auf etwa 1% genau wiedergegeben.

Verformungen oder Energieverhältnisse während Kernreaktionen können jedoch nicht beschrieben werden. In diesen Fällen sind insbesondere die Oberflächenenergie E_s und Coulombenergie E_c ausschlaggebend.

Darum wähle man: $E_c = \frac{q_0^2}{2} \iint_{VV} \frac{d^3r_1 d^3r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ und $E_s = c_s \cdot S$

V Volumen
 S Oberfläche

Mit dieser Verbesserung können jetzt deformierte Kerne beschrieben werden. Kräfte zwischen zwei nahen Kernen (Streuexperimente) können nicht beschrieben werden. Die Kernkräfte nur auf die Oberfläche zurückzuführen ist unbefriedigend. -2-

-3-

Graphiken zur Bethe - Weizsäckerformel :
(Tröpfchenmodell)

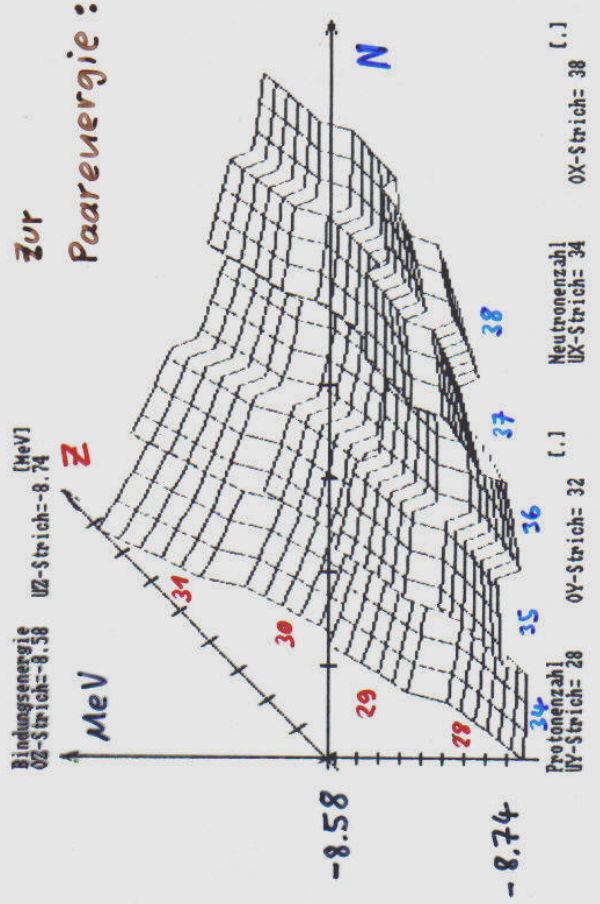
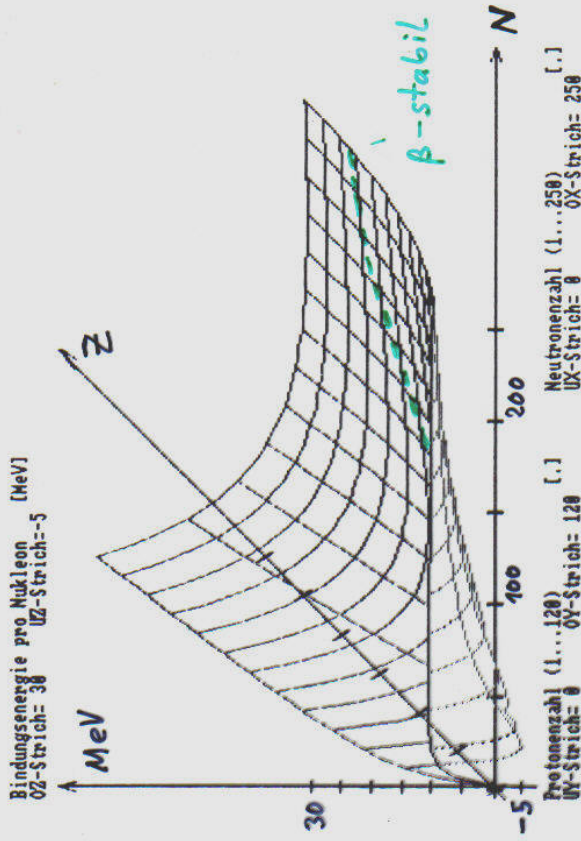
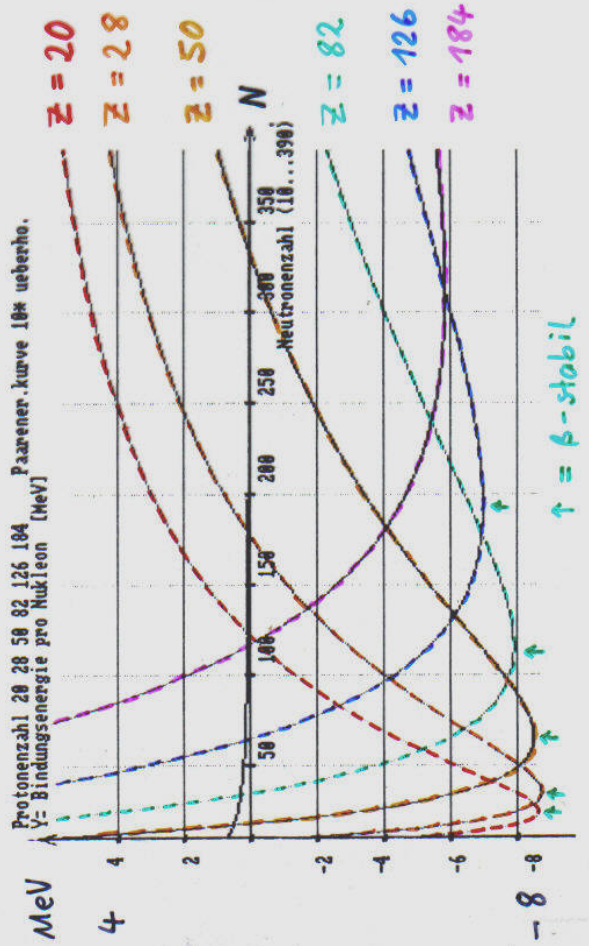
$$E_B = -15.85 \cdot (1 - 1.46 \cdot I^2) \cdot A + 18.34 \cdot A^{2/3} + 0.71 \cdot Z \cdot A^{-1/3} + 11.46 \cdot A^{-1/2} \cdot \{ +1, 0, -1 \}$$

$$I = \frac{N - Z}{A}$$

00, 09, 99

[Alle drei Graphiken zeigen Bindungsenergie pro Nukleon]

Z - Schritte :



Um (elastische) Streuung und eine bessere Formabhängigkeit der Kerneenergie behandeln zu können, wählen wir für die Energie der Kernkraft einen Ausdruck analog zur Coulombenergie. Jedoch mit einer kurzreichweitigen Yukawafunktion:

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

In dem Ausdruck für die Kugel findet man u.a. einen Volumenterm und einen quadratischen Oberflächenterm.

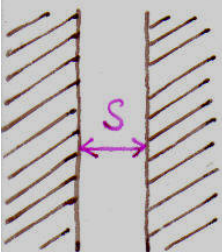
Mit $-\frac{2}{3} \cdot \frac{c_s}{a r_0^2} R^3 = -\frac{2}{3} \frac{c_s}{a r_0^2} \cdot r_0^3 A = -\frac{2}{3} \frac{r_0}{a} \cdot c_s \cdot A$ ergibt sich:

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

Für $a \rightarrow 0$ ergibt sich daraus der Oberflächenterm der Weizsäckerformel.

Dies 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 Wechselwirkungsenergie \mathcal{E} zwischen zwei quasi-unendlichen Schichten aus Kernmaterie soll für $s=0$ ein Minimum haben. Für die Funktion $E_Y(a, c_s)$ ergibt sich als W.W.energie \mathcal{E} als W.W.energie:

$$\mathcal{E}_Y(a, c_s, s) = - \frac{c_s}{2\pi r_0^2} \cdot e^{-s/a} \quad \text{Welche kein Minimum bei } s=0 \text{ hat.}$$

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

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

Daraus ergibt sich folgende Relation: $\frac{c_{s1}}{a_1} = \frac{c_{s2}}{a_2}$

Die effektive Oberflächenkonstante ist $c_s = c_{s1} - c_{s2}$. Dies 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 der Oberflächenenergie zu :

$$E_s = E_Y(a_1, c_{s_1}) - E_Y(a_2, c_{s_2}) = \frac{a_1 E_Y(a_1, c_s) - a_2 E_Y(a_2, c_s)}{a_1 - a_2}$$

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 :

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

gibt's :

$$E_s = \frac{c_s}{8\pi^2 r_0^2 a^4} \iint_{VV} \left[2 \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} - e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} \right] d^3 r_1 d^3 r_2$$

Diese verallgemeinerte Oberflächenenergie erfüllt nun alle Forderungen. Man spricht von dem "Yukawa-plus-exponential Modell".

Für einen kugelförmigen Kern erhält man :

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

Der führende Term ist wieder die gewohnte Oberflächenenergie.

Diffuse Oberfläche

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

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

Will man mit diesem Ansatz beliebige Kernformen behandeln und weitere Rechnungen durchführen (z.B. Coulombenergie) stößt man jedoch auf Schwierigkeiten.

Elegant und Problemlos erzeugt man die Ladungsdichte durch Faltung mit einer Yukawafunktion über eine homogene Ladungsdichte in Kernform :

$$\rho(\vec{r}_1) = \frac{\rho_0}{4\pi a^3} \int_V \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} d^3 r_2$$

$V \hat{=}$ scharfes Kernvolumen
 $a =$ Unschärfe Parameter

In unserem Kernmodell wählen wir die Ladungsdichte in dieser Weise diffus gemacht.

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

$$V(\vec{r}_1) = \frac{-V_0}{4\pi a^3} \int_V \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} d^3 r_2$$

Für ein kugelförmiges Volumen erhält man explizit:

$$V_i(r) = -V_0 \cdot \left[1 - \left(1 + \frac{R}{a}\right) \cdot e^{-\frac{R}{a}} \cdot \frac{\sinh(r/a)}{r/a} \right] \quad r \leq R$$

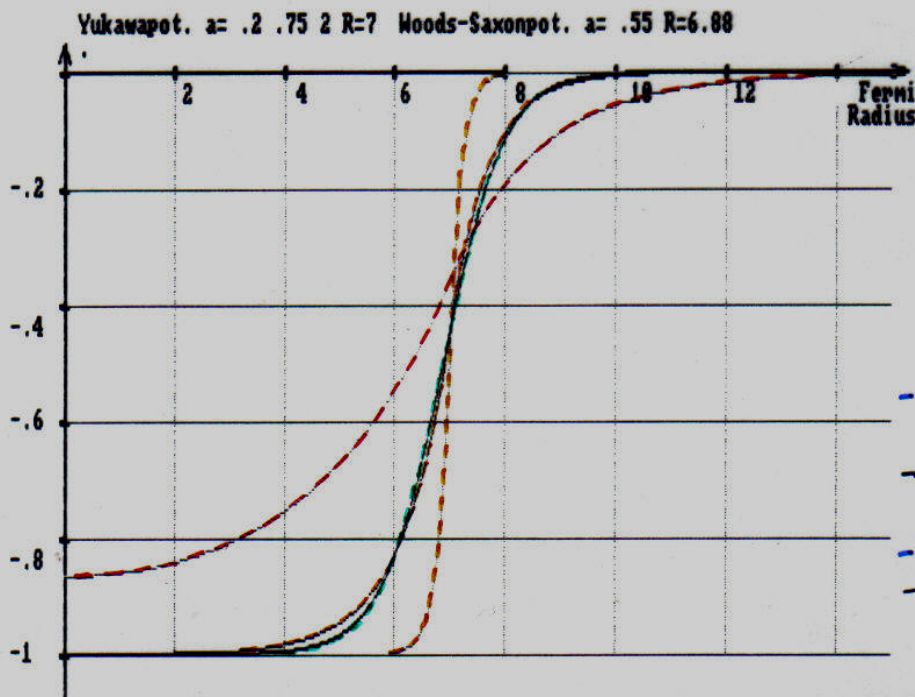
$$V_a(r) = -V_0 \cdot \left[\frac{R}{a} \cosh\left(\frac{R}{a}\right) - \sinh\left(\frac{R}{a}\right) \right] \cdot \frac{e^{-r/a}}{r/a} \quad r > R$$

Für dieses Potential gilt: $d \approx a \cdot \ln(5)$ und $r_{1/2} \approx R - \frac{a^2}{R}$

Bei dem Woods-Saxon Potential $V(r) = \frac{-V_0}{1 + e^{\frac{r-R_w}{a_w}}}$

gilt: $d = a_w \cdot \ln(9)$ und $r_{1/2} = R_w$

$$\Rightarrow a_w = \frac{\ln(5)}{\ln(9)} \cdot a \quad \text{und} \quad R_w = R - \frac{a^2}{R}$$

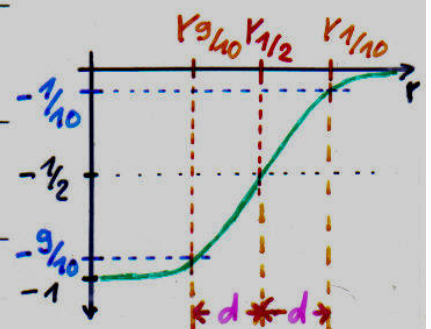


Yukawapot. $R = 7$

$a = .2$ $a = .75$ $a = 2$

Woods-Saxonpot.

