

Ein Vergleich von Eigenkanal- und R-Matrix-Theorie *

R. PETZOLD ** and A. GRAUEL

Institut für Theoretische Physik der Universität Frankfurt, Frankfurt/Main, Germany

(Z. Naturforsch. 27 a, 1508—1515 [1972]; eingegangen am 16. Mai 1972)

Comparison of Eigenchannel and R-Matrix Reaction Theories *

The convergence of the eigenchannel (EK) and R-matrix (RM) theories — depending on their free parameters — is numerically investigated by comparing with a simple, analytically solvable model. The comparison shows that the results of the EK-theory are in general closer to the exact solution than those of the RM-theory. Especially in regions of sharp resonances the dependence of the expansion of the wave functions on the interaction radius a_c and on the boundary condition B_c is very strong in the RM-theory and one needs very many levels to achieve good results.

I. Problemstellung

Nachdem in den letzten Jahren eine ganze Reihe von Theorien (phänomenologische und mikroskopische) zur Behandlung von Kernreaktionen entwickelt worden ist, wendet sich das Interesse jetzt mehr der Anwendung dieser Methoden zu. In dieser Arbeit sollen zwei Methoden verglichen werden, die auf einer Parametrisierung der S-Matrix durch Einführung von Kanalradien a_c und Randbedingungen B_c basieren¹⁻⁴. Dazu wird postuliert, daß es zu jedem Kanal c der Reaktion eine kleinste Distanz a_c gibt, so daß außerhalb des Gebietes $r \leq a_c$ keinerlei Wechselwirkungen zwischen den Ejektile herrscht, die ganze Wechselwirkung also im Innenraum stattfindet. Die Wahl der Randbedingung ist in der RM-Theorie reell. In der EK-Theorie ebenfalls, ihr Wert bestimmt sich aus der logarithmischen Ableitung der Wellenfunktion in den physikalischen Kanälen an der Stelle $r = a_c$. Die spezielle Wahl von komplexen Randbedingungen bedingt komplexe Energien, eine spezielle komplexe Wahl von B_c die Kapur-Peierls-Theorie. Der Vorteil einer solchen Wahl liegt darin, daß bei der Bestimmung der S-Matrix eine Matrixinversion gegenüber der RM-Behandlung vermieden wird; die vorkommende Reihenentwicklung ist von derselben Art wie bei der RM-Darstellung.

Für praktische Rechnungen und Interpretationen von Experimenten ist es wichtig, die Leistungsfähigkeit der verschiedenen Methoden genau zu kennen. Aus diesem Grund untersuchen wir das Konvergenzverhalten, die numerische Genauigkeit und den er-

forderlichen Aufwand der EK-Theorie^{3, 4} und RM-Theorie^{1, 2} in Abhängigkeit von ihren freien Parametern a_c und B_c im Zweiteilchenkanal. Geeignet dazu ist das einfache Modell der elastischen Streuung ungeladener, spinloser Teilchen an einem Kastenpotential⁵⁻⁷. Hier lassen sich sowohl die R_l -Funktion

$$R_l(E) = \left\{ \frac{u_{E,l}}{r \cdot u'_{E,l} - B_l \cdot u_{E,l}} \right\}_{r=a_c} \quad (1)$$

als auch die Streuphasen δ_l (unabhängig von den beiden zu betrachtenden Theorien)

$$\delta_l = \frac{\alpha j_l(kr) j'_l(\alpha r) - k j_l(\alpha r) j'_l(kr)}{\alpha n_l(kr) j'_l(\alpha r) - k j_l(\alpha r) n'_l(kr)} \Big|_{r=r_0} \quad (2)$$

mit den Wellenzahlen

$$k^2 = (2m/\hbar^2) E \text{ und } \alpha^2 = k^2 + (2m/\hbar^2) V_0 \quad (3)$$

analytisch berechnen.

Damit kann das Konvergenzverhalten der RM-Darstellung

$$R_l(E) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{\gamma_{\lambda l}^2}{E_{\lambda l} - E} \quad (4)$$

und der über die RM gewonnenen Streuphasen

$$\delta_l(E) = \arctg \frac{R_l P_l}{1 - R_l(S_l - B_l)} - \Phi_l \quad (5)$$

getestet werden. Hierbei sind S_l und P_l die wohl-bekannten Verschiebungs- und Durchdringungsfaktoren, die definiert sind als Real- und Imaginärteil der logarithmischen Ableitung der l -ten auslaufenden Partialwelle, also $\left(r \frac{O'_l}{O_l} \right)_{r=a_c}$. Φ_l ist die Streu-

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. W. GREINER, Institut für Theoret. Physik der Universität Frankfurt/M., D-6000 Frankfurt/Main 1, Robert-Mayer-Straße 8—10.

* Diese Arbeit wurde durch das Bundesministerium für Bildung und Wissenschaft gefördert.

** Neue Anschrift: Institut für Kernphysik der Universität Mainz.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

phase für eine „starre“ Kugel. B_l ist die für die l -te Partialwelle willkürlich vorgegebene reelle Randbedingung [Gl. (6)]. Im einzelnen wird untersucht, wie gut die exakten Ergebnisse (1) und (2) durch (4) und (5) approximiert werden, wenn sich die Summation in (4) nur über die ersten Zustände λ erstreckt, insbesondere welchen Einfluß die Parameter Abschneideradius a_l und Randbedingung B_l , sowie ein λ_{\max} haben, wenn eine bestimmte Genauigkeit gefordert wird.

Bei der EK-Rechnung sind die Streuphasen im Prinzip exakt bestimmbar⁴; bei praktischen Rechnungen werden sie iterativ ermittelt in Abhängigkeit von Streuenergie E und Abschneideradius a_c .

