

Diplomarbeit

Eine neue Initialisierung des Atomkerns für GiBUU

vorgelegt von

Birger Steinmüller

aus Gießen

Justus-Liebig-Universität Gießen

Fachbereich 07 - Mathematik und Informatik, Physik,
Geographie

Fachgebiet Physik

Institut für Theoretische Physik I

Gießen, November 2007

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Dichteverteilung	7
2.1	Lokale Dichtenäherung	7
2.2	Gradientenerweiterung	10
2.3	Minimierung der Energie	11
2.4	Numerische Behandlung	12
2.5	Vergleich mit bisherigen Dichteverteilungen	18
3	Technische Aspekte	23
3.1	Die BUU-Gleichung	23
3.2	Initialisierung	24
3.3	Energiebestimmung	26
3.4	Stabilität des Kerns	27
3.5	Dichtebestimmung	27
3.6	Das Welke-Potential	34
4	Ergebnisse	35
4.1	Sauerstoff-16	36
4.1.1	Energieerhaltung	36
4.1.2	Stabilität	41
4.2	Calcium-40	45
4.2.1	Energieerhaltung	45
4.2.2	Stabilität	50
4.2.3	Andere Initialisierung	54
4.3	Blei-208	56
4.3.1	Energieerhaltung	56
4.3.2	Stabilität	60
5	Impulsabhängiges Potential	65
5.1	Vergleich der Simulationen	67

6	Zusammenfassung	73
7	Danksagung	75
A	Erläuterungen	77
A.1	Beschreibung der numerischen Vorgehensweise zur Lösung der Differentialgleichung	77
A.2	Variation des Energie-Dichte-Funktionalen	78
	Literaturverzeichnis	81

Kapitel 1

Einleitung

Vor der Entdeckung des Atomkerns wurde das Atom u.a. von Sir Joseph J. Thomson als ein homogenes Gemisch von positiven und negativen Ladungsträgern gesehen, die sich gegenseitig neutralisierten. Erst der Versuch von Lord Ernest Rutherford 1911 zeigte, daß der größte Teil des Atoms leer ist, und sich nur ein sehr kleiner, dafür aber sehr massiver Kern in seinem Innern befindet mit einer weit ausgedehnten Elektronenhülle. Die Entdeckung des Neutrons 1932 durch Sir James Chadwick war ein weiterer Schritt, um dieses Modell zu komplettieren. Wie wir heute wissen, sind aber weder Proton noch Neutron Elementarteilchen. Sie bestehen wiederum aus Quarks, welche durch die starke Wechselwirkung mit den Austauschpartikeln Gluonen zusammengehalten werden. Leider ist es noch nicht möglich, Nukleonen in einem Atomkern durch die starke Wechselwirkung so zu beschreiben, daß man den Aufbau des Kerns erklären kann. Die Versuche, die heute an Atomkernen gemacht werden, sind dem von Rutherford gar nicht unähnlich. Es werden zwar nur noch selten α -Teilchen verwendet und die Energien sind um einige Größenordnungen höher, aber ob es nun Neutrinos, Elektronen oder Protonen sind, die mit Atomkernen kollidieren, oder ganze Atomkerne in Schwerionenkollisionen aufeinandertreffen, in allen diesen Experimenten kann man Informationen über den Aufbau des Kerns und die tiefer liegenden Strukturen und Wirkungsmechanismen gewinnen. Vor allem zwei Fragen sind hier von Interesse:

- Erstens: Was passiert, wenn ein einfallendes Teilchen mit einem Bestandteil des Kerns wechselwirkt?
- Und zweitens: Wie sieht der Kern aus?

Die erste Frage wird, unter Vernachlässigung von In-Medium-Effekten, in Streuexperimenten an Wasserstoff untersucht. Da Streuexperimente an freien Neutronen kaum möglich sind, werden dafür Experimente an Deuterium

durchgeführt. Der Einfluß des Protons kann herausgerechnet werden, da Experimente an freien Protonen möglich sind.

Die Dichteverteilung der Protonen im Kern läßt sich über elastische Elektronenstreuung bestimmen, siehe [JVV87]. Experimentell Informationen über die Neutronenverteilung zu gewinnen, ist um einiges schwieriger. Hier ist einmal das PREX am JLab zu nennen. In diesem Experiment wird versucht, über paritätsverletzende Elektronenstreuung an Blei-208 die Neutronenhaut dieses Kerns zu bestimmen. Der doppelte Ladungsaustausch bei Streuung von Pionen am Kern ist ebenfalls geeignet, Informationen über die Neutronenverteilung zu liefern.

