

Ein vereinfachtes Rechenverfahren für das Optische Kernmodell

Von MAX KRELL *

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg
(Z. Naturforsch. 19 a, 406—409 [1964]; eingegangen am 7. November 1963)

Nach der Methode des Optischen Kernmodells werden Wirkungsquerschnitte für potentialelastische Streuung und „Absorption“ $[\sigma_{el}(\theta), \sigma_{el}, \sigma_r, \text{ sowie } \sigma_t = \sigma_{el} + \sigma_r]$ für Neutronen bis zu Energien von ca. 20 MeV berechnet. Dazu wird ein einfaches Rechenschema entwickelt, welches ohne großen Aufwand numerisch genaue Werte für die Wirkungsquerschnitte liefert und weitgehend unabhängig von der Form des Potentials ist. Der in den Rechnungen verwendete Potentialansatz enthält zwei geometrische Parameter (r_0, a) . Die Tiefe des reellen Potentials erweist sich als vom Atomgewicht und der Energie weitgehend unabhängig, doch muß der Imaginärteil, der oberflächenverstärkt angesetzt wird, mit einem empirisch angepaßten, energieabhängigen Faktor versehen werden. Für die betrachteten Kerne Fe^{56} , Sn^{118} und Bi^{209} ergibt sich dann eine erstaunlich gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment.

Das Optische Kernmodell¹, das den Atomkern in Analogie zur Optik als grauen Körper auffaßt und hauptsächlich für Streuprobleme im MeV-Bereich sehr erfolgreich ist, schafft eine Möglichkeit, mit Hilfe weniger Parameter eine große Mannigfaltigkeit von Meßergebnissen, insbesondere über Wirkungsquerschnitte, wiederzugeben und zu ordnen.

Rechnerisch findet man Wirkungsquerschnitte über die Amplituden η_l der auslaufenden Partialwellen, wobei wir also die durch den Kern gestörte ebene Welle im Außenraum in Form von ein- und auslaufenden Partialwellen darstellen:

$$u_l^a = u_l^{(-)} - \eta_l u_l^{(+)} \quad (1)$$

Wenn wir die Kerne zunächst kugelförmig annehmen und an spinlose Neutronen denken, so lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung für den Radialteil der Wellenfunktion

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_{\text{opt}}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l = 0 \quad (2)$$

Das Optische Potential $V_{\text{opt}}(r)$ ist bereits in zahlreichen Rechnungen untersucht worden. Dabei ergab sich folgendes: Der Realteil des komplexen Optischen Potentials hat im Kerninnern einen konstanten negativen Wert U_0 von etwas über 40 MeV, der am Rand stetig gegen Null abfällt. Der Betrag W_0 des — bei Absorption negativen — Imaginärteils hängt von der Energie E der einfallenden Teilchen ab. Außerdem zeigt sich, daß dieser Imaginärteil im Bereich der Kernoberfläche verstärkt anzusetzen ist.

In der vorliegenden Arbeit wurde für die Rechnung ein $V_{\text{opt}}(r)$ konstruiert, das obigen Anforderungen an ein solches Potential gerecht wird:

$$V_{\text{opt}}(r) = - \left[\frac{U_0}{2} (1 + \cos \varphi) + i \frac{W_0}{2} (1 + \cos \varphi + \nu \sin^2 \varphi) \right] \quad (3)$$

$$\varphi = \varphi(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r \leq R_0, \\ \frac{r-R_0}{a} \pi & \text{für } R_0 \leq r \leq R, \\ \pi & \text{für } r \geq R, \end{cases}$$

$$R - R_0 = a; \quad \bar{R} = r_0 \cdot A^{1/3} + \frac{1}{2} a;$$

$$U_0 = 42 \text{ MeV}; \quad W_0 = W_0(E); \quad \nu = 3;$$

$$\frac{1}{2} a = 0,7 f; \quad R_0 = r_0 \cdot A^{1/3}; \quad r_0 = 1,25 f.$$

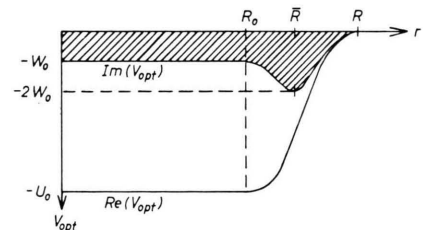


Abb. 1. Das optische Potential nach dem Ansatz (3).