Eine Ausdehnung der Überlegungen auf die inelastische Streuung erscheint uns nicht notwendig, da sich prinzipiell keine neuen Aspekte ergeben. Sinngemäß sind diese Überlegungen auch für Dreiteilchenreaktionen gültig, allerdings ist hier der Index für die l -te Partialwelle durch den Kanalindex $l_1 + l_2 + 2n + \frac{3}{2}$ im Dreiteilchenkanal⁸ zu ersetzen. Die Kanalwellenzahl k hat eine diskrete Quantenzahl n und eine Verteilungsfunktion zur Folge. l_1 und l_2 sind die Drehimpulse der beteiligten Teilchen. Die radiale Abhängigkeit der Kanalwellenfunktion ist durch $r^{-5/2}$ gegeben, gegenüber der $(1/r)$ -Abhängigkeit bei den Zweiteilchenkanälen für Stromnormierung⁸.

II. Bestimmung der R-Matrix und der Eigenphasen

Der Einfachheit wegen wählen wir ein Kastenpotential

$$V = \begin{cases} -V_0 & r \leq r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases} \quad (1)$$

Der Potentialradius r_0 ist damit zugleich eine untere Grenze für die Wahl des Abschneideradius a_c .

Die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung lautet

$$u_l(kr) = kr [\alpha_l j_l(kr) - \beta_l n_l(kr)], \quad (2)$$

wobei j_l , n_l die sphärische Bessel- bzw. Neumann-Funktionen sind. Für $r < r_0$ gilt $\beta_l \equiv 0$ und die Wellenzahl hat die Form

$$\kappa^2 = (2m/\hbar^2) (E + V_0). \quad (3)$$

Für $r \geq r_0$ gilt folgender Zusammenhang zwischen der Streuphase und den Koeffizienten α_l , β_l :

$$\tan \delta_l = \beta_l / \alpha_l \quad (4)$$

und die Wellenzahl hat die Form

$$k^2 = (2m/\hbar^2) E. \quad (5)$$

Das Verhältnis β_l/α_l wird durch die Forderung eines stetigen logarithmischen Übergangs am Potentialrand bestimmt. α_l wird durch stetigen Übergang der Wellenfunktionen selbst bestimmt. Die damit eindeutig bestimmte Lösung u_l wird im Innenraum $r \leq a$ normiert.

Die für die RM fundamentalen Energie-Eigenwerte $E_{\lambda l}$ und die dazugehörigen reduzierten Weiten $\gamma_{\lambda l}$ werden durch die Wurzeln der transzendenten Gleichung

$$\left(\frac{r}{u_l} \frac{du_l}{dr} \right)_{r=a_l} = B_l \quad (6)$$

bestimmt, wobei B_l eine beliebige, reelle Randbedingung ist. Die RM läßt sich jetzt also sowohl gemäß Formel (I.1) als auch nach (I.4) berechnen.

Da beim gewählten Modell die Streu-Matrix schon diagonal ist, stimmen die Streuphasen δ_l mit den Eigenphasen der EK-Theorie überein. Die Schrödinger-Welle mit dem richtigen asymptotischen EK-Verhalten hat die Form⁴

$$f_l(kr, \delta_l) = kr (\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)) \quad (7)$$

und liegt folglich für eine gegebene Energie E bis auf die vom Potential bestimmte Streuphase δ_l fest.

Wir berechnen jetzt die logarithmischen Ableitungen $b_l^{(v)}(E)$ der Funktion (7), indem wir für die zu findenden Streuphasen δ_l verschiedene Werte $\delta_l^{(v)}(E)$ aus dem Intervall $[-\pi/2, +\pi/2]$ vorgeben. Zu jedem dieser $b_l^{(v)}(E)$ bestimmen wir wie oben unter (6) einen Satz von Einteilchenlösungen. Die Anregungsenergie E wird mit diesen Einteilchenenergien verglichen und $\delta_l^{(v)}(E)$ solange variiert, bis eines dieser Niveaus mit der Anregungsenergie E übereinstimmt, $\delta_l^{(v)}(E)$ also genau den Wert der Streuphase $\delta_l^{(v)}(E)$ erreicht hat. Dieses Iterationsverfahren ist für jede gewünschte Streuenergie E zu wiederholen.

III. Numerische Ergebnisse

In der vorliegenden Arbeit wurden für das Potential die Werte $V_0 = 50$ MeV, $r_0 = 5$ fm gewählt. Die Abb. 1 und 2 zeigen die Abhängigkeit der Energie-Eigenwerte $E_{\lambda l}$ von den Parametern a_l und B_l . In einem Bereich mittlerer B_l -Werte variieren die Eigenwerte $E_{\lambda l}$ relativ stark und erreichen bei unbe-