Eine Möglichkeit, die gerade beschriebenen Experimente zu simulieren, haben wir mit dem GiBUU-Code. Dieser ist ein semiklassischer Transportcode mit gekoppelten Kanälen. Die Bezeichnung GiBUU setzt sich aus zwei Teilen zusammen. Gi steht für Gießen, den Standort der Universität und damit auch des Theoretischen Instituts, in dem der Code entstanden ist. BUU steht für Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck, nach denen die dem Code zugrundeliegende Transportgleichung benannt ist. Der GiBUU-Code kann zur Simulation von verschiedenen Reaktionen verwendet werden. Hier sind vor allem

- Schwerionenstöße,
- pioneninduzierte Reaktionen an Kernen,
- photoneninduzierte Reaktionen an Kernen,
- elektroneninduzierte Reaktionen an Kernen,
- und neutrinoinduzierte Reaktionen an Kernen

zu nennen. Mit dem GiBUU-Code lassen sich die Theorien der oben genannten Reaktionen mit den Experimenten vergleichen. Desweiteren kann man mit dem GiBUU-Code auch Vorhersagen für zukünftige Experimente machen.

In dieser Arbeit werden wir eine Methode betrachten, wie ein Atomkern in dem GiBUU-Code beschrieben werden kann. Natürlich gibt es schon verschiedene Implementationen der Dichteverteilung von Atomkernen, aber bei diesen besteht das Problem, daß das Kernpotential und die Dichteverteilung nicht konsistent sind. Diese Inkonsistenz führt dazu, daß die Kerne bei Propagation im GiBUU-Code stark oszillieren oder sogar instabil sind. Deshalb wird zur Zeit für Streureaktionen der Kern „eingefroren“, d.h. er wird nicht im Code propagiert.

Die Dichteverteilung, die wir hier betrachten werden, wird in Kapitel 2 aus einem Energie-Dichte-Funktional, siehe [BBJL68], hergeleitet. Aus diesem Energie-Dichte-Funktional lässt sich auch ein mit der Dichteverteilung konsistentes Potential ableiten. Wir werden unser Augenmerk sowohl auf die Form des Energie-Dichte-Funktional als auch auf die numerische Behandlung des Problems richten. Die numerischen Rechnungen in diesem Kapitel wurden mit MATLAB durchgeführt.

Im dritten Kapitel geht es um die Implementierung dieser Dichteverteilung und des Potentials in den GiBUU-Code. Hier wird auch auf die Grundlagen und die Funktion dieses Codes eingegangen.

Im vierten Kapitel werden wir uns die Resultate der Rechnungen ansehen. Besonderes Augenmerk werden wir hier auf die Stabilität des Kerns, die Energieerhaltung und die Dauer der Rechnungen richten. Die Stabilität des Kerns und die Dauer der Rechnungen werden wir mit einer der bisher verwendeten Kombinationen aus Dichteverteilung und Potential vergleichen.

Im fünften Kapitel werden wir das bis dahin verwendete Energie-Dichte-Funktional um einen impulsabhängigen Anteil erweitern und die Ergebnisse mit der ursprünglichen Version vergleichen.

Kapitel 2

Dichteverteilung

In diesem Kapitel werden wir uns mit einer Methode beschäftigen, die eine selbstkonsistente Dichteverteilung für Atomkerne beschreibt. Dafür nehmen wir an, daß ein Atomkern aus endlicher Kernmaterie besteht. Das bedeutet, daß wir nicht die Wellenfunktionen der einzelnen Protonen und Neutronen betrachten, sondern nur ihre Dichteverteilung. Diese Vereinfachung ermöglicht uns eine schnellere numerische Lösung des Problems, hat aber den Nachteil, daß wir weder Spin noch Bahndrehimpuls betrachten. Eine weiter vorgenommene Vereinfachung ist, daß wir symmetrische Kernmaterie verwenden, die Dichteverteilung von Protonen und Neutronen also gleich ist. Diese Näherung funktioniert sehr gut bei leichten bis mittelschweren Kernen. Ohne diese Näherung könnte man immer noch die gleiche Methode zur Bestimmung der Dichteverteilungen verwenden, diese wäre aber numerisch sehr viel aufwendiger.