Bei der Integration der SCHRÖDINGER-Gleichung (2) haben wir im Inneren Lösungen $u_l^i(r)$ mit der Randbedingung $u_l^i(0) = 0$, im Außenraum Lösungen $u_l^a(r)$ mit dem bekannten Verhalten der $u_l^a(r)$ für $r \rightarrow \infty$ zu suchen. Bei definiertem Kernrand erhalten wir sodann die Amplituden η_l , die gesuchten ein-

* Neue Anschrift: Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik im Kernforschungszentrum Karlsruhe.

¹ H. BETHE, Phys. Rev. 57, 1125 [1940]; 47, 747 [1935]. — H. FESHBACH, C. PORTER u. V. F. WEISSKOPF, Phys. Rev. 96, 448 [1954].



zigen Unbekannten, durch die Forderung, daß die Wellenfunktion und deren Ableitung stetig vom Innen- in den Außenraum übergehen muß. Bestimmend für die η_l sind die logarithmischen Ableitungen der Partialwellen am Kernrand:

$$f_l = \left[\frac{du_l/dr}{u_l} \right]_{r=R}; \quad (4)$$

sie sind dimensionslos und machen den Rechengang frei von einfallenden Intensitäten. Wenn wir nun die logarithmischen Ableitungen vom Kerninnern und vom Außenraum her gleichsetzen

$$[f_l^i = f_l^a]_{r=R}; \quad (5)$$

dann können wir, da die $u_l^{(-)}$ und $u_l^{(+)}$ der Gl. (1) bekannt und die u_l^i bzw. die zugehörigen Werte $f_l^i(R)$ bestimmbar sind, daraus die η_l gewinnen, die sich in bekannter Weise² schreiben:

$$\eta_l = \frac{f_l^i - \Delta_l + i S_l}{f_l^i - \Delta_l - i S_l} \cdot e^{2i\zeta_l}. \quad (6)$$

Die Aufgabe lautet nun, die $f_l^i(R)$ zu berechnen. Dazu muß die SCHRÖDINGER-Gleichung mit Potentialfunktionen obiger Art integriert werden. Da dies analytisch nicht mehr möglich ist, ist man auf numerische Integration angewiesen.

Im folgenden wird nun über einen nicht üblichen Weg der Integration, der sich als relativ leicht gangbar herausgestellt hat, berichtet. Ausgehend von der Definition eines Integrals als Grenzwert einer Summe, könnte man den Versuch machen, das Potential stufenförmig zu unterteilen, die Bedingung stetigen Anschlusses (5) am Stufenrand zu benutzen und eine elektronische Rechenanlage bei genügender Stufenzahl hinreichend genau rechnen zu lassen. An einem inneren Kernrand R_0 , bis zu dem das Potential ungefähr konstant ist, können wir mit den einfachen Formeln des Kastenpotentials für die logarithmischen Ableitungen beginnen³.

$$f_0(R_0) = K_0 R_0 \frac{J_{-1/2}(K_0 R_0)}{J_{1/2}(K_0 R_0)}; \quad f_l(R_0) = \frac{(K_0 R_0)^2}{l - f_{l-1}} - l. \quad (7)$$

Aber die Anschlüsse schon beim ersten Stufenrand werden recht kompliziert, denn wir haben es mit

Linearkombinationen von BESSEL-Funktionen komplexen Arguments zu tun.

Bedeutend einfacher und trotzdem sogar genauer wird das Verfahren jedoch, wenn man das Potential zusammen mit dem $l(l+1)/r^2$ -Term durch Stufenbildung annähert. Die Differentialgleichung ist dann innerhalb einer solchen Stufe von dem einfachsten Typ 2. Ordnung:

$$\frac{d^2 u_l^n}{dr^2} + [(\mathcal{A}_l^n)^2] u_l^n = 0, \quad (8)$$

wobei die $(\mathcal{A}_l^n)^2$ Mittelwerte der Energieklammer von Gl. (2) in der n -ten Stufe sind. Die Lösungen sind einfach:

$$u_l^n = \exp\{-i \mathcal{A}_l^n r\} + \mathcal{A}_l^n \exp\{i \mathcal{A}_l^n r\}. \quad (9)$$

Genauer wird das Verfahren überdies deshalb, weil bei allen $l \neq 0$ das neue effektive Potential im Bereich $R_0 \leq r \leq R$ durch die Differenz des eigentlichen $V_{\text{opt}}(r)$ und der Zentrifugalbarriere dargestellt wird, also insgesamt sanfter abfällt und damit die Stufenunterteilbarkeit begünstigt.

Jetzt lassen sich leicht Rekursionsformeln angeben, die aus den $f_l(R_0)$ die Amplituden \mathcal{A}_l^1 der ersten und aus diesen die \mathcal{A}_l^N der letzten Stufe liefern, mit deren Kenntnis dann die Werte $f_l^i(R)$ gebildet und schließlich die η_l und die Wirkungsquerschnitte berechnet werden können.