$R_w = 6.88$ $a_w = .55$



Die Berechnung der Coulomb Energie

Mit der Ladungsdichte:
$$s(\vec{r}_i) = s_0 \int_V g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) d\vec{r}_j$$

$$E_c = \frac{1}{2} \iint_{\infty\infty} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{s(\vec{r}_1)s(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{s_0^2}{2} \iint_{VV} d\vec{r}_3 d\vec{r}_4 \iint_{\infty\infty} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot g(|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|) \cdot g(|\vec{r}_2 - \vec{r}_4|)$$

Das bekannte Faltungstheorem auf drei Funktionen erweitert:

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

Und: $f_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Rightarrow f(\vec{k}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{k^2}$ $f_{2,3}(\vec{r}_1 - \vec{r}_j) = g(|\vec{r}_1 - \vec{r}_j|) \Rightarrow f_{2,3}(\vec{k}) = g(\vec{k})$

$$\Rightarrow E_c = 4\pi \frac{s_0^2}{2} \iint_{VV} d\vec{r}_3 d\vec{r}_4 \int_{\infty} d^3k \frac{1}{k^2} \cdot g^2(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k}(\vec{r}_3 - \vec{r}_4)} \quad \text{Mit: } g(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \cdot \frac{1}{(1+a^2k^2)}$$

und:

$$\int d^3k f(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \iiint_{0-\infty}^{2\pi 1 \infty} f(k) \cdot e^{ikr \cos\vartheta} \cdot k^2 dk d\cos\vartheta d\varphi = 2\pi \int_0^{\infty} f(k) \cdot \left[\frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \right] k^2 dk = \frac{4\pi}{r} \int_0^{\infty} f(k) \cdot k \cdot \sin(kr) dk$$

ergibt sich:

$$E_c = (4\pi)^2 \frac{s_0^2}{2} \cdot \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \int_0^{\infty} dk \frac{g^2(k)}{k} \sin(k|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \frac{s_0^2}{\pi} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{k(1+a^2k^2)^2} dk$$

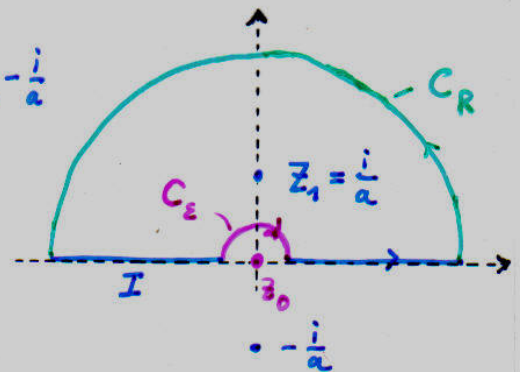
Das k-Integral kann nun mit Contourintegration gelöst werden:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{izr}}{z(1+a^2z^2)^2} dz \quad \text{Pole: } z_0=0 \quad z_1 = \frac{i}{a}, -\frac{i}{a}$$

Lemma von Jordan: $C_R = 0$

$$I + I_{\epsilon} + C_R = 2\pi i \text{ Res } z_1$$

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



Mit: $z = \varepsilon \cdot e^{i\varphi}$ $dz = i\varepsilon e^{i\varphi} d\varphi$

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

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

Setzt man dieses Ergebnis in den Ausdruck für E_c ein ergibt sich:

$$E_c = \frac{\rho_0^2}{4\pi} \iint_{VV} \frac{d^3r_1 d^3r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \frac{1}{2i} \left(i\pi - i\pi \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a}\right) \cdot e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a} \right)$$

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

$$E_c(\text{scharf}) = \frac{\rho_0^2}{2} \iint_{VV} d^3r_1 d^3r_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\Delta E_c = -\frac{\rho_0^2}{2} \iint_{VV} d^3r_1 d^3r_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a}\right) \cdot e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}$$

Für eine Kugelform mit Radius R_0 lassen sich die Integrale lösen:

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

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

Die doppelten Volumenintegrale lassen sich zu doppelten Oberflächenintegrale umformen. Dadurch fallen zwei Integrationsdimensionen weg:

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

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

Die Transformation von Volumen- auf Oberflächenintegrale

Wie geht $\iiint_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 f(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \oint_S \oint_S [d\vec{S}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] \cdot [d\vec{S}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] \cdot F(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad ?$

Zur Vermeidung von Indexchaos: $\vec{x} = \vec{r}_1, \vec{y} = \vec{r}_2, x = |\vec{x}|, y = |\vec{y}|; \vec{z} = \vec{x} - \vec{y}, z = |\vec{z}|$

Wählt man,

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

ergibt sich die obige Formel durch zweimalige

Anwendung des Gauss'schen Divergenztheorems. Das Problem ist nun eine entsprechende Funktion $F(\vec{x} - \vec{y})$ zu finden. Zur Vereinfachung soll $f()$ und $F()$ 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 $\tilde{F}(z)$:

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

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

Für die Coulomb- und Yukawafunktion ergibt sich damit beispielsweise:

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

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

Nun haben wir $\tilde{F}(z)$. $\vec{y} = 0$ und Substitution gibt die Bestimmungsgleichung für $F(z)$:

$$\tilde{F}(\vec{x}) = F(\vec{x}) + \underbrace{\vec{\nabla}_x \cdot \vec{x}}_{x^3} F(x) \quad \text{Mit Divergenz in Kugelkoordinaten und } F(x) = x^{-4} G(x)$$

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

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

Für Coulomb- und Yukawafunktion ergibt sich nun endlich:

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

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

Betrachtet man nun die Fourier-Darstellung einer Funktion $f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = f(z)$

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

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

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

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 Teile 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 $F(z) = F(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ darstellt: $f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \rightarrow f(k)$

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

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

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

Dieses Integral kann mit komplexer Contour-Integration gelöst werden.

Die Umformung des Coulombintegrals in eine effizient integrierbare Form

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

$$E_c = \frac{S_0^2}{2} \iint_{VV} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = -\frac{S_0^2}{12} \iint_{SS} \frac{[d\vec{s}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)][d\vec{s}_2 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

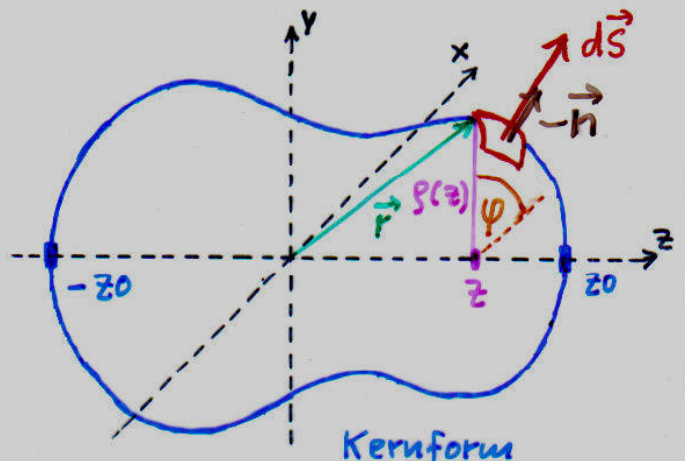
Ab nun wollen wir uns auf axial-symmetrische Kernformen beschränken und gehen zweckmäßigerweise zu Zylinderkoordinaten über. Dann gilt:

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

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

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

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



$$d\vec{s}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = (s_1 \cos \varphi_1, s_1 \sin \varphi_1, -\frac{1}{2} \frac{ds_1^2}{dz_1}) \cdot (s_1 \cos \varphi_1 - s_2 \cos \varphi_2, s_1 \sin \varphi_1 - s_2 \sin \varphi_2, z_1 - z_2)$$

$$= \left[s_1^2 - s_1 s_2 \cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \frac{ds_1^2}{dz_1} \right] \quad \text{ebenso:}$$

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

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

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

$$E_c = +\frac{S_0^2}{12} \cdot 2\pi \cdot \int_{-z_0}^{z_0} \int_{-z_0}^{z_0} \int_0^{2\pi} \frac{\left[s_1^2 + \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \frac{ds_1^2}{dz_1} - s_1 s_2 \cos \varphi \right] \left[s_2^2 - \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \frac{ds_2^2}{dz_2} - s_1 s_2 \cos \varphi \right]}{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2s_1 s_2 \cos \varphi}} d\varphi dz_1 dz_2$$

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

$$E_c = \frac{S_0^2}{12} \cdot 2\pi \cdot z_0 \cdot \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \frac{\left[s_1^2 + \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \cdot s_1'^2 \right] \left[s_2^2 - \frac{1}{2} (z_2 - z_1) s_2'^2 \right] + \left[-(s_1^2 + s_2^2) + \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \cdot (s_2' - s_1') \right] s_1 s_2 \cos \varphi + s_1^2 s_2^2 \cos^2 \varphi}{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2s_1 s_2 \cos \varphi}} d\varphi dz_2$$

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 Int. über ganze Periode

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2s_1s_2 \cos \varphi}} d\varphi = \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{(s_1 + s_2)^2 + (z_2 - z_1)^2 - 4s_1s_2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}} d\varphi$$

Mit: $a_g^2 = (s_1 + s_2)^2 + (z_2 - z_1)^2$, $\frac{\varphi}{2} = \alpha$, $d\varphi = 2 d\alpha$ und $\sin(\alpha) = \sin(\pi - \alpha)$

$$I_1 = \int_0^{\pi} \frac{2 d\alpha}{\sqrt{a_g^2 - 4s_1s_2 \sin^2 \alpha}} = \frac{4}{a_g} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}} = \frac{4}{a_g} \cdot K(k^2)$$

$K(k^2)$ ist vollständiges elliptisches Integral erster Gattung. $k^2 = \frac{4s_1s_2}{a_g^2}$

Für den zweiten Summanden ergibt sich:

$$I_2 = \int_0^{2\pi} \frac{\cos \varphi}{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + (z_1 - z_2)^2 - 2s_1s_2 \cos \varphi}} d\varphi = -\frac{4}{a_g} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos(2\alpha) d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}} = -\frac{4}{a_g} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{(1 - 2\sin^2 \alpha) d\alpha}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}}$$

Um nicht lange umzuformen betrachten wir einfach folgenden Ausdruck:

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

Damit läßt sich nun direkt das Ergebnis von I_2 hinschreiben:

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

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

Mit: $r_{12}^2 = s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2s_1s_2 \cos \varphi$

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

Mit $s_1s_2 \cos \varphi = \frac{1}{2} [s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - r_{12}^2]$ wird

$$I_{3b} = \frac{s_1s_2}{2} \int_0^{2\pi} \frac{[s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - r_{12}^2] \cdot \cos \varphi}{r_{12}} d\varphi = \frac{s_1s_2}{2} \cdot \frac{-4}{a_g} (K - 2D) \cdot \left\{ s_1^2 + s_2^2 + (z_2 - z_1)^2 \right\} - \frac{s_1s_2}{2} \int_0^{2\pi} r_{12} \cos \varphi d\varphi$$

Nun kann das Integral I_4 durch partielle Integration umgeformt werden:

$$I_4 = -4a_g \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha} \cdot \cos(2\alpha) d\alpha \quad \text{Mit: } \frac{d}{d\alpha} \sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha} = \frac{-k^2 \sin \alpha \cos \alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}}$$

$$I_4 = -4a_g \left\{ \underbrace{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha} \cdot \frac{\sin(2\alpha)}{2}}_{=0} \right\}_0^{\frac{\pi}{2}} + \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{+k^2 \sin \alpha \cos \alpha}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} \cdot \frac{\sin(2\alpha)}{2} d\alpha = -k a_g \cdot \frac{k^2}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2(2\alpha)}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \alpha}} d\alpha$$

$$a_g k^2 = a_g \cdot \frac{4s_1 s_2}{a_g^2} = \frac{4s_1 s_2}{a_g}$$

Nun ergibt sich damit für I_{3b} :

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

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

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

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

$$E_C = \frac{s_0^2}{12} \cdot 2\pi \cdot z_0^5 \cdot 4 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \left\{ s_1 s_2 \cdot \frac{(k-2D)}{3} \cdot \left[2(s_1^2 + s_2^2) - (z_2 - z_1)^2 + \frac{3}{2} \cdot (z_2 - z_1) \cdot \left(\frac{ds_1^2}{dz_1} - \frac{ds_2^2}{dz_2} \right) \right] \right. \\ \left. + k \cdot \left\{ \frac{s_1^2 s_2^2}{3} + \left[s_1^2 + \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \frac{ds_1^2}{dz_1} \right] \cdot \left[s_2^2 - \frac{1}{2} (z_2 - z_1) \frac{ds_2^2}{dz_2} \right] \right\} \cdot \frac{1}{a_g} \cdot dz_1 dz_2 \right\}$$

Es verbleibt also ein doppeltes Integral über die z -Achse. Dieses Integral läßt sich effizient mit Gauss - Legendre - Integration numerisch berechnen.