2.1 Lokale Dichtenäherung

Der lokalen Dichtenäherung liegt die Annahme zugrunde, daß die Energiedichte an einem Punkt nur von der Dichte dort und deren Ableitungen abhängt. Man beschreibt den Kern sozusagen als statische Flüssigkeit. Wir wollen die Dichteverteilung des Kerns darüber bestimmen, daß wir dessen Energie minimieren. Dafür benötigen wir erst einmal eine Formel für die Energie des Kerns. In dieser Formel sollte folgendes enthalten sein:

- ein kinetischer Term,
- ein Potentialterm
- und ein Term, der eine Oberfläche erzeugt.

Man könnte noch einen Coulomb-Term vorschlagen, dieser wurde aber, um das Modell gut berechenbar zu halten, hier weggelassen. Außerdem ist das Coulombpotential in einem Kern glatt, so daß die Einbeziehung vor allem bei leichten Kernen kaum eine Veränderung bewirkt. Da wir den Kern im Grundzustand betrachten, nehmen wir für den kinetischen Term die nichtrelativistische, kinetische Energie von $\frac{p^2}{2M}$. Wenn wir weiterhin annehmen, daß im Kern alle Niveaus bis zum Fermiimpuls gefüllt sind, so kommen wir auf eine Phasenraumdichte von

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = 2 \cdot 2 \cdot \Theta(p_F(\vec{r}) - p) . \quad (2.1)$$

Der erste Faktor 2 kommt daher, daß wir Fermionen betrachten, die Teilchen also Spin up oder Spin down haben können. Der zweite Faktor 2 kommt von dem ebenfalls entarteten Freiheitsgrad des Isospin, da wir nicht zwischen Neutronen und Protonen unterscheiden. Wenn man nun diese Phasenraumdichte über den Orts- und Impulsraum integriert, kommt man auf die Massenzahl, es gilt

$$A = \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) . \quad (2.2)$$

Desweiteren ist die Massenzahl auch gleich dem Integral über die Dichte im Ortsraum

$$A = \int d^3r \rho(\vec{r}) , \quad (2.3)$$

woraus für die Dichte im Ortsraum folgt:

$$\rho(\vec{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{2}{3\pi^2} p_F(\vec{r})^3 . \quad (2.4)$$

Den Zusammenhang zwischen Fermiimpuls und Dichte haben wir also gefunden, nun müssen wir noch den kinetischen Term so umformen, daß er nur mehr von einer dieser beiden Größen abhängt. Wir nehmen, wie schon gesagt, an, daß alle Niveaus bis zum Fermiimpuls gefüllt sind. Damit ergibt sich für

$$\left\langle \frac{p^2}{2M} \right\rangle = \frac{\int d^3p \Theta(p_F(\vec{r}) - p) p^2}{2M \cdot \int d^3p \Theta(p_F(\vec{r}) - p)} = \frac{3}{10M} p_F^2 \quad (2.5)$$

und mit Gleichung (2.4) erhalten wir für den kinetischen Term

$$\left\langle \frac{p^2}{2M} \right\rangle = \frac{3}{10M} \left(\frac{3}{2} \pi^2 \right)^{2/3} \rho^{2/3} = c_K \rho^{2/3} . \quad (2.6)$$

Wir wenden uns jetzt dem Potentialterm zu. Zusammen mit dem kinetischen Term muß dieser folgende Randbedingungen erfüllen:

- Die Summe aus beiden für $\rho = 0$ muß 0 sein.
- Die Summe aus beiden hat bei einer bestimmten Dichte ρ_0 ein Minimum.
- Die Summe aus beiden hat bei ρ_0 den Wert a_v .