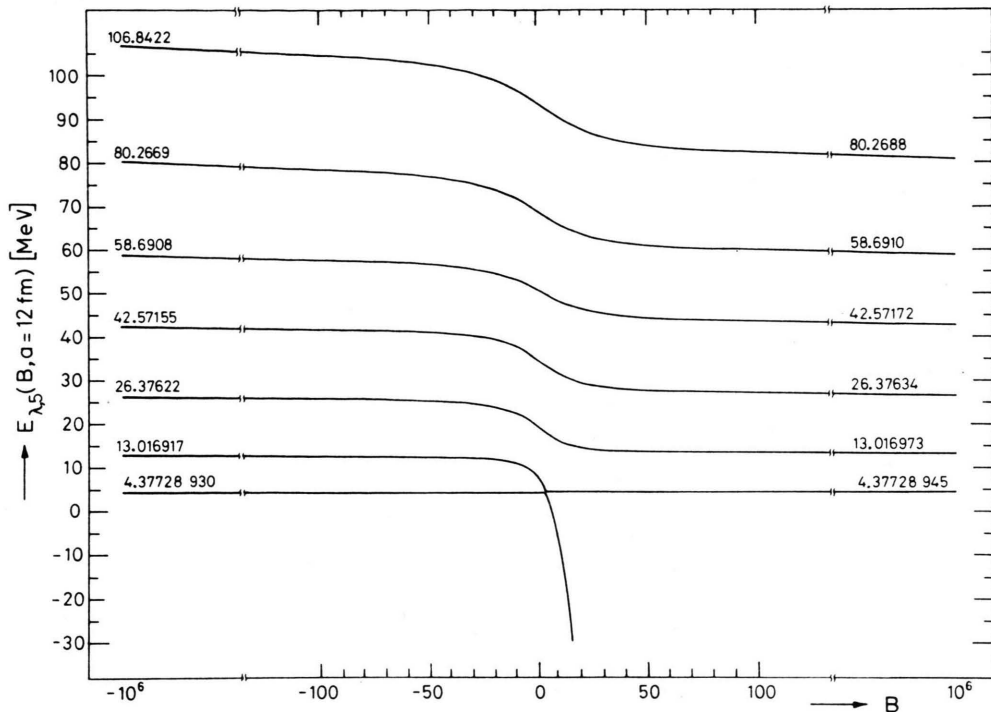


Abb. 1. Abhängigkeit der Eigenwerte $E_{\lambda l}$ von der Randbedingung B und dem Abscheideradius $\alpha=12$ fm für Drehimpuls $l=5$.

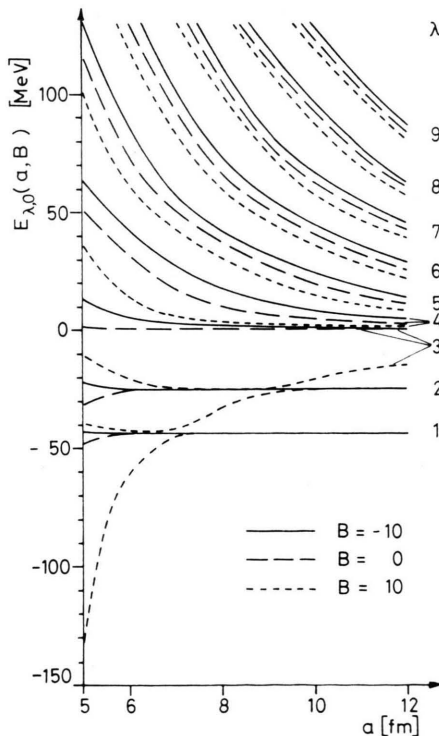


Abb. 2. Abhängigkeit der Eigenwerte $E_{\lambda l}$ von der Wahl des Abscheideradius α bei drei verschiedenen Randbedingungen B für Drehimpuls $l=0$.

schränkt wachsenden oder fallenden B_l -Werten einen Grenzwert, so daß

$$\lim_{B_l \rightarrow -\infty} E_{\lambda l}(B_l) = \lim_{B_l \rightarrow +\infty} E_{(\lambda+1)l}(B_l) \quad (1)$$

gilt, während sich die reduzierten Weiten dabei immer mehr dem Wert Null nähern. Beide Abbildungen zeigen, daß sowohl die gebundenen Zustände des Potentials (siehe Abb. 2) als auch die quasi-gebundenen Zustände (siehe Abb. 1) nahezu B_l -unabhängig reproduziert werden; dies um so besser, je größer der Abscheideradius α_l gewählt wird. Mit wachsendem B_l beginnt ein Niveau energetisch immer tiefer zu wandern, welches quadratisch in der Energie gegen $-\infty$ strebt^{6, 7}.

Damit ist das Verhalten der in der RM-Theorie enthaltenen Größen bei Veränderung der Parameter α_l und B_l genügend geklärt — die Funktionen S_l und P_l sind relativ schwach veränderliche, monotone Funktionen der Energie und des Abscheideradius —, so daß wir uns jetzt den eigentlichen Rechnungen zuwenden können.

Die Abb. 3 und 4 zeigen im linken oberen Bild zum einen die R_l -Funktion für $B_l=0$ gegen die Anregungsenergie E aufgetragen (gestrichelte Linien). Zum zweiten werden alle bei Randbedingungen zwi-