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 die Polynomnäherung :

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

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

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

Die benutzte gesamte makroskopische Massenformel :

$$m(Z, N) = m_H \cdot Z + m_n \cdot N + E_B(Z, N) = (U + M_H) \cdot Z + (U + M_n) \cdot N + E_B(Z, N)$$

$$= U \cdot (Z + N) + M_H \cdot Z + M_n \cdot N + E_B(Z, N) = U \cdot A + E(Z, N)$$

$$E(Z, N, \text{Form}) = M_H \cdot Z + M_n \cdot N +$$

$M_H = 7.289 \text{ MeV}$
 $M_n = 8.071 \text{ MeV}$ Masseüberschub von H und n

$$- a_v \cdot (1 - \kappa_v I^2) \cdot A$$

$a_v = 16 \text{ MeV}$ $\kappa \approx 2$ Volumenenergie

$$+ \frac{a_s(1 - \kappa_s I^2)}{8\pi^2 r_0^2 a^4} \cdot \iint_{VV} \left[2 \cdot \frac{e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a}}}{\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a}} - e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a}} \right] d^3r_1 d^3r_2$$

$a_s = 21 \text{ MeV}$ Verallgemeinerte
 $\kappa_s = 2.4$ Yukawa-plus-Expon.
 $a = 0.68$ Oberflächenenergie

$$+ \frac{1}{2} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} r_0^3 A} \right)^2 \cdot \iint_{VV} \frac{d^3r_1 d^3r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Coulombenergie $r_0 = 1.16 \text{ fm}$
 $a_s = 0.7$

$$- \frac{1}{2} \left(\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3} r_0^3 A} \right)^2 \cdot \frac{1}{a_s} \iint_{VV} \left[\frac{e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a_s}}}{\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a_s}} + \frac{1}{2} e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{a_s}} \right] d^3r_1 d^3r_2$$

Oberflächen-diffusitäts
Korrektur zur
Coulombenergie

$$- \frac{3}{4} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{2/3} \cdot \frac{e^2}{r_0} \cdot \frac{Z^{4/3}}{A^{1/3}}$$

Austausch
Coulombenergie

$$+ W \cdot |I|$$

Wigner energie $W = 34 \text{ MeV}$ $I = \frac{N - Z}{A}$

$$- a_{el} \cdot Z^{2.39}$$

Elektronen bindungsenergie $a_{el} = 1.433 \cdot 10^{-5} \text{ MeV}$

$$- \frac{1}{8} \frac{r_p^2 e^2}{r_0^3} \left[\frac{145}{48} - \frac{327}{2880} (k_f r_p)^2 + \frac{1527}{1209600} (k_f r_p)^4 \right] \frac{Z^2}{A}$$

Protonen- $r_p = 0.8 \text{ fm}$
Formfaktor

$$+ c_0 A^0$$

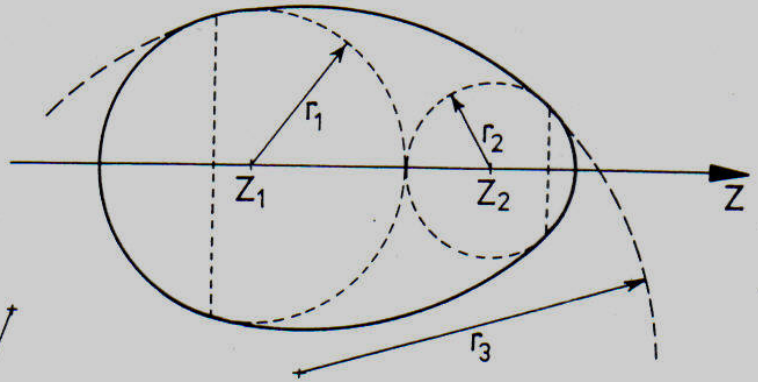
A^0 -Energie $c_0 = 6.4 \text{ MeV}$

$$k_f = \left(\frac{9\pi Z}{4A} \right)^{1/3} \cdot \frac{1}{r_0}$$

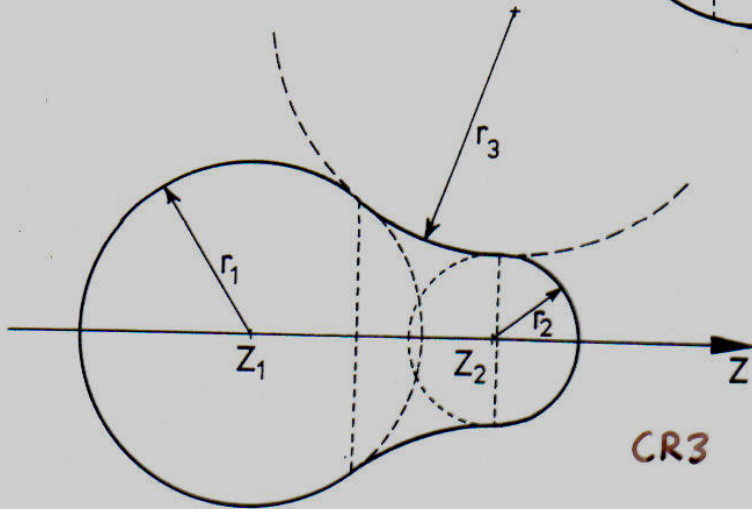
Das "Drei-Kugel-Modell"

zur Beschreibung der
Kerngeometrie beim
Spaltvorgang.