Der erste Punkt erschließt sich am schnellsten: wenn keine Nukleonen vorhanden sind, gibt es auch kein Potential, das auf ein Testteilchen wirken kann. Punkt zwei und drei hängen miteinander zusammen. Ein unendlich großer Kern soll eine Bindungsenergie von a_v pro Teilchen haben und seine Dichte soll ρ_0 sein. Nun wenden wir uns den Werten von ρ_0 und a_v zu. Für a_v benutzen wir den Wert, der in der Bethe-Weizsäcker-Formel für den Volumenterm angegeben ist, damit ist $a_v = -15,84$ MeV. Dieser Wert ist aus [Dem05] entnommen, eine genauere Betrachtung der Massenformel findet sich in [Wei35]. Bei ρ_0 haben wir einen größeren Spielraum. Normalerweise liegt die maximale Dichte eines stabilen Kerns zwischen 0,15 und 0,17 $\frac{\text{Nukleonen}}{\text{fm}^3}$. Damit die schweren Kerne keine zu hohe Zentralsdichte haben, entscheiden wir uns an dieser Stelle für $\rho_0 = 0,15 \text{ fm}^{-3}$. Wir verwenden für die Energie pro Nukleon bei konstanter Dichte die in [BBJL68] vorgeschlagene Form

$$U(\rho) = T(\rho) + V(\rho) = c_K \rho^{2/3} + b_1 \rho + b_2 \rho^{4/3} + b_3 \rho^{5/3} . \quad (2.7)$$

Diese hängt mit der Energiedichte über

$$\epsilon[\rho] = \rho U(\rho) \quad (2.8)$$

zusammen und die Gesamtenergie des Kerns ist damit als

$$E[\rho] = \int d^3r \epsilon[\rho(\vec{r})] = \int d^3r \rho(\vec{r}) U[\rho(\vec{r})] \quad (2.9)$$

definiert. Mit den geforderten Randbedingungen erhalten wir folgendes Gleichungssystem, das gelöst werden muß

$$\begin{aligned} U(\rho_0) &= c_K \rho_0^{2/3} + b_1 \rho_0 + b_2 \rho_0^{4/3} + b_3 \rho_0^{5/3} = -15,84 \text{ MeV} \\ \left. \frac{\partial U(\rho)}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_0} &= \frac{2}{3} c_K \rho_0^{-1/3} + b_1 + \frac{4}{3} b_2 \rho_0^{1/3} + \frac{5}{3} b_3 \rho_0^{2/3} = 0 . \end{aligned} \quad (2.10)$$

Da c_k schon durch Gleichung (2.6) bestimmt ist, haben wir zwei Gleichungen mit drei Unbekannten. Wir lassen b_3 als Freiheitsgrad übrig, den wir später numerisch bestimmen werden. Als Vorgriff auf das spätere Ergebnis zeigt Abbildung 2.1 schon die Form der Energie pro Nukleon bei konstanter Dichte

für $b_3 = 2,1 \text{ fm}^4$. Die dazugehörigen Werte von b_1 und b_2 lassen sich aus Gleichung (2.10) berechnen und sind gegeben durch

$$\begin{aligned} b_2 &= \frac{c_k \rho_0^{2/3} - 2b_3 \rho_0^{5/3} - 3a_v}{\rho_0^{4/3}} \\ \text{und } b_1 &= -\frac{2c_k \rho_0^{2/3} - b_3 \rho_0^{5/3} - 4a_v}{\rho_0} . \end{aligned} \quad (2.11)$$

2.2 Gradientenerweiterung

Wenn wir mit dieser Energie pro Nukleon einen Kern mit minimaler Energie initialisierten, so erhielten wir einen Kern mit konstanter Dichte. Dieser Kern hätte aber keinen Bereich, über den die Dichte abfällt, ihm würde also die Oberfläche komplett fehlen. Wir betrachten jetzt das Energie-Dichte-Funktional, siehe Gleichung (2.8). Hierbei ist die Bindungsenergie pro Nukleon definiert als

$$E_B = \frac{E[\rho]}{A} = \frac{\int d^3r \epsilon[\rho]}{\int d^3r \rho} , \quad (2.12)$$