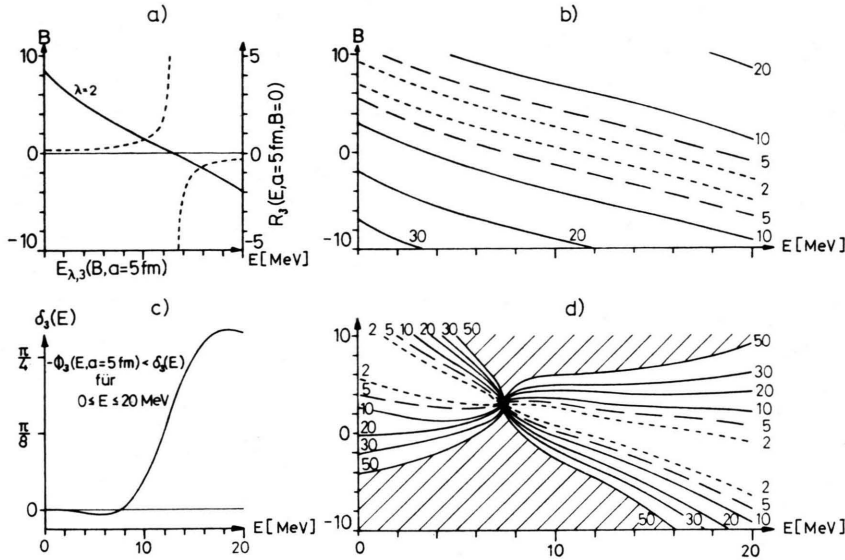


Abb. 3. Abbildung a) zeigt die Abhängigkeit der $R_{l=3}$ -Funktion von der Anregungsenergie E (gestrichelte Linie) für die Parameter $\{a=5 \text{ fm}, B=0\}$ der Partialwelle $l=3$. Die durchgezogene Linie zeigt die Abhängigkeit der Eigenwerte E_{il} von der log. Ableitung B . c) zeigt den Verlauf der zugehörigen Streuphase $\delta_{l=3}$. Für denselben Wertebereich von E und B zeigen die Abb. b) und d) den Verlauf von λ_{\max} für R_l und δ_l . Für λ_{\max} wurde gefordert, daß der relative Fehler von R_l und δ_l 10% nicht übersteigt. Die Einschnürung in Abb. d) liegt bei einer Streuenergie, an der δ_3 einen Nulldurchgang besitzt.

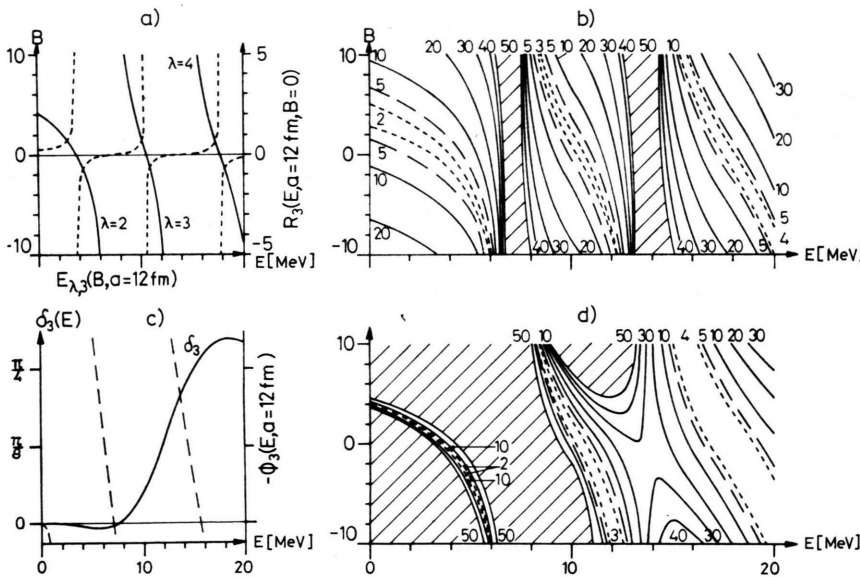


Abb. 4. Ergebnisse einer RM-Rechnung für einen Abscheideradius von $a=12 \text{ fm}$, bei sonst gleichen Parametern wie Abb. 3. Die gestrichelten Linien in c) zeigen den Verlauf der hard sphere scattering phase shift Φ . In den schraffierten Bereichen ist $\lambda_{\max}=50$ nicht ausreichend zur Erzielung einer 90-proz. Genauigkeit, insbesondere für δ_l bei kleinen Streuenergien (Abb. b). Günstig ist es, wenn — wie z. B. Abb. 3 für kleinen Abscheideradius zeigt — $\lambda_{\max}(B_l = \text{fest})$ über größere Energiebereiche nahezu konstant ist; dagegen verschlechtern sich die Resultate mit wachsendem Abscheideradius.

schen -10 und $+10$ im Energiebereich von 0 MeV bis 20 MeV liegenden Eigenwerte E_{il} zum Drehimpuls $l=3$ und die Abscheideradien $a_l=5 \text{ fm}$, $a_l=12 \text{ fm}$ (4) eingezeichnet. Das rechte obere Bild zeigt, wieviel Levels in der Entwicklung (I.4) mitgenommen werden mußten, um bei der betreffenden Streuenergie E und den gegebenen B_l -Werten einen relativen Fehler zu erzielen, der unter 10% lag. Da maximal 50 Zustände mitgenommen wurden, sind all die Gebiete, für die dieser Aufwand nicht ausreichte, schraffiert.

Das linke untere Bild zeigt einmal die Streuphase $\delta_l(E)$ (glatte Linie) und im Falle (4) die hard sphere scattering phase shift $-\Phi_l(E; a_l)$; in (3) wurde sie nicht eingezeichnet, weil sie im ganzen betrachteten Gebiet kleiner als $\delta_l(E)$ war. Die beiden Phasen sind immer dann gleich, wenn die R_l -Funktion Null ist. Das rechte untere Bild ist analog zum darüberliegenden für die Streuphasen zu verstehen.

Wie nicht anders zu erwarten, wurden die besten Ergebnisse in den Fällen erzielt, in denen ein Niveau

ungefähr gleich der Anregungsenergie ist, die R_l -Funktion also einen Pol hat. Der zugehörige energieabhängige Wert für B_l ist der „natürliche“ Wert b_l . Die Abb. 3, 4 lassen deutlich erkennen, wie mit wachsender Entfernung der Anregungsenergie E vom Level $E_{\lambda l}$, d. h. mit wachsender Differenz des B_l -Wertes vom natürlichen Wert b_l , die Ergebnisse immer schlechter werden. Der Bereich, in dem sich mit wenigen mitgenommenen Zuständen in der Summation eine gute Approximation an die exakten Werte erreichen läßt, folgt schlauchartig dem Verlauf der im betrachteten Energie-Intervall liegenden Levels $L_{\lambda l}(B_l, a_l)$. Auch die Linien, die einer Mitnahme von mehr Levels für gleich gute Konvergenz entsprechen, zeigen ein analoges Verhalten.