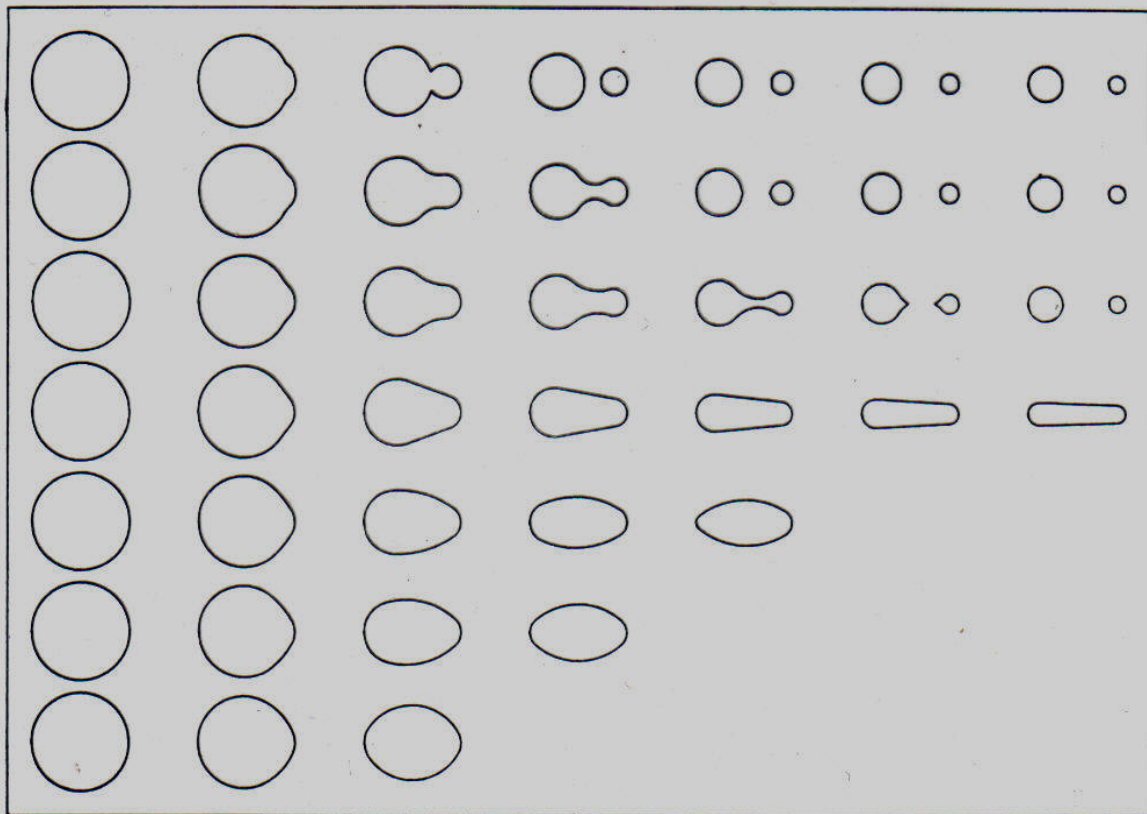
Neck-Krümmung $CR3 = \frac{1}{r_3}$



CR3 negativ



CR3 positiv



CR3

$c_3 = 1/0$

$= 1/5$

$= 1/10$

$= 1/\infty$

$= -1/20$

$= -1/15$

$= -1/10$

$\delta z = 0$

5

10

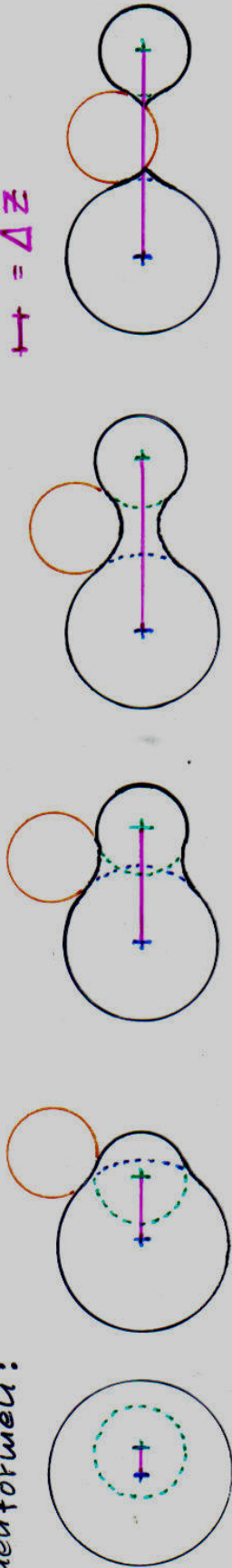
15

20

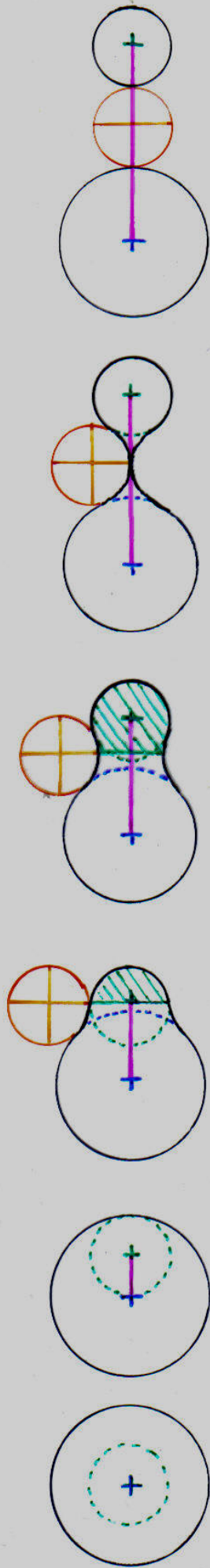
25

30

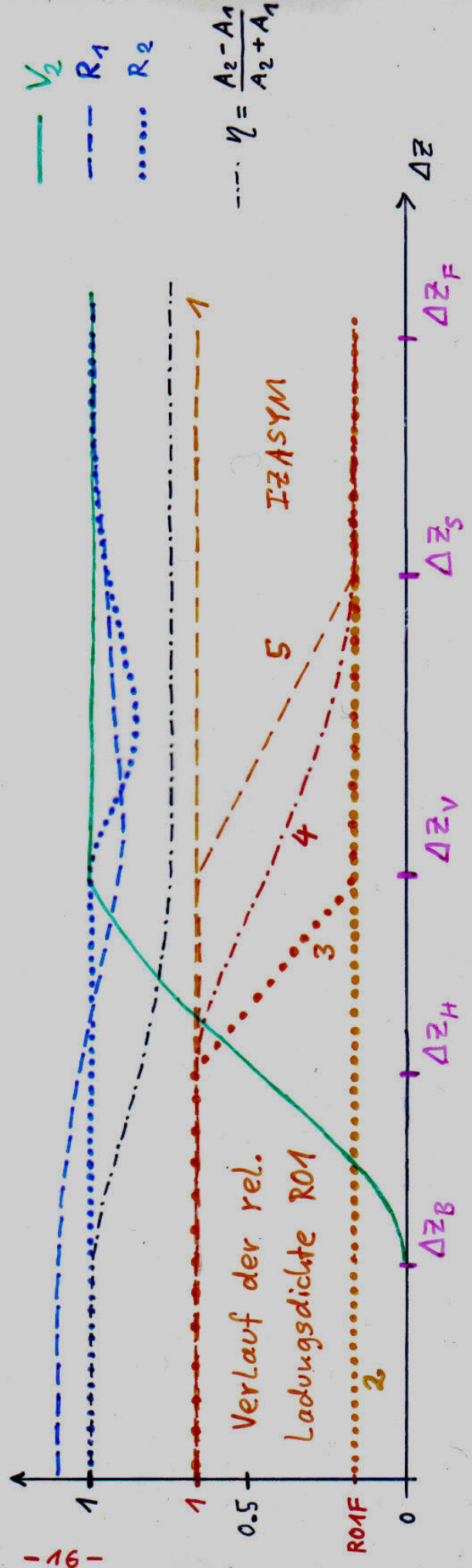
Zwischenformen:



Die mathematische Beschreibung der Form ändert sich an folgenden speziellen Punkten:



$\Delta z = 0$ Δz_B Δz_H Δz_V Δz_S Δz_F

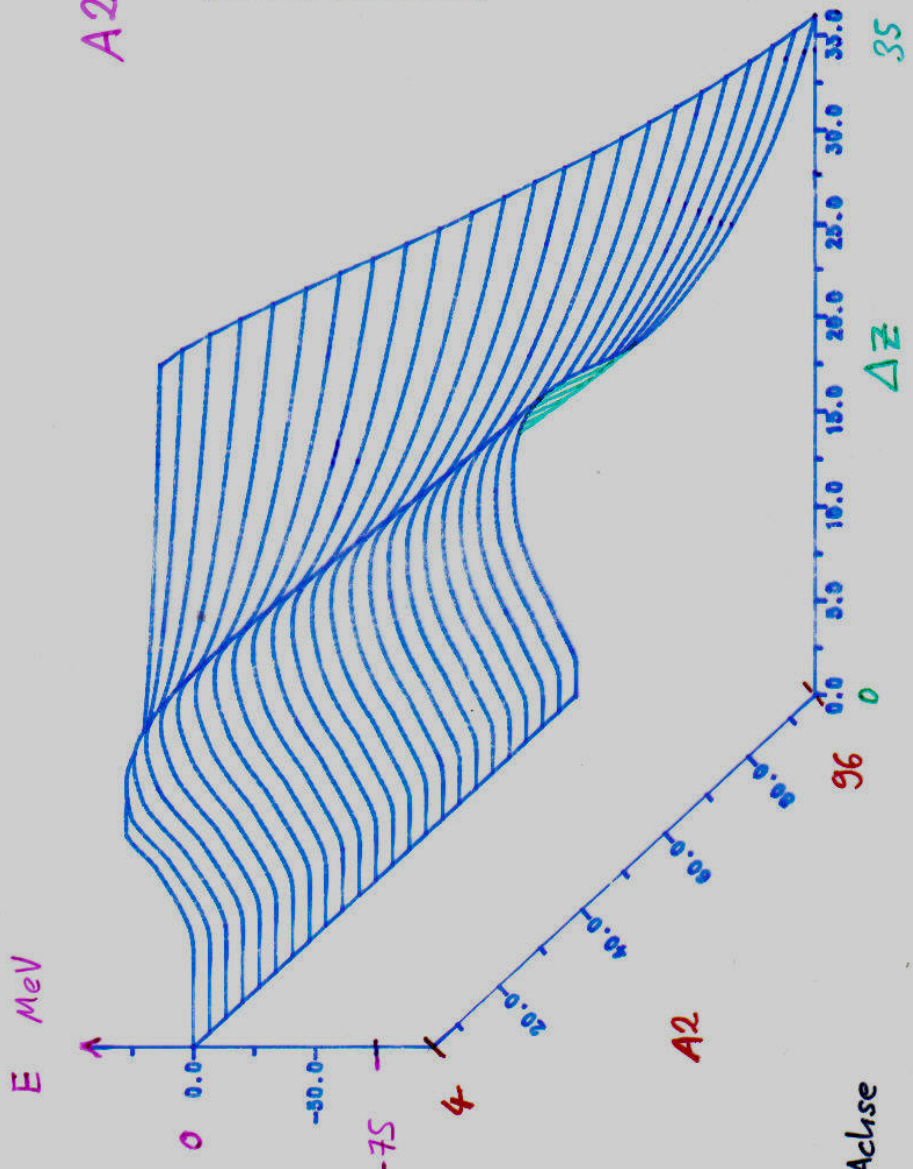


JOB UF53 DATE 16.05.87 TIME 13:37

Yukawa-plus-exponential Modell

A2E

Alle Plots
mit $^{218}_{88}\text{Ra}$
als Mutterkern



$$A_0 = A_1 + A_2$$

$$Z_0 = Z_1 + Z_2$$

$$\eta_A = \frac{A_1 - A_2}{A_0}$$

$$\eta_Z = \frac{Z_1 - Z_2}{Z_0}$$

A2E: Ladungsequilibriert

d.h. $\eta_A = \eta_Z$

A2M: Z2 wird so gewählt, daß die Energie am Spaltprodukt ΔZ_s minimal wird.

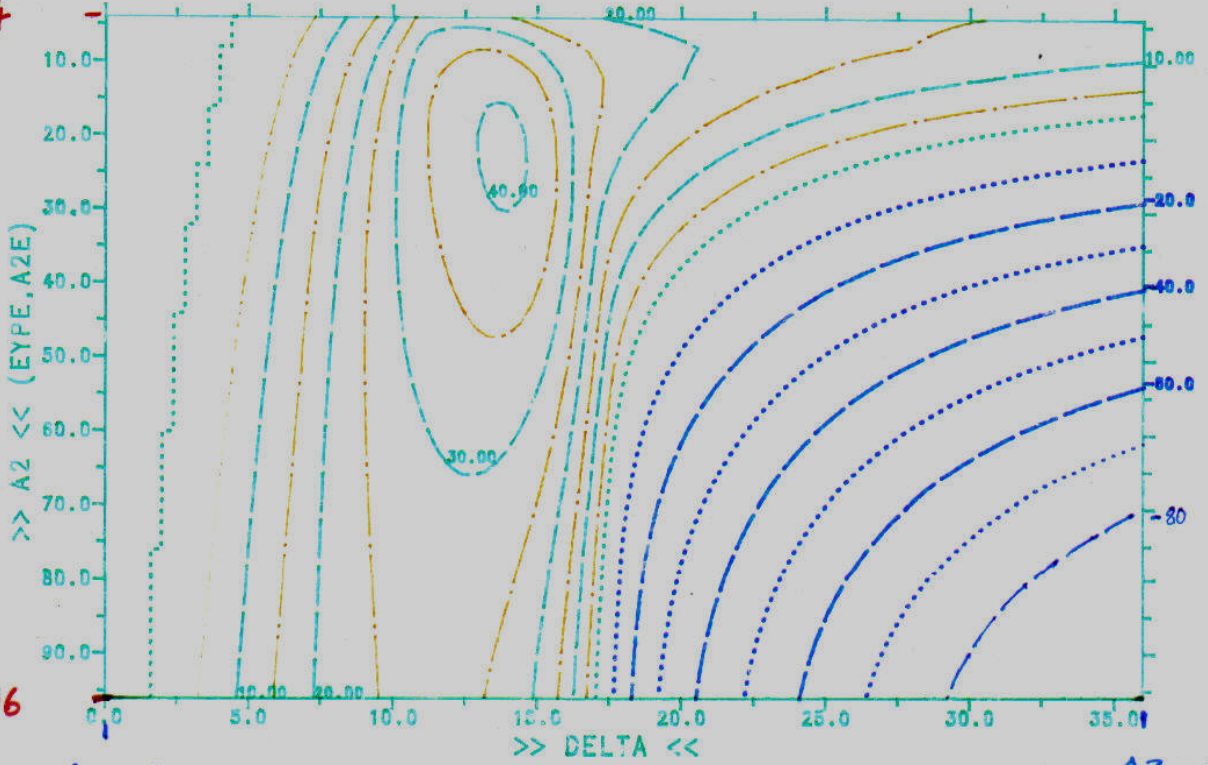
Z2S: Z2 als Y-Achse A2 wird festgelegt.

PICTURE FROM DATASET: 'UF53.UF53\$DKM.PLOT001'