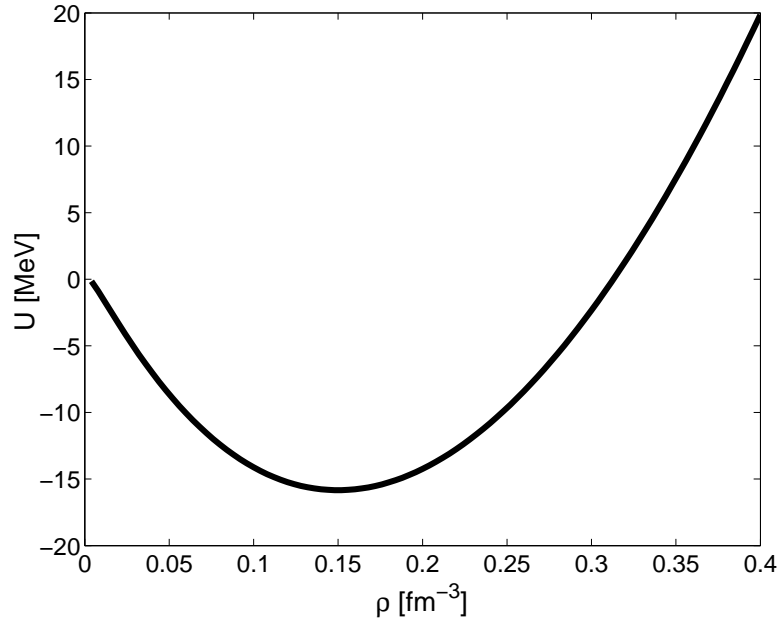


Abbildung 2.1: Die Energie pro Nukleon bei konstanter Dichte für $b_3 = 2,1 \text{ fm}^4$

wobei ρ natürlich von \vec{r} abhängig ist. Um den Mißstand zu beheben, daß der berechnete Kern keine Oberfläche hätte, führen wir wie in [BBJL68] einen Term ein, der proportional zu $(\nabla\rho)^2$ ist. Damit nimmt unser Energie-Dichte-Funktional folgende Form an:

$$\epsilon[\rho] = c_k \rho^{5/3} + b_1 \rho^2 + b_2 \rho^{7/3} + b_3 \rho^{8/3} + \frac{\eta}{8M} (\vec{\nabla}\rho)^2 . \quad (2.13)$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise setzen wir

$$a = \frac{\eta}{8M} . \quad (2.14)$$

Die Energie pro Teilchen ist somit gegeben durch

$$U[\rho] = c_k \rho^{2/3} + b_1 \rho + b_2 \rho^{4/3} + b_3 \rho^{5/3} - \vec{\nabla}^2 \rho \quad (2.15)$$

und ohne kinetischen Term ist das mittlere Potential

$$V[\rho] = b_1 \rho + b_2 \rho^{4/3} + b_3 \rho^{5/3} - \vec{\nabla}^2 \rho . \quad (2.16)$$

2.3 Minimierung der Energie

Wir wollen jetzt aus Gleichung (2.13) eine Bestimmungsgleichung für die Dichteverteilung des Kerns gewinnen. Dafür müssen wir die Energie mit der Randbedingung

$$A = \int d^3r \rho(\vec{r}) \quad (2.17)$$

minimieren. Ein Extremum des Funktionals $E[\rho]$ läßt sich über die Funktionalableitung nach ρ bestimmen. Diese ergibt

$$0 \stackrel{!}{=} \delta E = \int d^3r \delta \rho \left(\frac{5}{3} c_k \rho^{2/3} + 2b_1 \rho + \frac{7}{3} b_2 \rho^{4/3} + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{8}{3} b_3 \rho^{5/3} - 2a \vec{\nabla}^2 \rho - \lambda_0 \right) . \quad (2.18)$$

In dieser Gleichung ist λ_0 der Lagrange-Multiplikator, er kann als Bindungsenergie des letzten hinzugefügten Teilchens interpretiert werden. Damit die Gleichung $0 \stackrel{!}{=} \delta E$ erfüllt wird, muß die Dichteverteilung die folgende Differentialgleichung erfüllen:

$$\frac{5}{3} c_k \rho^{2/3} + 2b_1 \rho + \frac{7}{3} b_2 \rho^{4/3} + \frac{8}{3} b_3 \rho^{5/3} - 2a \vec{\nabla}^2 \rho - \lambda_0 = 0 . \quad (2.19)$$

Wir nehmen nun an, daß wir kugelsymmetrische Kerne betrachten, damit ist

$$\rho(\vec{r}) = \rho(r) . \quad (2.20)$$

Gleichung (2.19) läßt sich unter Ausnutzung der Kugelsymmetrie wie folgt umschreiben