Natürlich wird der relative Fehler beim Nulldurchgang der Streuphase besonders schlecht, wie auch in Abb. 3 zu sehen ist. Einer starken B_3 -Abhängigkeit von E_3 — d. h. bei geringer Veränderung von B_3 verändert sich E_3 ziemlich stark — entsprechen dabei größere Abstände zwischen den verschiedenen Linien, die über die Güte der Approximation Auskunft geben. Je schwächer dagegen diese Abhängigkeit wird, desto dichter liegen diese Linien beisammen. Dies ist verständlich, denn eine schwache Abhängigkeit bedeutet, daß das Niveau nicht mehr allzu weit von seinem asymptotischen Wert entfernt ist. Dann wird aber, wie zuvor erwähnt, die reduzierte Weite sehr klein, die Bedeutung des Zustands in der Summation also geringer, so daß mehr Summanden erforderlich sind, um eine gute Annäherung

an die exakten Werte zu erzielen. Da die höherliegenden Levels infolge ihres großen „Energie-Nenners“ ebenfalls nur kleine Beiträge zur Summe liefern, sind bei solchen B_l -Werten sehr viele Niveaus mitzunehmen.

Dies gilt dann natürlich erst recht für den Bereich, wo die Anregungsenergie E zwischen zwei Niveaus $E_{\lambda l}$ und $E_{(\lambda+1)l}$ liegt. Für diese Energie wird die R_l -Funktion sehr klein, und hat dort auch immer einen Nulldurchgang.

Wenn dort auch sehr viele Summanden benötigt werden, um den relativen Fehler für die R_l -Funktion auf ein vernünftiges Maß zu drücken, so ist die Konvergenz für die daraus abgeleiteten Streuphasen (und Partialquerschnitte) weitaus besser, aber noch immer recht schwach.

Überhaupt läßt sich nur in einer relativ engen Umgebung der Niveaus $E_{\lambda l}(B_l, a_l)$ die Struktur des die Konvergenz der R_l -Funktion zeigenden Bildes auf die analogen Bilder für die damit gewonnenen Streuphasen übertragen. Der Zusammenhang zwischen Streuphase und Partialquerschnitt dagegen ist klar: Da die Streuphase quadratisch in den Partialquerschnitt eingeht, wird der relative Fehler für δ_l im Durchschnitt das Doppelte des relativen Fehler der Streuphase betragen.

Im Bereich einer scharfen Resonanz, hervorgerufen durch ein quasigebundenes Niveau — in den Abb. 5, 6 z. B. für $l=5$ bei einer Resonanzenergie von $E=4,36356$ MeV liegend — ist das Konvergenzverhalten stark abhängig von B_5 . Für kleinere Ab-

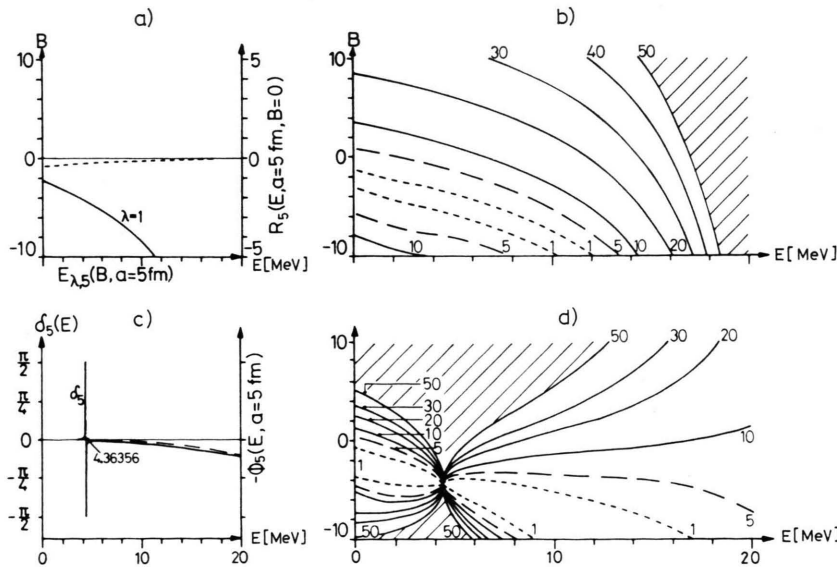


Abb. 5. Ergebnisse einer RM-Rechnung bei einem Abscheideradius von $a=5$ fm für die Partialwelle mit $l=5$. Insbesondere zeigt d) den Verlauf von λ_{\max} und die Einschnürung bei einer scharfen Resonanz von einem quasigebundenen Zustand.

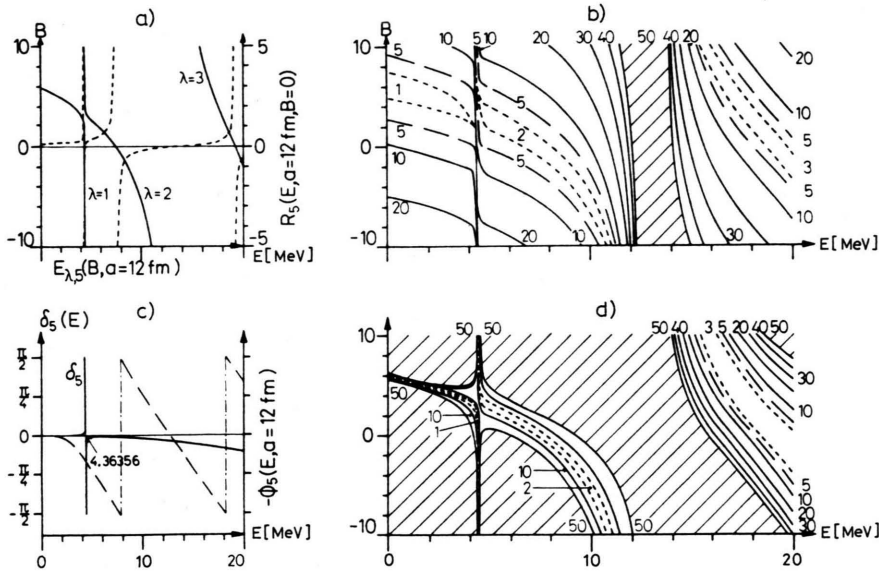


Abb. 6. Vergrößert man bei sonst gleichen Parametern, wie bei Abb. 5, den Abscheideradius a auf 12 fm, dann ergeben sich nur in bestimmten Bereichen der Anregungsenergie E befriedigende Genauigkeiten für R_l und δ_l (Abb. b und d).