17

Yukawa - plus - exponential Modell

A2 = 4



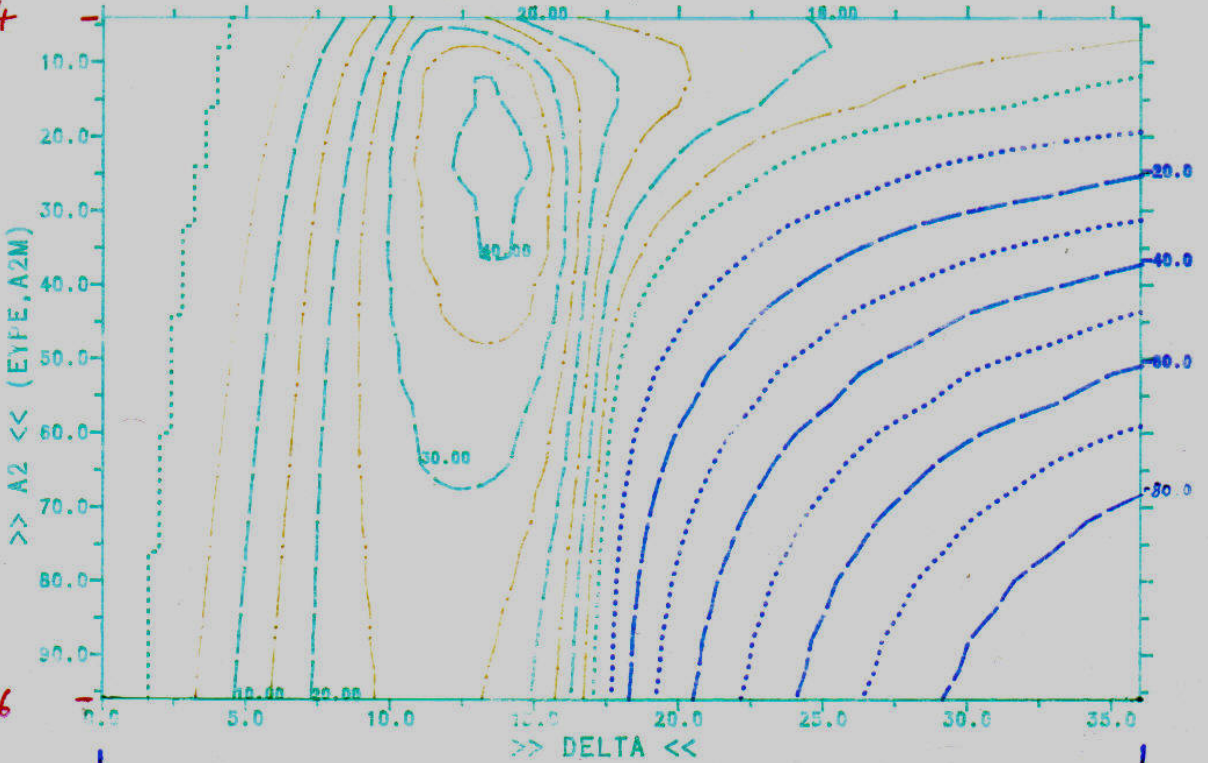
A2 = 96

$\Delta Z = 0$

$\Delta Z = 36$

A2E

A2 = 4



A2 = 96

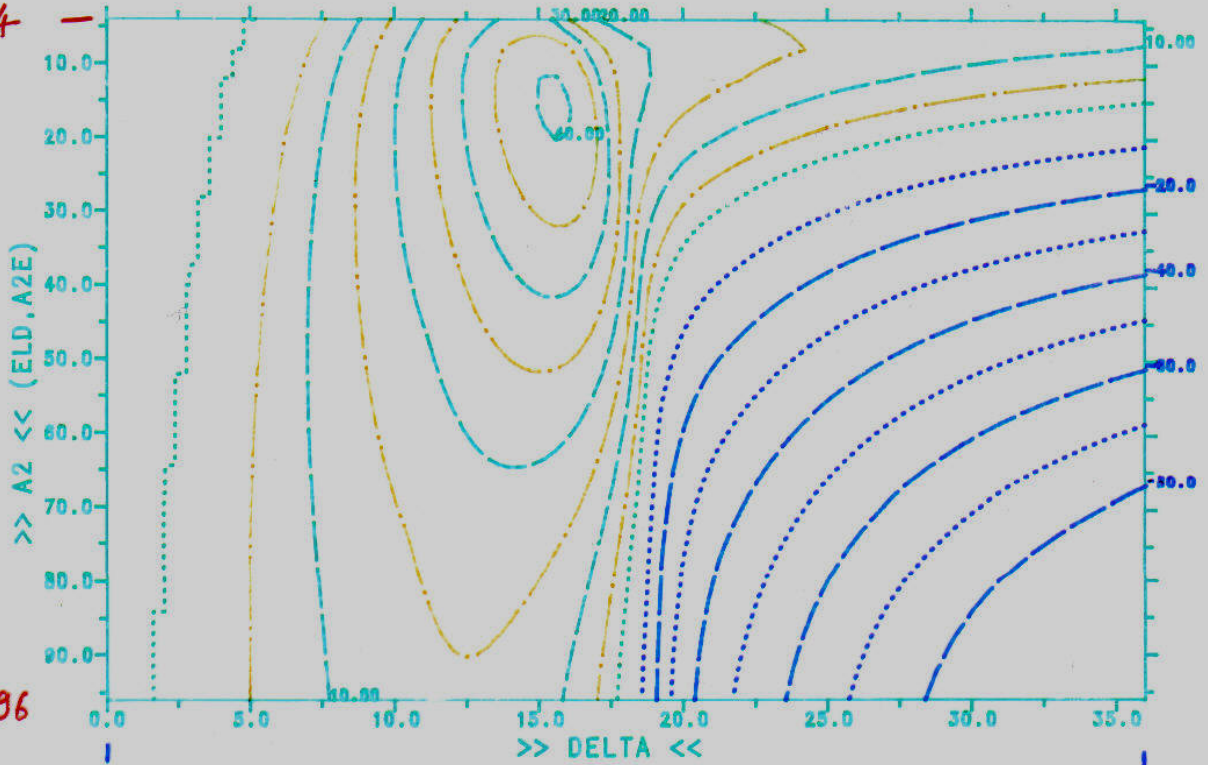
$\Delta Z = 0$

$\Delta Z = 36$

A2M

Tröpfchen - Modell

A2 = 4



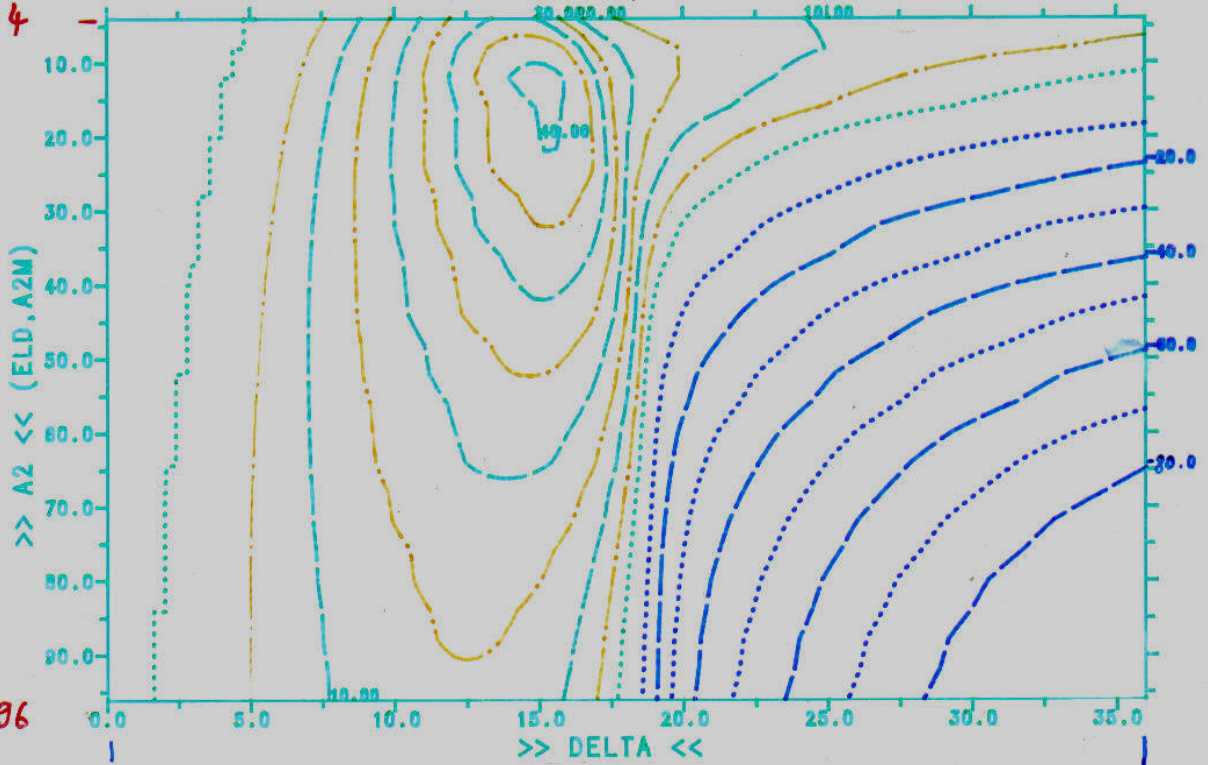