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} = -\frac{2}{r} \frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{5}{6a} c_k \rho^{2/3} + \frac{1}{a} b_1 \rho + \frac{7}{6a} b_2 \rho^{4/3} + \frac{4}{3a} b_3 \rho^{5/3} - \frac{1}{2a} \lambda_0 . \quad (2.21)$$

Wir haben damit eine Differentialgleichung zweiter Ordnung, die wir nicht analytisch lösen können. Dennoch können wir, bevor wir die numerische Lösung genauer betrachten, die Eigenschaften dieser Differentialgleichung untersuchen. Von Kumar et al. [KLCR63] wurde gezeigt, daß es für jedes λ_0 maximal eine Lösung dieser Differentialgleichung gibt, die die folgenden Randbedingungen hat. Bei $r = 0$ verschwindet aus Symmetriegründen die erste Ableitung von ρ nach dem Ort. Weiterhin gibt es ein r_A , für das gilt, daß

$$\forall r \geq r_A : \rho(r) = 0 \wedge \rho'(r) = 0 . \quad (2.22)$$

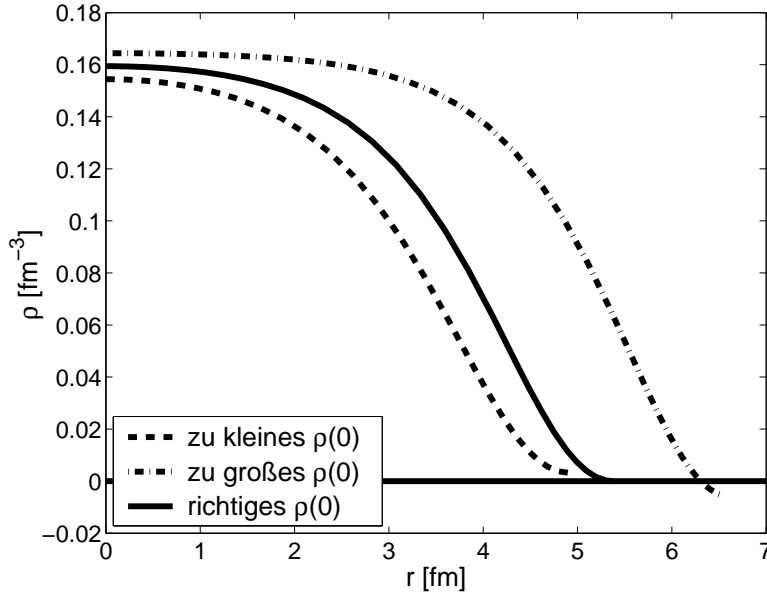
Und nach dieser Lösung suchen wir. Dies ist auch ein Nachteil der Thomas-Fermi-Rechnung. Wir bekommen keinen exponentiellen Abfall, sondern die Dichte geht an einem Wert für r auf Null. Auf die numerische Behandlung werden wir gleich eingehen, aber ein Bild zur Verdeutlichung dieses Vorgangs ist schon hier mit Abbildung 2.2 zu sehen. Wie man dort sehen kann, erreicht die gestrichelte Kurve mit zu kleinem $\rho(0)$ keinen Punkt, an dem die Dichte Null wird. Die durchgezogene Kurve stellt eine numerische Annäherung an das Optimum dar. Bei der Strich-Punkt-Kurve mit zu großer Zentralsdichte erreicht die Dichte Null, wir erhalten aber als Lösung nach diesem Punkt eine negative Dichte. Als Abbruchbedingung für die Lösung der Differentialgleichung wurde in diesem Fall gewählt, daß die erste Ableitung der Dichte Null wird.

Die Stetigkeit der Dichte und ihrer ersten Ableitung ist äquivalent zu unserer Forderung, daß die Dichteverteilung und ihre erste Ableitung am selben Punkt verschwinden sollen.