schneideradien muß man sehr genau den natürlichen b_5 -Wert treffen (siehe Abb. 5), um gute Ergebnisse zu erzielen, für große Abscheideradien dagegen hat die Funktion im Bereich der Resonanzenergie einen Pol, und solange man sich auf dem „richtigen“ Ast des Pols befindet, ist die B_5 -Abhängigkeit nicht ganz so kritisch (siehe Abb. 6). In solchen Fällen ist die Wahl eines großen Abscheideradius also angezeigt, während sonst kleine Abscheideradien günstiger sein werden.

Für die EK-Rechnungen wurde das in Kap. II beschriebene Iterationsverfahren leicht modifiziert; es wurde nämlich direkt in den $b_l(E)$ -Werten iteriert und daraus die $\delta_l^{(v)}(E)$ berechnet. Dazu wurden anfangs für jeden interessierenden Drehimpuls l in einer quasilogarithmischen Teilung des B_l -Wertes, beginnend bei $-10^6, -10^5, \dots, 10^5, 10^6$, die Einteilchenenergie E_{il} berechnet. Für jede gewünschte Streuenergie E war dann nur noch zu prüfen, zum wievielten Niveau E_{il} und in welchen B_l -Werte-Bereich die Energie E gehörte (siehe Abb. 1), um anschließend mit einer sehr gezielten Iteration beginnen zu können. Abbildung 7 zeigt für den Drehimpuls $l=3$ und beim Abscheideradius $a_3=5$ fm das Prinzip dieses Verfahrens. Die stark gezeichnete Kurve gibt den Verlauf von $b_3(E)$ im Energieintervall 0–20 MeV wieder, die gestrichelt (---) und mit (1) gekennzeichneten „Treppen“ zeigen die erste Iteration $b_3^{(1)}(E)$ in $b_3(E)$, die strichpunktiert (---) und mit (3) gekennzeichneten entsprechend die 3. Iteration $b_3^{(3)}(E)$ und die stark gezeichnete

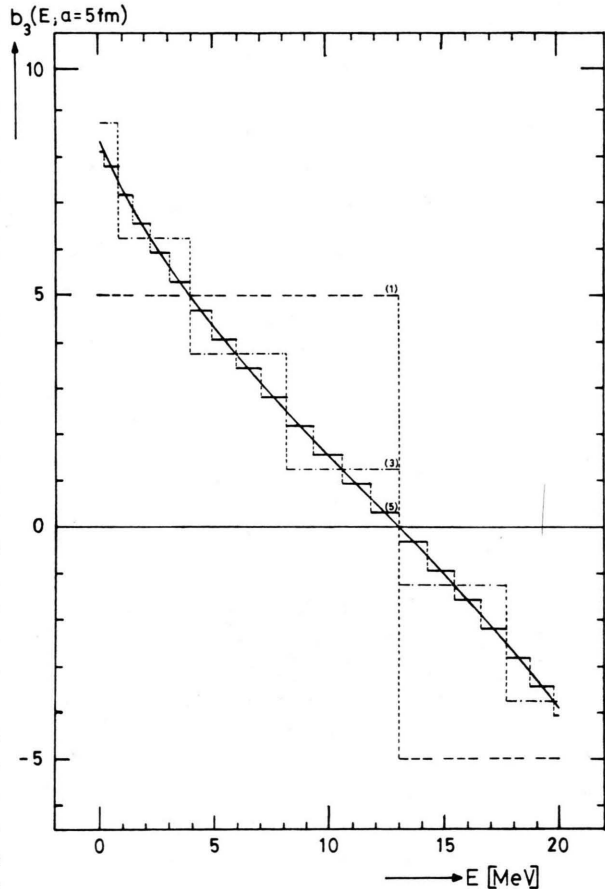


Abb. 7. Energieabhängigkeit des natürlichen b_l -Wertes für $l=3$ und einen Abscheideradius $a=5$ fm, sowie Iterationsergebnisse einer EKT-Rechnung für b_l .

neten und mit (5) markierten schließlich die 5. Iteration $b_3^{(5)}(E)$. Abbildung 8 zeigt die Streuphase $\delta_3(E)$ im gleichen Energiebereich (starke Linie) und und die den Werten $b_3^{(5)}(E)$ entsprechenden EK-Ergebnisse $\delta_3^{(5)}(E)$. In Abb. 9 werden ebenfalls die Ergebnisse einer EK-Rechnung nach 5 Iterationen gezeigt, für einen Abschneideradius von $a_3 = 8$ fm.