A2 = 96

$\Delta z = 0$

A2E

$\Delta z = 36$

A2 = 4



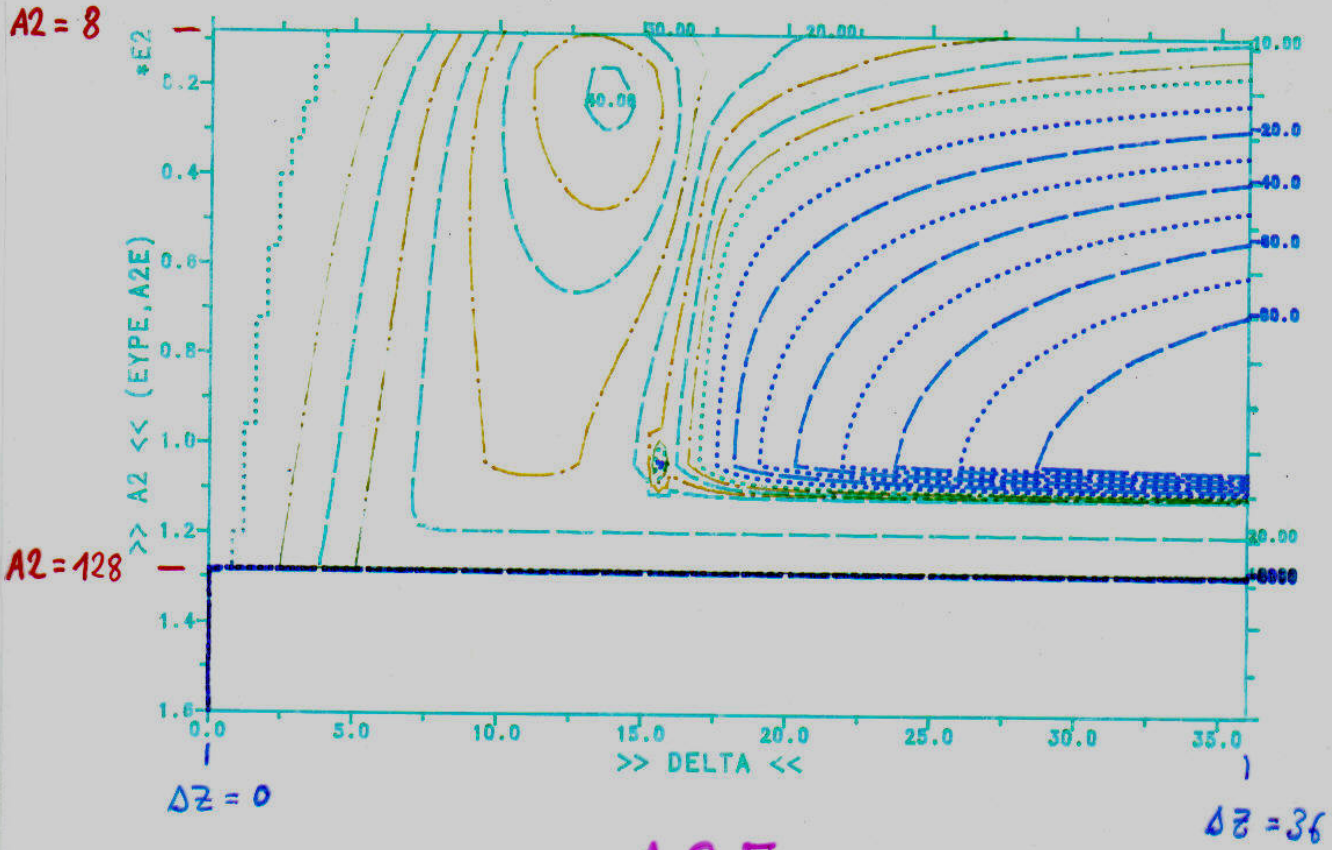
A2 = 96

$\Delta z = 0$

A2M

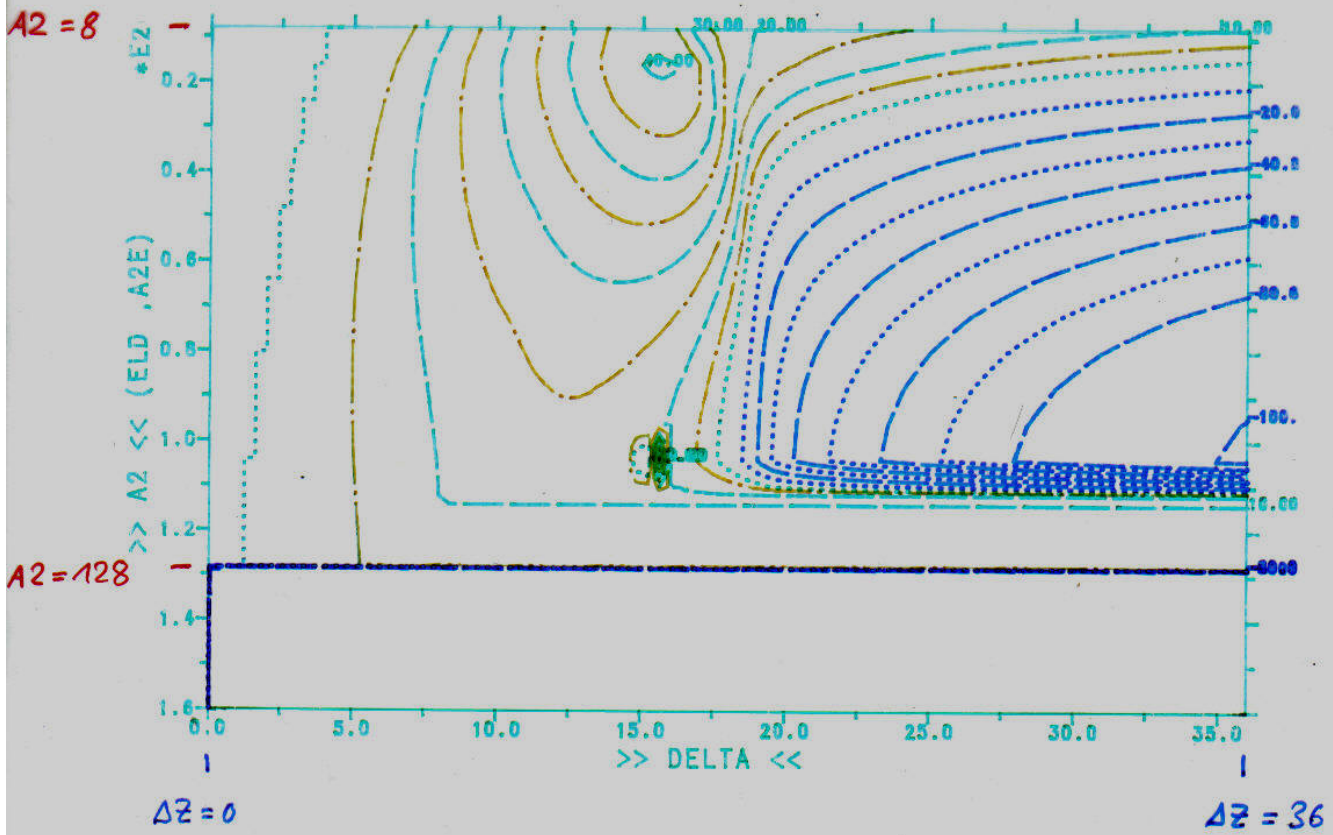
$\Delta z = 36$

Yukawa-plus-exponential Modell

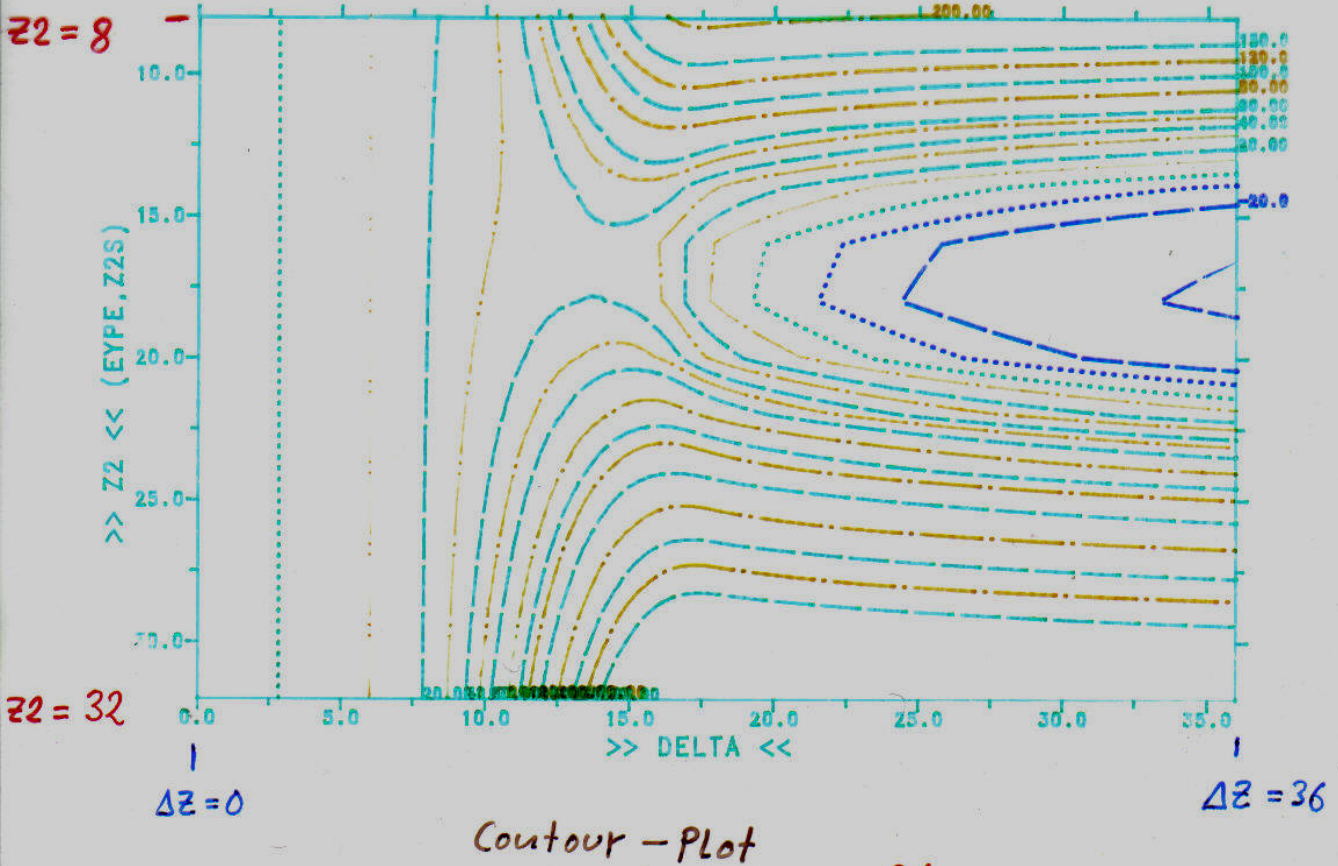
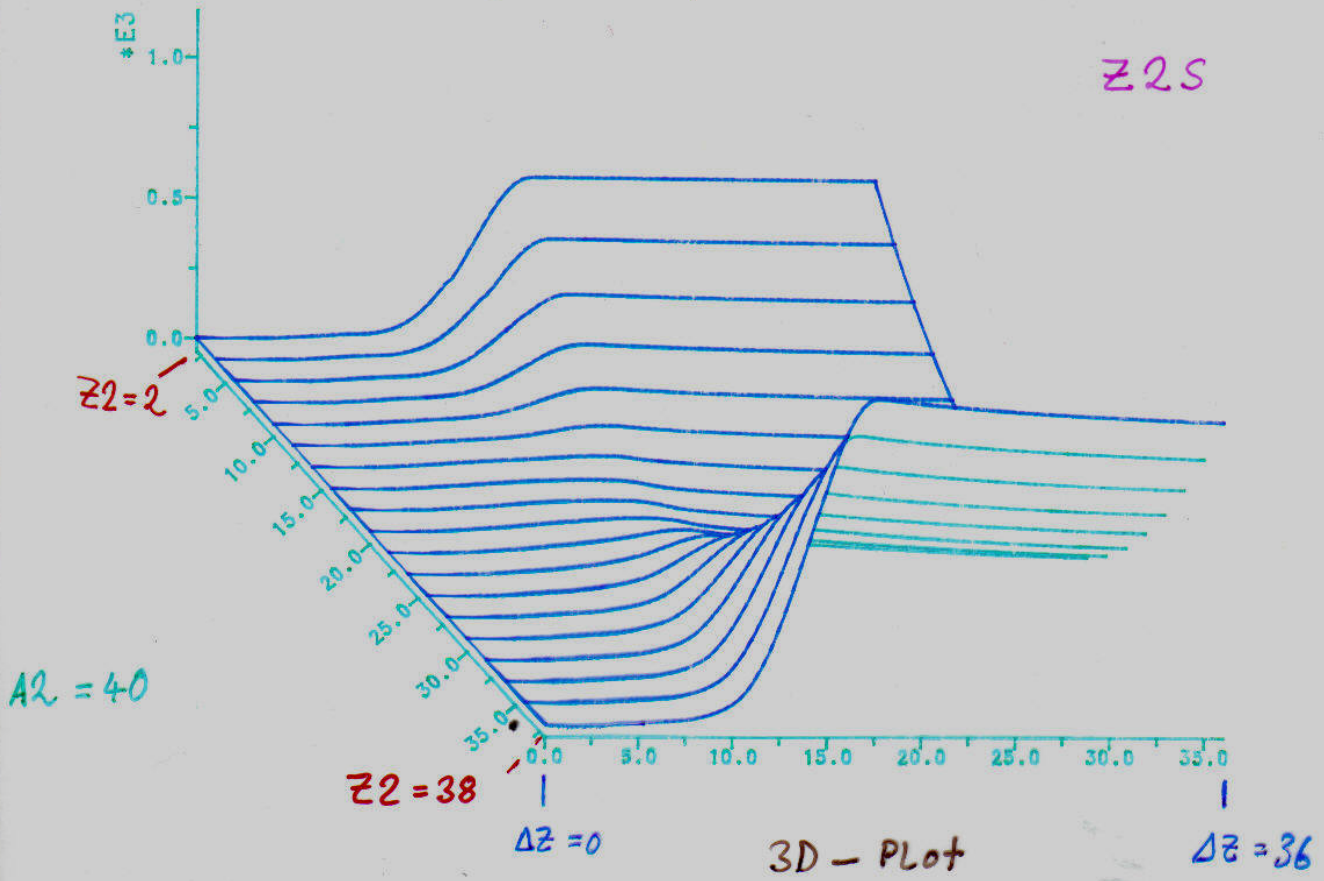