2.4 Numerische Behandlung

Mit Gleichung (2.21) haben wir eine Differentialgleichung zweiter Ordnung. Um diese numerisch lösen zu können, schreiben wir sie zuerst in zwei gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung um.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial r} &= y \\ \frac{\partial y}{\partial r} &= -\frac{2}{r} y + \frac{5}{6a} c_k \rho^{2/3} + \frac{1}{a} b_1 \rho + \frac{7}{6a} b_2 \rho^{4/3} + \frac{4}{3a} b_3 \rho^{5/3} - \frac{1}{2a} \lambda_0 \end{aligned} \quad (2.23)$$



Abbildungung 2.2: Drei Lösungen der Differentialgleichung mit gleichem λ_0 aber unterschiedlichen $\rho(0)$

λ_0 ist eine Größe, die für jedes A unterschiedlich ist. Außerdem sind η und b_3 noch nicht bestimmt, siehe Gleichung (2.18). Die Randbedingungen für dieses System von Differentialgleichungen sind

$$\begin{aligned}\rho'(0) &= 0, \\ \rho(r_A) &= 0, \\ \rho'(r_A) &= 0.\end{aligned}\tag{2.24}$$

$\rho(0)$ ist unbekannt und muß für jeden Kern neu bestimmt werden. Da wir für die Lösung der Differentialgleichung bei $r = 0$ anfangen, wird r_A indirekt bestimmt. Das Verfahren zur numerischen Lösung der Differentialgleichung ist in Anhang A.1 beschrieben.

Wie kommen wir nun auf die Dichteverteilung eines bestimmten Kerns? Hierfür müssen wir erst die Konstanten η und b_3 bestimmen. Die Konstanten b_1 und b_2 sind von b_3 abhängig, siehe Gleichung (2.10). Die bisherigen Überlegungen geben uns dafür leider keine Einschränkungen. Als weitere Randbedingung fordern wir deshalb, daß die Energie der Kerne möglichst gut mit der Bethe-Weizsäcker-Formel übereinstimmen soll, reduziert auf die Terme des Volumens und der Oberfläche.

$$E_B = \frac{E}{A} = a_v + a_s \cdot A^{-1/3}\tag{2.25}$$

Der Volumenterm a_v ist, wie im Anfang dieses Kapitels, $-15,84$ MeV und der Oberflächenterm $a_s = 18,33$ MeV, siehe [Dem05]. Jetzt müssen wir eine Suche im zweidimensionalen Parameterraum von η und b_3 durchführen. Dies geschieht erst auf einem groben Gitter, dann, um die Parameter genauer zu bestimmen, noch einmal auf einem feineren Gitter um das bisher beste Ergebnis. Für jedes Wertepaar bestimmen wir dann die Energie für verschiedene Massenzahlen. Dafür nehmen wir 50 verschiedene Werte für λ_0 und suchen für jedes dieser λ_0 eine Dichteverteilung mit Zentraldichte $\rho(0)$, die die Randbedingungen in Gleichung (2.24) erfüllt. Das bedeutet, daß die Massenzahl von λ_0 abhängt. Zur numerischen Lösung der Gleichung (2.23) verwenden wir eine Runge-Kutta-Methode 4. Ordnung, dieser Teil der Berechnungen wurde in MATLAB durchgeführt. Mit der berechneten Dichteverteilung können wir, wie in Gleichung (2.12) beschrieben, die Bindungsenergie pro Nukleon für die verschiedenen Massenzahlen berechnen und mit den Ergebnissen aus Gleichung (2.25) vergleichen. Bei äquidistanten λ_0 tritt das Problem auf, daß es eine Häufung der Massenzahlen im Bereich der kleinen bis mittleren Kerne gibt. Geringe Abweichungen von der Bethe-Weizsäcker-Formel in diesem Bereich sind zwar wichtig, aber eine asymptotische Annäherung der relativen Abweichung von der Bethe-Weizsäcker-Formel an Null sollte für größere Kerne erfüllt sein. Daher werden wir die Ergebnisse für verschiedene b_3 und η qualitativ vergleichen.

Die Kompressibilität des Kerns

$$K = 9\rho_0^2 \left(\frac{\partial^2 U(\rho)}{\partial \rho^2} \right) \Big|_{\rho=\rho_0} \quad (2.26)$$

hängt nur von b_3 und nicht von η ab. Wie wir in Abbildung 2.3 sehen können, bedeutet eine Veränderung von b_3 um 1 fm^4 eine Änderung der Kompressibilität um $16,7$ MeV. Bei einem Wert von $b_3 = 2,4 \text{ fm}^4$ ist dies für die dazugehörige Kompressibilität von $K = 272$ MeV eine Änderung um 6% .