Die Kette sieht dann so aus:

$$f_0(R_0) \rightarrow f_l(R_0) \rightarrow \mathcal{A}_l^1 \rightarrow \dots \mathcal{A}_l^N \rightarrow f_l(R) \rightarrow \eta_l.$$

Die Pfeile stehen stellvertretend für Rekursionsformeln des Rechenganges. Der erste und letzte Pfeil stellt die Gln. (7) bzw. (6) dar. Die anderen Formeln gewinnt man aus den Ansätzen:

$$f_l(R_0) = \left[\frac{(u_l^1)'}{u_l^1} \right]_{r=R_0} \cdot R_0;$$

$$\text{dann} \quad \left[\frac{(u_l^n)'}{u_l^n} \right]_{r=R_n} = \left[\frac{(u_l^{n+1})'}{u_l^{n+1}} \right]_{r=R_n}$$

$$\text{sowie} \quad \left[\frac{(u_l^N)'}{u_l^N} \right]_{r=R_N=R} \cdot R = f_l(R),$$

und zwar lauten sie explizit:

$$\mathcal{A}_l^1 = \exp\{-2i \mathcal{A}_l^1 R_0\} \frac{i \mathcal{A}_l^1 R_0 + f_l(R_0)}{i \mathcal{A}_l^1 R_0 - f_l(R_0)}; \quad (10)$$

$$\mathcal{A}_l^{n+1} = \exp\{-2i \mathcal{A}_l^{n+1} R_n\} \frac{\mathcal{A}_l^n (\mathcal{A}_l^{n+1} + \mathcal{A}_l^n) + \exp\{-2i \mathcal{A}_l^n R_n\} (\mathcal{A}_l^{n+1} - \mathcal{A}_l^n)}{\mathcal{A}_l^n (\mathcal{A}_l^{n+1} - \mathcal{A}_l^n) + \exp\{-2i \mathcal{A}_l^n R_n\} (\mathcal{A}_l^{n+1} + \mathcal{A}_l^n)}; \quad (11)$$

$$f_l(R_N=R) = i \mathcal{A}_l^N R \frac{\mathcal{A}_l^N \exp\{2i \mathcal{A}_l^N R\} - 1}{\mathcal{A}_l^N \exp\{2i \mathcal{A}_l^N R\} + 1}. \quad (12)$$

² J. M. BLATT u. W. F. WEISSKOPF, Theoretical Nuclear Physics, J. Wiley & Sons, New York 1960, S. 333.

³ F. M. MEDINA u. G. SÜSSMANN, Fortschr. Phys. 4, 297 [1956].

Die komplexen Konstanten A_l^n werden zu Anfang aus dem Potentialansatz an den Stellen r_n ausgerechnet und in Form einer Matrix gespeichert. Die Zerlegung des Intervalles $R - R_0 = a$ kann z. B. linear erfolgen:

$$R_n = R_0 + \frac{a n}{N} \quad \text{und} \quad r_n = R_0 + a \frac{(2n-1)}{2N}.$$

Die Rechnungen können nun ausgeführt werden, und die Ergebnisse werden bestimmt durch die Parameter des Optischen Kernmodells. Nach einigen Proberechnungen mit gleichzeitiger Anpassung der gerechneten an die gemessenen totalen Wirkungsquerschnitte und an die Winkelverteilung der elastischen Streuung zeigte es sich, daß ein mit der Energie E und dem Atomgewicht A konstanter Parameteransatz U_0 , r_0 , a und ν , wie er unter (3) angegeben ist,

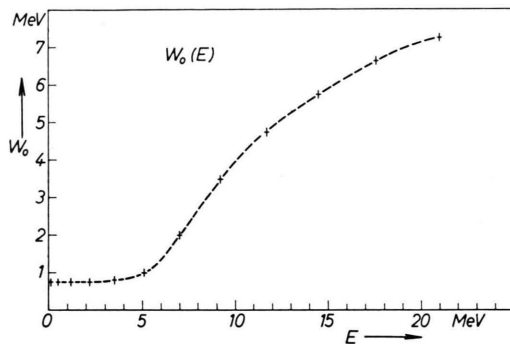


Abb. 2. Der Imaginärteil des optischen Potentials in Abhängigkeit von der Neutronenenergie im Schwerpunktsystem. Mit den angegebenen Parametern ergeben sich ohne jede weitere Variation die in den folgenden Abbildungen dargestellten Kurven.