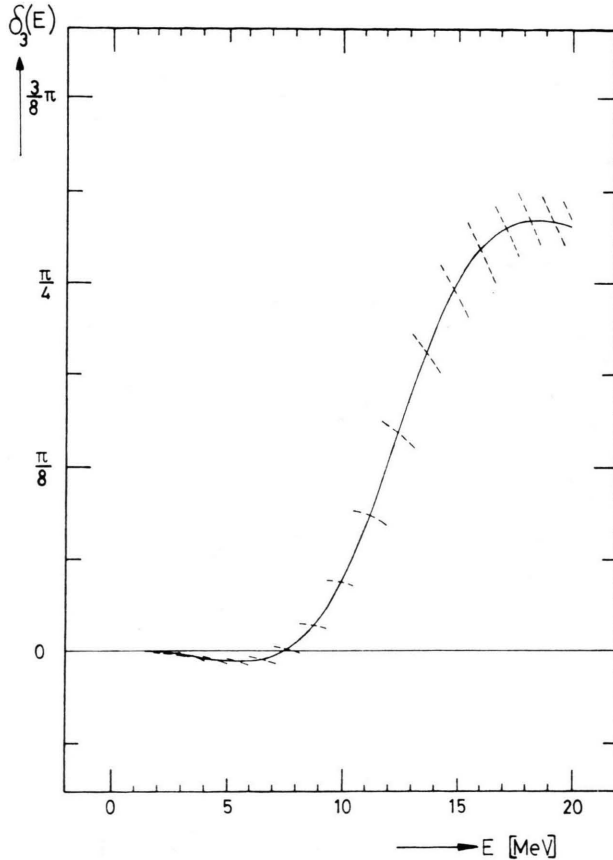


Abb. 8. EKT-Ergebnisse für die Streuphase nach 5 Iterationen für Drehimpuls $l=3$ und einen Abschneideradius $a=5$ fm.

Da für diesen größeren Abschneideradius die Funktion $b_3(E)$ eine wesentlich stärkere Energieabhängigkeit besitzt, entstehen im gleichen Energiebereich 0–20 MeV auch wesentlich mehr „Treppen“ als im Fall $a_3 = 5$ fm, und entsprechend dichter und besser liegen die EK-Ergebnisse am Verlauf der Streuphase. Im Durchschnitt reichten für alle untersuchten Drehimpulse (bis $l=6$) sechs bis acht Iterationen aus, um den relativen Fehler in der Streuphase unter 0,5% zu drücken; die dabei erreichte absolute Genauigkeit in der Energie (Übereinstimmung zwischen E_{il} und E) lag bei ungefähr 10^{-2} .

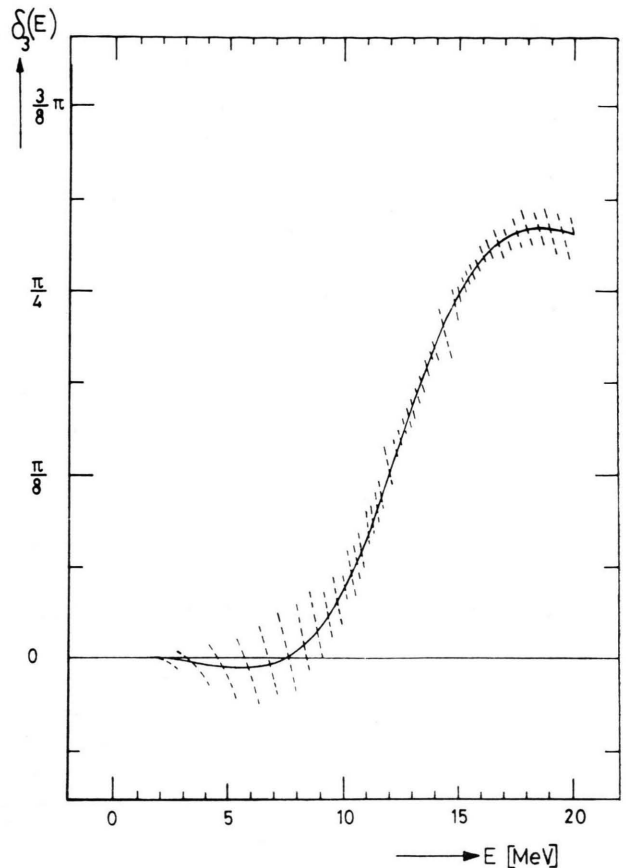


Abb. 9. EKT-Ergebnisse für die Streuphase nach 5 Iterationen für Drehimpuls $l=3$ und einen Abschneideradius $a=8$ fm.

Lediglich bei Nullstellen der Phasen oder bei den scharfen Resonanzen war ein höherer Aufwand für einen gleichen relativen Fehler erforderlich, der 15 bis 20 Iterationen oder entsprechend eine absolute Genauigkeit in der Energie von $\sim 10^{-4}$ verlangte. Abbildung 10 zeigt dieses Verhalten für die scharfe $l=5$ -Resonanz. Die durchgezogene Kurve zeigt den Verlauf der Streuphase $\delta_5(E)$ im Bereich der Resonanz. Die strich-punktierte Linie (— · — · —) entspricht einer EK-Rechnung nach 5 Iterationen mit einem Abschneideradius $a_5 = 5$ fm. Die 4 dünn gestrichelten „Treppen“ (— — —) zeigen das EK-Ergebnis mit demselben Abschneideradius nach 10 Iterationen, während die stark gestrichelten (——) „Treppen“ ein EK-Ergebnis nach 5 Iterationen mit einem Abschneideradius $a_5 = 12$ fm wiedergeben. In solchen Fällen ist also ein großer Abschneideradius besonders vorteilhaft.