A2E

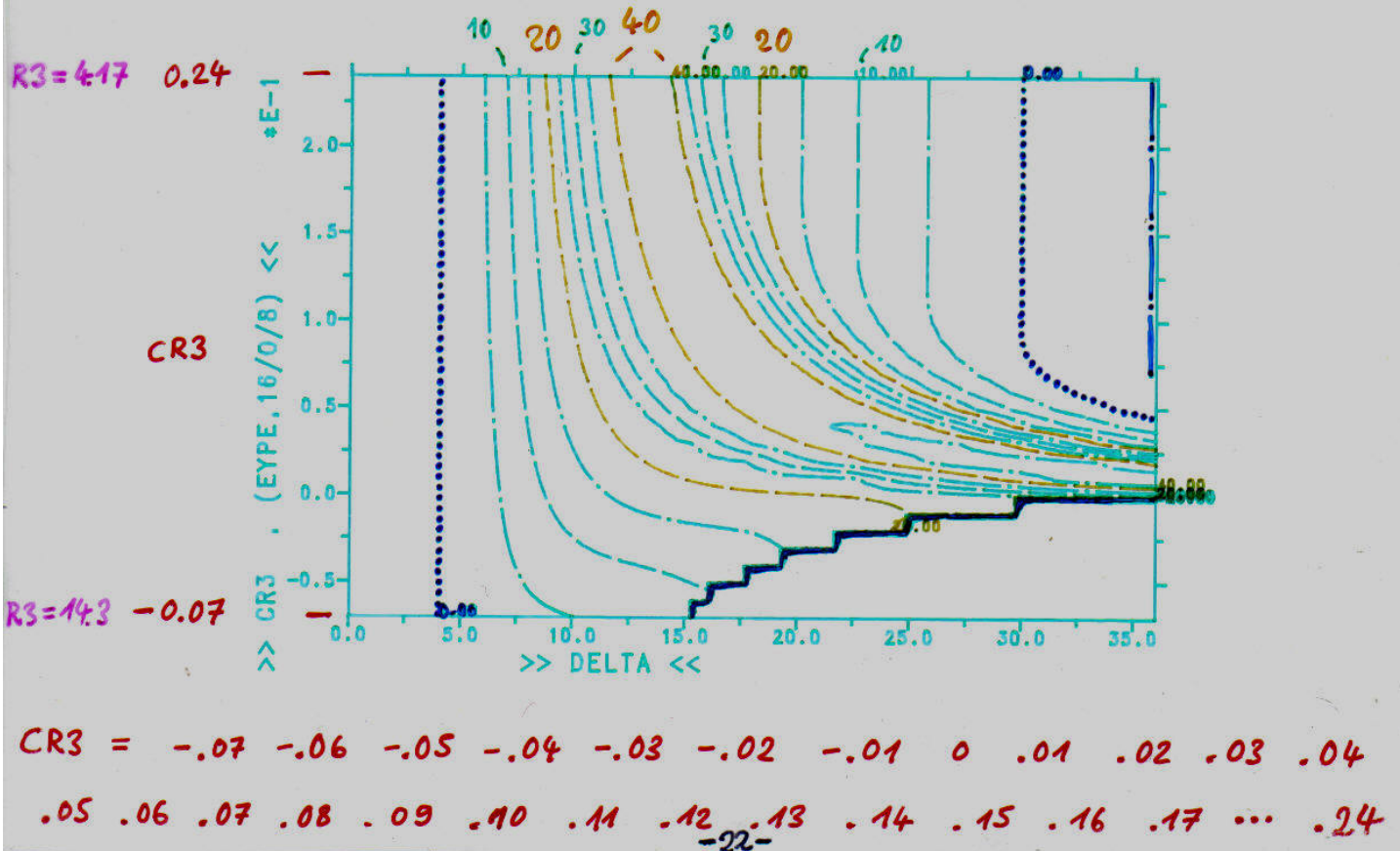
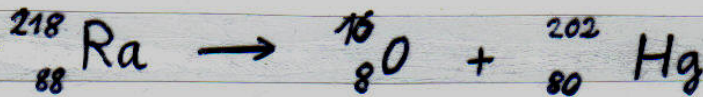
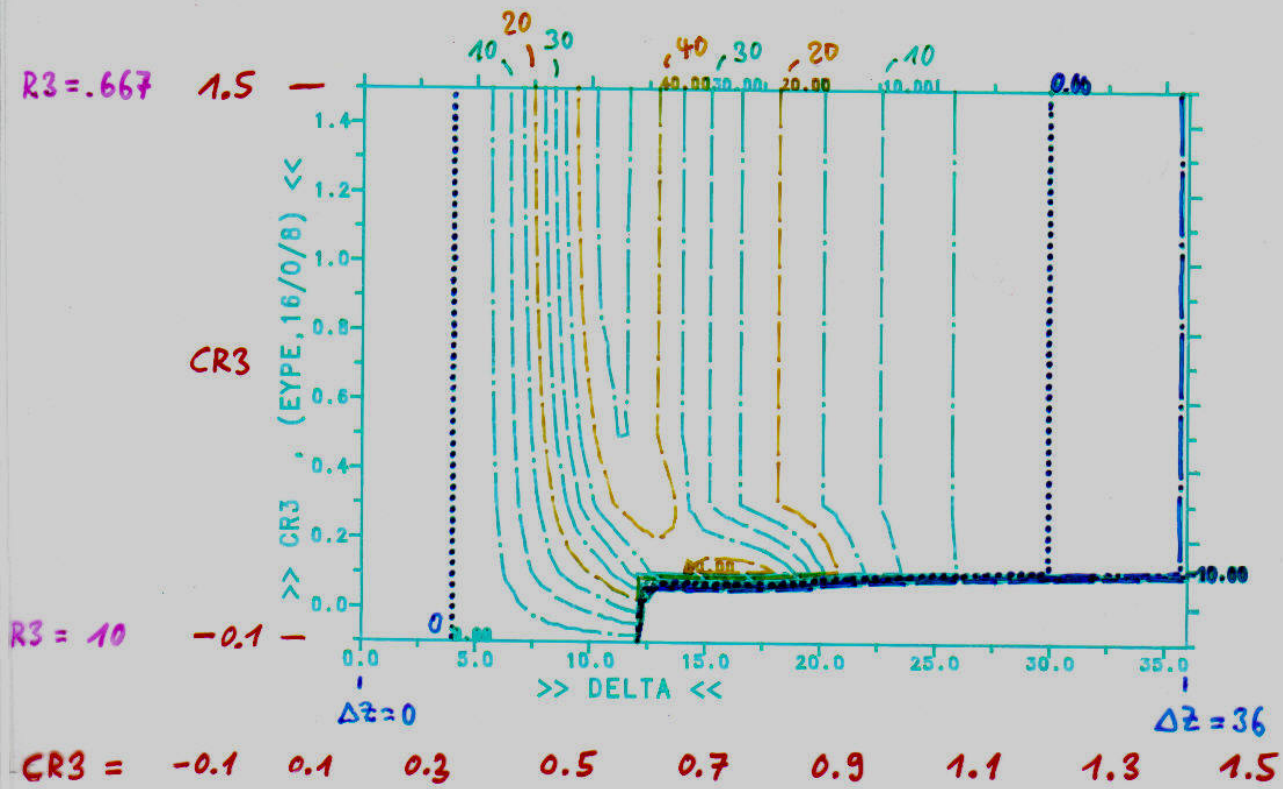
Tröpfchen Modell

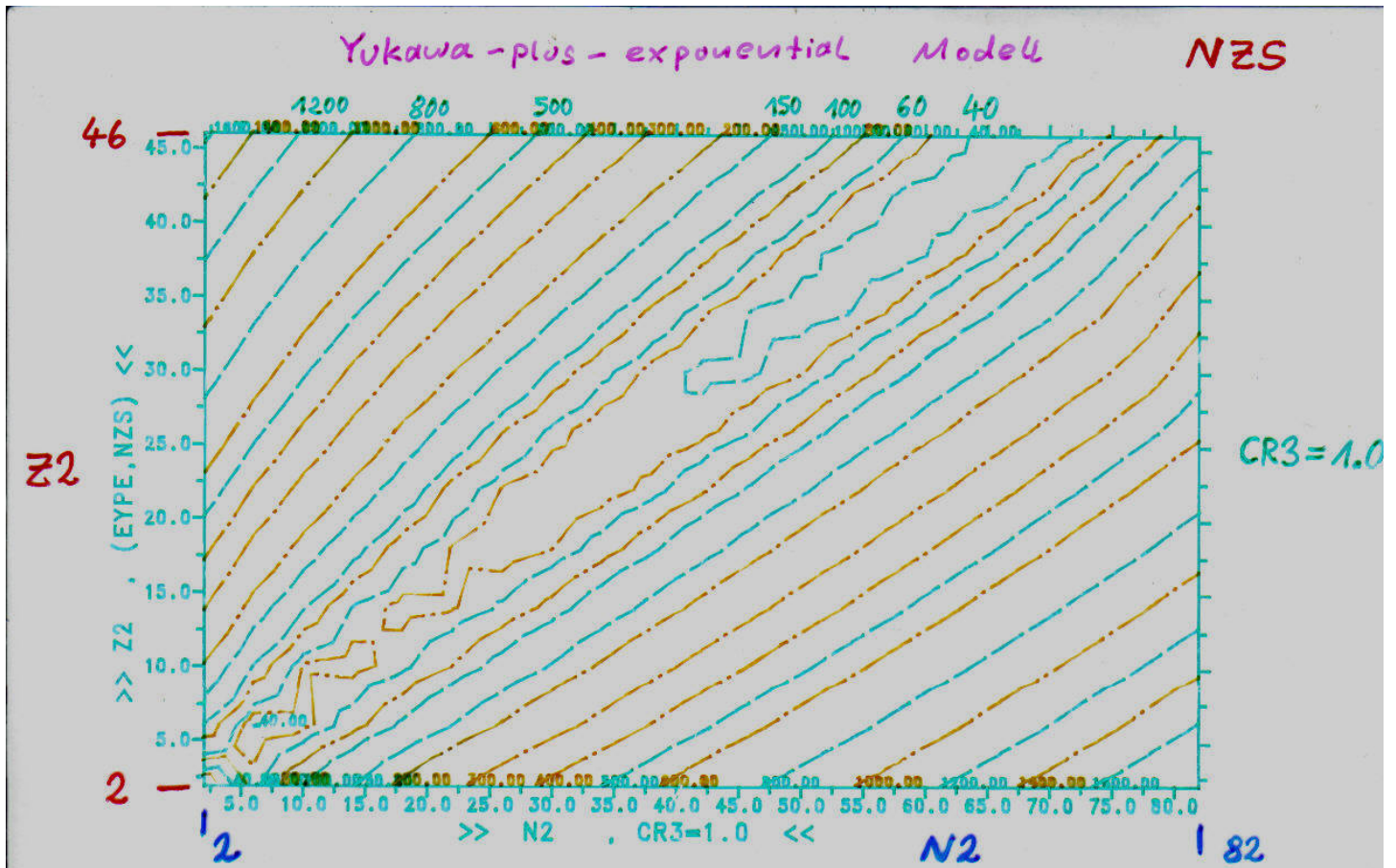


Yukawa - plus - exponential Modell (EYPE, Z2S)