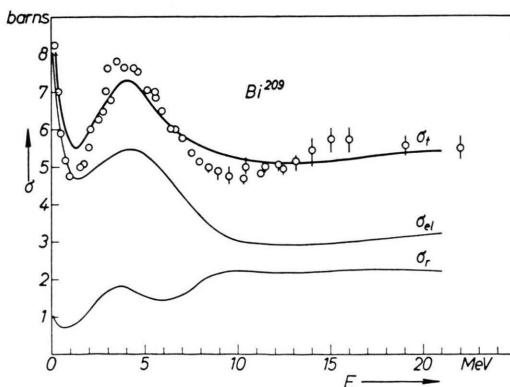


Abb. 3. Der elastische Streuquerschnitt σ_{el} , der Reaktionsquerschnitt σ_r sowie der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma_t = \sigma_{el} + \sigma_r$ von Bi^{209} in Abhängigkeit von der Neutronenenergie.

durchschnittlich gute Übereinstimmung liefert. Der Imaginärteil W_0 mußte dabei jedoch energieabhängig angesetzt werden. Die bei bestmöglicher Anpassung sich ergebenden Werte für W_0 sind in Abb. 2 dargestellt.

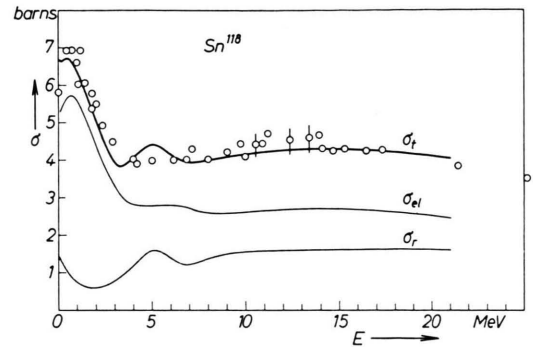


Abb. 4. Der elastische Streuquerschnitt σ_{el} , der Reaktionsquerschnitt σ_r sowie der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma_t = \sigma_{el} + \sigma_r$ von Sn^{118} in Abhängigkeit von der Neutronenenergie. Kreise: experimentelle Werte für σ_t .

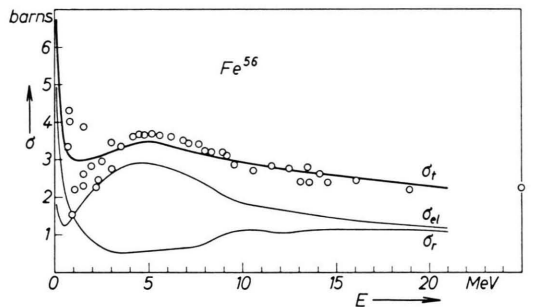


Abb. 5. Der elastische Streuquerschnitt σ_{el} , der Reaktionsquerschnitt σ_r sowie der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma_t = \sigma_{el} + \sigma_r$ von Fe^{56} in Abhängigkeit von der Neutronenenergie. Kreise: experimentelle Werte für σ_t .

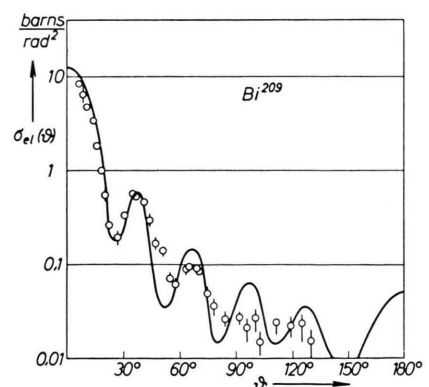


Abb. 6. Die Winkelabhängigkeit des elastischen Streuquerschnitts von Bi^{209} für 14,5 MeV-Neutronen (im Schwerpunktsystem).

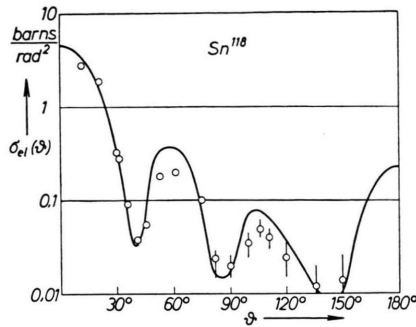


Abb. 7. Die Winkelabhängigkeit des elastischen Streuquerschnitts von Sn^{118} für 7,0 MeV-Neutronen (im Schwerpunktsystem).

Bei Bi^{209} , einem auf Grund magischer Neutronenzahl relativ stabilen und kugelförmigen Kern, erkennt man (Abb. 3), daß die theoretische Kurve σ_t stärker gedämpft ist als die experimentelle, daß also das $W_0(E)$ insgesamt etwas niedriger gewählt werden müßte als es zum Zwecke einer in A durchschnittlichen Übereinstimmung getan wurde.