Da natürlich alle Ergebnisse von dem gewählten Iterationsweg abhängen, wurde noch untersucht, wie

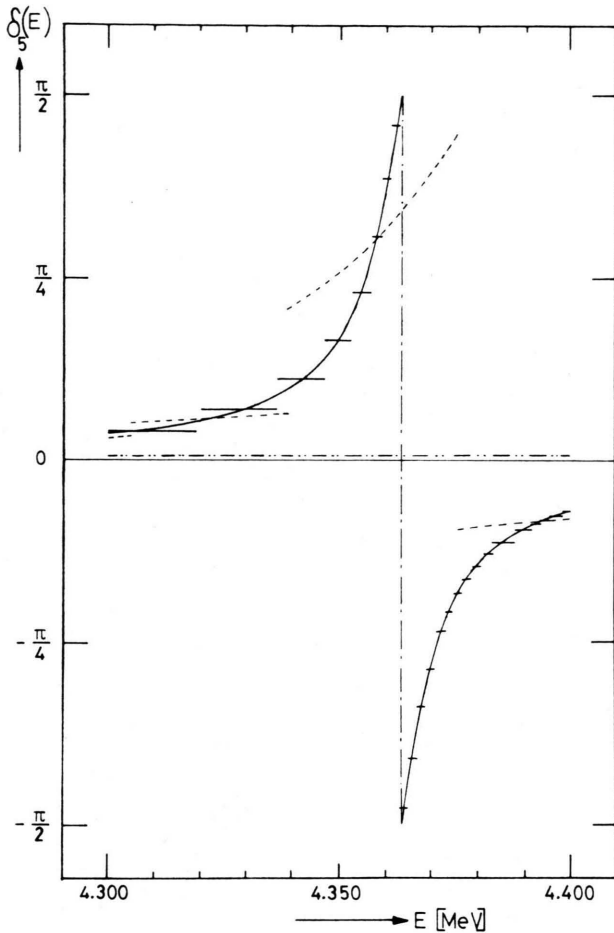


Abb. 10. EKT-Ergebnisse für die Streuphase im Bereich einer scharfen $l=5$ -Resonanz mit einem Abscheideradius $a=5$ fm nach 5 Iterationen (— · —) und nach 10 Iterationen (---), sowie für einen Abscheideradius $a=12$ fm und 5 Iterationen (—).

genau die Streuphase berechnet ist, wenn die Energie auf eine gegebene Genauigkeit bestimmt ist. Dabei ergab sich, daß für eine auf 10% genau bestimmte Energie der Fehler in der Streuphase 5%, bei 5% in der Energie ungefähr 2,5% in der Streuphase war – und entsprechend bei anderen Prozentsätzen. Dies gilt nicht für die schon zuvor erwähnten „kritischen“ Stellen; dort muß eine Energiegenauigkeit erzielt werden, die um einiges unter 1% liegt.

Eine vergleichende Betrachtung ergibt, daß die EK-Ergebnisse in der Regel genauer als die RM-Ergebnisse sein werden. Zumindest läßt sich jede im Rahmen der verwendeten Rechanlage mögliche Genauigkeit erreichen, während die oft sehr langsame Konvergenz in der R -Funktion dies nicht immer gestattet. Zum Beispiel sind in der EK-Rechnung nach spätestens 50 Iterationsschritten die Streuphasen und Partialquerschnitte auf die ersten 15 signifikanten Stellen bestimmt; die RM-Ergebnisse nach der Aufsummation von 50 Levels kann keine solchen Ergebnisse liefern.

Andererseits müssen die Levels in RM-Rechnungen nur einmal bestimmt werden. Auch lassen sich die entsprechenden Ergebnisse für andere B_l -Werte leicht über die Beziehung

$$R_l(E; a_l, B_l) = \frac{R_l(E; a_l, B_l=0)}{1 - B_l \cdot R_l(E; a_l, B_l=0)}$$

bestimmen, so daß sich die relativ starke B_l -Abhängigkeit, besonders für größere Abscheideradien, als nicht ganz so gravierend erweist.

In der EK-Rechnung muß dabei für jede Iteration mindestens ein neues Niveau berechnet werden. Je mehr Punkte der Anregungsfunktion demnach berechnet werden sollten, desto schlechter wird der Zeitfaktor zu Ungunsten der EK-Methode sein; im konkreten Beispiel war sie um einen Faktor 8–10 langsamer. Dabei muß aber die wesentlich höhere Genauigkeit der Ergebnisse berücksichtigt werden, zum anderen, daß ein Iterationsverfahren gewählt werden kann, bei dem die Werte eines benachbarten Energiepunktes als Ausgangsbasis dienen, was die Iteration viel wirkungsvoller gestaltet und in der Rechengeschwindigkeit mindestens eine Halbierung bedeutet, wenn nur die aufeinanderfolgenden Energiepunkte dicht genug liegen.

Für genauere Ergebnisse ist also die EK-Methode vorzuziehen, während für einen ersten Überblick die RM-Theorie zu bevorzugen ist.

Herrn Prof. W. GREINER danken wir für die Anregung zu dieser Arbeit und für sein Interesse bei ihrer Durchführung. Alle Rechnungen wurden auf der UNIVAC 1108 des ZRI der Universität Frankfurt (Main) durchgeführt.

¹ E. P. WIGNER u. L. EISENBUD, Phys. Rev. **72**, 29 [1947].

² A. M. LANE u. R. G. THOMAS, Rev. Mod. Phys. **30**, 257 [1958].

³ M. DANOS u. W. GREINER, Phys. Rev. **146**, 708 [1966].

⁴ W. GREINER, Cargèse Lectures in Physics, Vol. III, 535 [1969].

⁵ E. VOGT, Rev. Mod. Phys. **34**, 723 [1962].

⁶ A. LEJEUNE u. C. MAHAUX, Nucl. Phys. **A 145**, 613 [1970].

⁷ C. MAHAUX u. H. A. WEIDENMÜLLER, Phys. Rev. **170**, 847 [1968].

⁸ A. GRAUEL, Dissertation, Universität Frankfurt/M. 1971.