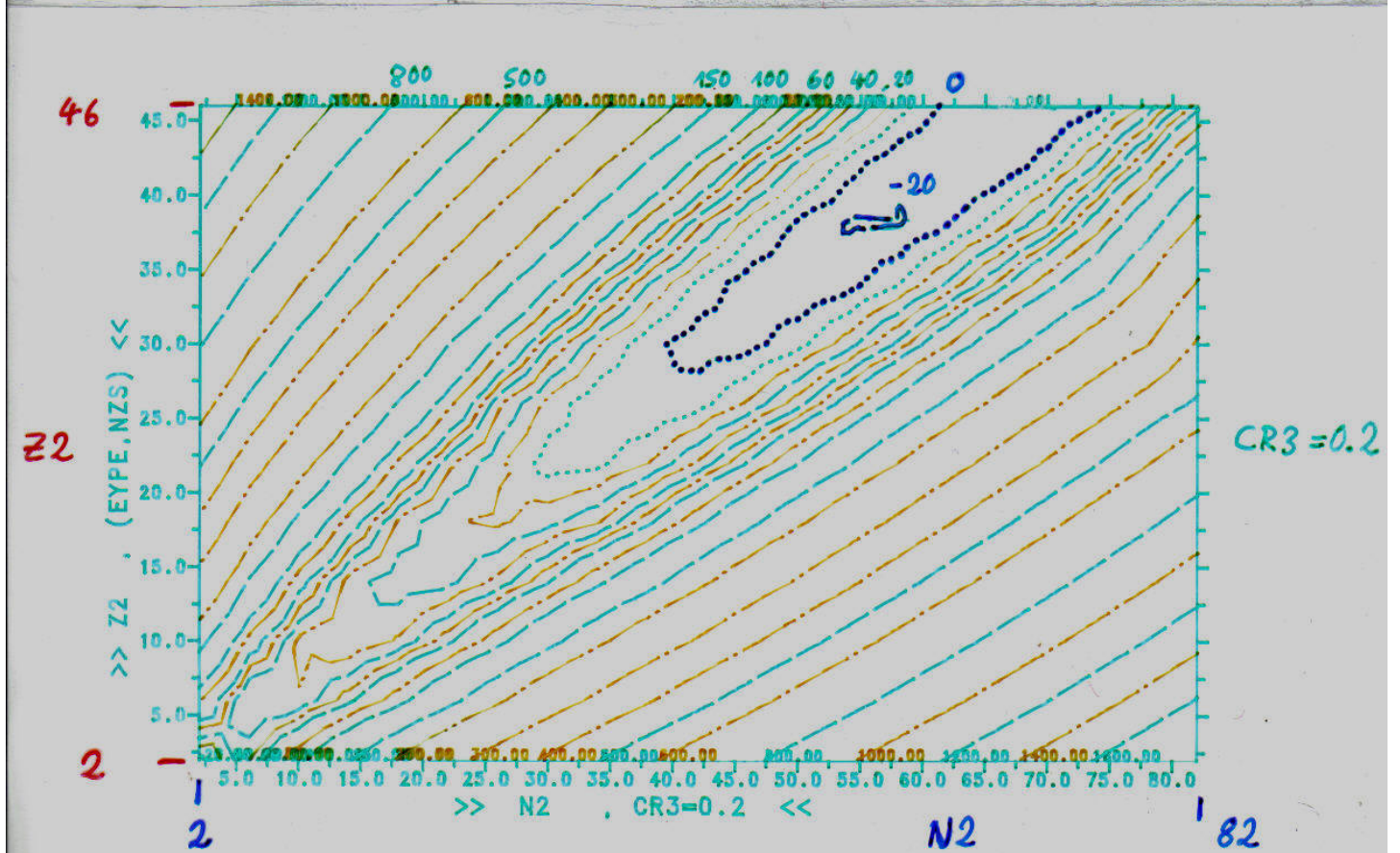


Yukawa - plus - exponential Modell



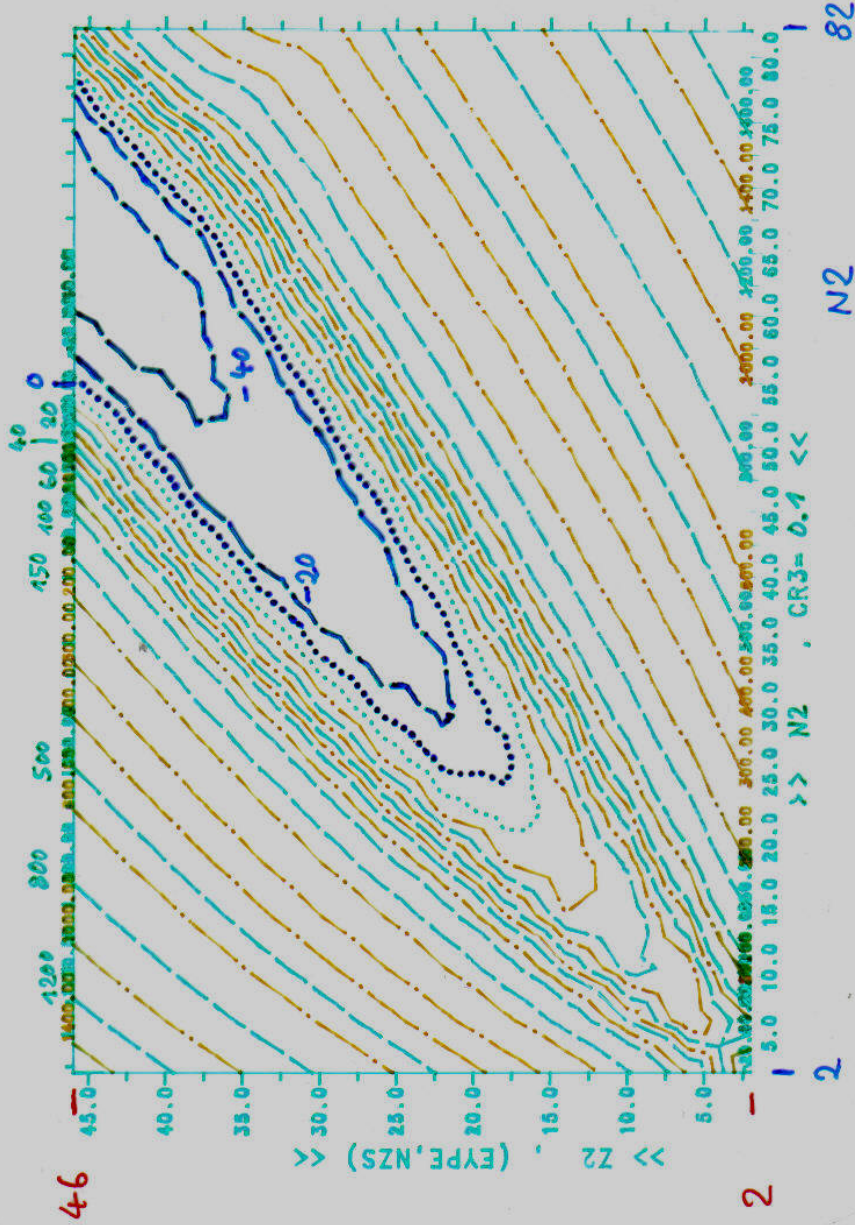


N2S berechnet die Energie am Spaltpunkt ΔZ_s als Funktion von $Z2$ und $N2$



Yukawa - plus - exponential Modell

NZS CR3 = 0.1



22

-24-

PICTURE FROM DATASET: 'UF53.PLOT013.GRAPH'

Zur numerischen Integration:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i \cdot f(x_i) \quad \text{Stützstellen } x_i \text{ paarweise verschieden.}$$

$$f(x) = P_n(x) + e(x) \quad P_n(x) \text{ ist Interpolationspolynom } n\text{-ten Grades: } P_n(x_i) = f(x_i) \quad i=0 \dots n$$

$$I = \int_a^b P_n(x) dx + \int_a^b e(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + E = \sum_{i=0}^n A_i P_n(x_i) + E$$

Der Fehler E soll im weiteren nicht untersucht werden.

Mit den Lagrange-Polyomen $L_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)}$ [Es gilt: $L_i(x_j) = \delta_{ij}$]

Ist die Lagrange-Darstellung von $P_n(x)$: $P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot L_i(x)$ Da $L_i(x)$ Polynome n -ten Grades sind und es gilt: $P_n(x_i) = f(x_i)$.

$$\text{D.h. } \int_a^b P_n(x) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b L_i(x) dx \Rightarrow A_i = \int_a^b L_i(x) dx$$

Ist oben $f(x)$ ein Polynom vom Grad $\leq n$ dann ist $e(x) = 0$. Das heißt die Quadraturformel ist exakt. Wird ein Polynom bis zum Grade N exakt integriert, sagt man auch daß die Quadraturformel den Genauigkeitsgrad N hat.

Mit der Forderung, daß ein Polynom bis zum Grade n exakt integriert wird kann man auch mit folgendem Gleichungssystem die A_i bestimmen:

$$\int_a^b x^k dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i^k \quad k=0 \dots n \quad \text{Die } x_i \text{ sind dabei frei wählbar (jedoch } x_i \neq x_j \text{ für } i \neq j)$$

Wenn man die Beliebigkeit der x_i aufgibt und für sie weitere $n+1$ Bedingungen aufstellt, daß heißt k bis $2n+1$ gehen läßt, erhält man den maximalen Genauigkeitsgrad $2n+1$ (Gauss-Integration).

Bei äquidistanten Stützstellen $x_i = a + \frac{b-a}{n} \cdot i$ erhält man die sogenannten (geschlossenen) Newton-Cotes-Formeln:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} (f(x_0) + f(x_1)) \quad n=1 \quad \text{Schnurtrapezregel}$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) \quad n=2 \quad \text{Simpsonregel}$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{8} (f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)) \quad n=3 \quad \text{3/8 Regel usw.}$$

Die Gauß'schen Quadraturformeln :

Vorbemerkung: Das Skalarprodukt $(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)w(x) dx$ mit einer positiven Gewichtsfunktion $w(x)$ definiert einen Satz orthogonaler Polynome $Q_m^{(x)} = \sum_{i=0}^m q_i x^i$ mit $(Q_n, Q_m) = \|Q_n\|^2 \delta_{nm}$
 Q_0, Q_1, \dots, Q_n spannen den Raum aller Polynome $S(x)$ bis zum Grade n auf und damit gilt: $\int_a^b S(x) \cdot Q_{n+1}^{(x)} \cdot w(x) dx = 0$

Unser Ziel ist nun einen Weg zu finden, daß für ein beliebiges Polynom $2n+1$ -ten Grades $P(x) = \sum_{\ell=0}^{2n+1} a_\ell x^\ell$ folgendes gilt:

$$\int_a^b P(x) \cdot w(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i P(x_i) \cdot w(x_i) = \sum_{i=0}^n \tilde{A}_i \cdot P(x_i) \quad \tilde{A}_i = A_i \cdot w(x_i)$$

Dafür müssen die bisher fast beliebigen x_i so gewählt werden, daß bei der Integration nur Potenzen x^ℓ mit $\ell \leq n$ beitragen. Dann gilt, was auf der vorigen Seite gezeigt wurde.

Mit dem Ansatz: $P(x) = A(x) \cdot B(x) + R(x) = C(x) + R(x)$

Und: $A(x) = \sum_{i=0}^{n+1} \alpha_i x^i = \prod_{i=0}^n (x - x_i) \quad B(x) = \sum_{j=0}^n \beta_j x^j$

$$C(x) = A(x) \cdot B(x) = \left(\sum_{i=0}^{n+1} \alpha_i x^i \right) \left(\sum_{j=0}^n \beta_j x^j \right) = \sum_{\ell=0}^{2n+1} \gamma_\ell x^\ell \quad R(x) = \sum_{k=0}^n \rho_k x^k$$

Die Koeffizienten $\alpha_i, \beta_j, \gamma_\ell$ sind damit folgendermaßen verknüpft:

$$\begin{pmatrix} \alpha_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha_1 & \alpha_0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha_2 & \alpha_1 & \alpha_0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \alpha_n & \alpha_{n-1} & \alpha_{n-2} & \dots & \alpha_1 & \alpha_0 \\ \alpha_{n+1} & \alpha_n & \alpha_{n-1} & \dots & \alpha_2 & \alpha_1 \\ 0 & \alpha_{n+1} & \alpha_n & \dots & \alpha_3 & \alpha_2 \\ 0 & 0 & \alpha_{n+1} & \dots & \alpha_4 & \alpha_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_{n+1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_0 \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \vdots \\ \gamma_n \\ \gamma_{n+1} \\ \gamma_{n+2} \\ \vdots \\ \gamma_{2n+1} \end{pmatrix}$$

Mit $\alpha_{n+1} = 1$ ist $\text{Det}(\alpha_i) = 1$
 D.h. für beliebige $\gamma_{n+1}, \dots, \gamma_{2n+1}$ gibt es den eindeutigen Lösungsvektor β_j
 Wählt man nun die x_i der Linearfaktorzerlegung von $A(x)$ als die Nullstellen des orthogonalen Polynoms $Q_{n+1}^{(x)}$ dann wird $A(x)$ gerade das orthogonale Polynom $Q_{n+1}^{(x)}$.

Demnach gilt nun mit $A(x) = Q_{u+1}^{(x)}$:

$$\int_a^b P(x) \cdot w(x) dx = \int_a^b Q_{u+1}^{(x)} \cdot B(x) \cdot w(x) dx + \int_a^b R(x) w(x) dx = 0 + \int_a^b R(x) w(x) dx$$

Das erste Integral ist gerade das Skalarprodukt von $Q_{u+1}^{(x)}$ mit $B(x)$. Dieses ist jedoch Null, da $B(x)$ ein Polynom vom Grade u ist.

$R(x)$ ist ein Polynom vom Grade u . Das heißt, das verbleibende Integral und damit das Integral über $P(x)$ ist exakt, wenn man für die $u+1$ Stützstellen die Nullstellen x_i des orthogonalen Polynoms $Q_{u+1}^{(x)}$ nimmt.

Sinnvollerweise transformiert man das Integrationsintervall $[a, b]$ auf das Intervall, auf dem die orthogonalen Polynome $Q_u(x)$ zur Gewichts-funktion $w(x)$ standardmäßig definiert sind.

Damit folgt schließlich die Gauß'sche Quadraturformel :

$$\int_a^b g(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^n A_i g\left(\frac{b-a}{2} x_i + \frac{b+a}{2}\right) \quad g(x) = f(x) \cdot w(x) \quad Q_{u+1}^{(x_i)} = 0$$

Nun noch Beispiele von standard- Gewichtsfunktionen, Grenzen und $Q_u(x)$:

$$w(x) = 1 \quad a = -1 \quad b = +1 \quad \text{Legendre - Polynome}$$

$$w(x) = e^{-x} \quad a = 0 \quad b = \infty \quad \text{Laguerre - Polynome}$$

$$w(x) = e^{-x^2} \quad a = -\infty \quad b = \infty \quad \text{Hermite - Polynome}$$

Die Koeffizienten A_i und \tilde{A}_i ergeben sich wieder aus der Integration über die Lagrange-Darstellung des Interpolationspolynoms $P_u(x_i) = f(x_i)$:

$$\int_a^b P_u(x) \cdot w(x) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i(x) \cdot w(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b L_i(x) \cdot w(x) dx \Rightarrow \tilde{A}_i = \int_a^b L_i(x) w(x) dx$$

Nun noch eine kleine Besonderheit der Gauß-Integration :

$[L_i(x)]^2$ ist ein Polynom vom Grade $2u$, wird also exakt integriert :

$$\Rightarrow \int_a^b [L_i(x)]^2 w(x) dx = \sum_{k=0}^n \tilde{A}_k \left[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_k - x_j)^2 \right] = \sum_{k=0}^n \tilde{A}_k \delta_{ik} = \tilde{A}_i$$