Bei Sn^{118} (Abb. 4) weist die theoretische Kurve eine geringfügige Abweichung in Gestalt eines kleinen, durch Neutronen vom Bahndrehimpuls $l=4$ verursachten, Nebenmaximums auf. Wenn die Experimente zuverlässig sind, wird man annehmen müssen, daß hier ein Spin-Bahn-Term zur Wirkung kommt; ein solcher könnte die erforderliche „Dämpfung“ von σ_t bei $E \approx 5$ MeV bewirken.

Zum Studium der Winkelverteilung der elastisch gestreuten Neutronen, des $\sigma_{el}(\vartheta)$, eignen sich vor allem schwere Kerne bei höheren Energien, weil dann die Kurven mehrere Extrema aufweisen. Die Abbildungen 6 und 7 zeigen, daß das bei dieser Arbeit gewählte Potential in Form und Größe auch die differentiellen Wirkungsquerschnitte befriedigend wiedergibt.

Der auffälligste Unterschied zwischen den gemessenen und berechneten Kurven ist hier, daß letztere stärkere Interferenzmaxima und -minima aufweisen als erstere. Auch diese Unstimmigkeit ist nur unter Berücksichtigung einer Spin-Bahn-Kopplung und gegebenenfalls der Deformation sinnvoll zu beheben.

Bei kleinen Energien der einfallenden Neutronen sind die Größen U_0 und R in der Form $U_0 R^2$ miteinander verknüpft und eine Verkleinerung von R^2 macht bei den Wirkungsquerschnitten denselben Effekt wie eine solche von U_0 . Man kann erst dann

U_0 und R getrennt bestimmen, wenn man zu höheren Energien übergeht. Der Weg, U_0 und R bei $E \rightarrow 0$ über die Stärkefunktion $\overline{T}n^0/D$ zu beziehen, stößt auf Schwierigkeiten, weil diese Funktion sehr empfindlich von der Deformation der getroffenen Kerne abhängt. Zur absoluten Bestimmung von U_0 und R bestehen also die beiden Wege: Variation der Wirkungsquerschnitte mit der Energie bei festgehaltenem A oder Auftragung der Stärkefunktion entlang der Atomgewichtsskala bei fester Energie E . Das erste Verfahren funktioniert offenbar immer; denn für große Energien strebt der totale Wirkungsquerschnitt gegen $2\pi R^2$. Am zweckmäßigsten erscheint es aber, eine Gesamtheit von experimentellen und theoretischen Wirkungsquerschnittsdaten sowohl entlang der Atomgewichts- als auch der Energieskala zu vergleichen, wie es FESHBACH, PORTER und WEISSKOPF¹ getan haben und wie es auch in dieser Arbeit geschehen ist, und einen einheitlichen Parametersatz zu extrahieren.

Es sei darauf hingewiesen, daß die Aufnahme eines einzigen sinnvollen Parameters, des Maßes für Oberflächenabsorption ν , selbst wenn er konstant angesetzt wird (hier $\nu=3$, was einem Anwachsen des imaginären Potentials an der Oberfläche aufs doppelte desjenigen im Kernmittelpunkt entspricht), offensichtlich eine erhebliche Verbesserung des Gesamtkurvencharakters gegenüber dem Fall, wo der Imaginärteil proportional zum Realteil des Potentials verläuft⁴, bewirkt bzw. viele Einzelanpassungen erübrigt. Auf diese sollte nämlich ganz verzichtet und es sollten statt dessen andere wichtige Größen in den Rechengang aufgenommen werden, um der Forderung nach Übereinstimmung zwischen Theorie und Experimenten zu genügen. Das Optische Kernmodell erweist sich dann umgekehrt als empfindliche „Sonde“ zur Bestimmung gewisser Kerneigenschaften.

Dieser Bericht über einen Teil meiner Arbeit am Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg wäre unvollständig, ohne den besonderen Dank Herrn Prof. Dr. VOLZ für die Anregung zu dieser Arbeit und ihre großzügige Förderung ausgesprochen zu haben. An dieser Stelle seien auch die zahlreichen fruchtbaren Diskussionen mit meinem Kollegen HANS RAUM, die kräftige Unterstützung beim Programmieren durch Herrn Dipl.-Phys. HEIM sowie das Entgegenkommen der Siemens-Schuckert-Werke, Erlangen, die Rechnung auf ihrer „Siemens 2002“ durchführen zu dürfen, dankbar erwähnt.

⁴ J. R. BEYSTER, M. WALT u. E. W. SALMI, Phys. Rev. **104**, 1319 [1956].