Eine andere Verfahrensweise wäre es gewesen, sich für einen Wert der Kompressibilität zu entscheiden. Dann hätte man mit den zwei Gleichungen in (2.10) und der Gleichung (2.26) drei Bestimmungsgleichungen für die drei Konstanten b_1 , b_2 und b_3 gehabt. Da aber die Kompressibilität von Kernmaterie nicht exakt bekannt ist, haben wir den Bereich zwischen 200 und 300 MeV dazu verwendet, die Suche nach einem passenden b_3 einzugrenzen.

Wenn wir unsere Konstanten b_3 und η jetzt bestimmt haben, können wir für eine beliebige Massenzahl die Dichteverteilung bestimmen. Um dies zu tun, müssen wir aber einen kleinen Umweg gehen. Die Massenzahl ist eine Anforderung an die Dichteverteilung, aber die Größe, die wir eigentlich verwenden, ist λ_0 . Das bedeutet, daß wir, wenn wir einen Kern einer bestimmten

Massenzahl beschreiben wollen, erst das richtige λ_0 haben müssen. Dies bewerkstelligen wir durch eine, hier nur eindimensionale, Suche nach diesem Parameter. So erhalten wir die in den Abbildungen 2.7, 2.9 und 2.11 dargestellten Dichteverteilungen. Mit den in Tabelle 2.1 angegebenen Parametern erhalten wir eine gute Annäherung der Energie unserer Kerne an die reduzierte Bethe-Weizsäcker-Gleichung, siehe Gleichung (2.25). Die Bindungsenergie pro Nukleon in Abhängigkeit von der Massenzahl A ist in Abbildung 2.4 zu sehen. Man kann die Kurven der hier berechneten Bindungsenergie und der Energie nach der Bethe-Weizsäcker-Formel kaum unterscheiden, was ja in unserem Sinne ist. In den Abbildungen 2.5 und 2.6 sind die relativen Differenzen der Bindungsenergie zum Ergebnis der Bethe-Weizsäcker-Formel zu sehen. Dies dient zum Vergleich unserer Parameterwahl mit Paaren von b_3 und η in der näheren Umgebung.

b_3 [fm ⁴]	η [fm ³]	b_1 [fm ²]	b_2 [fm ³]
2,1	12,8	-2,98	2,14
a_v [MeV]	a_s [MeV]	ρ_0 [fm ⁻³]	K [MeV]
-15,84	18,33	0,15	272

Tabelle 2.1: Die Parameter des Energie-Dichte-Funktional, wobei b_1 , b_2 und K von b_3 abhängen

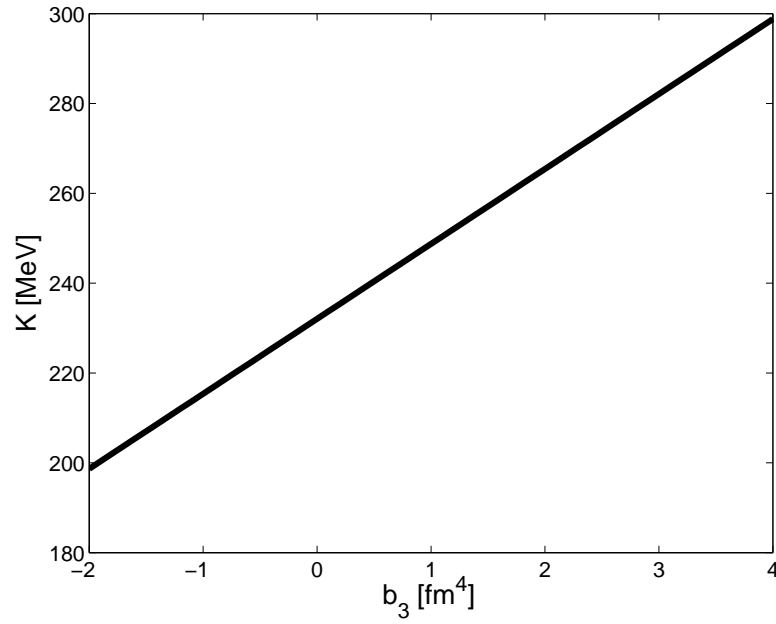


Abbildung 2.3: Die Abhängigkeit der Kompressibilität von der freien Konstante b_3 , für die übrigen Parameter siehe Gleichung (2.11)

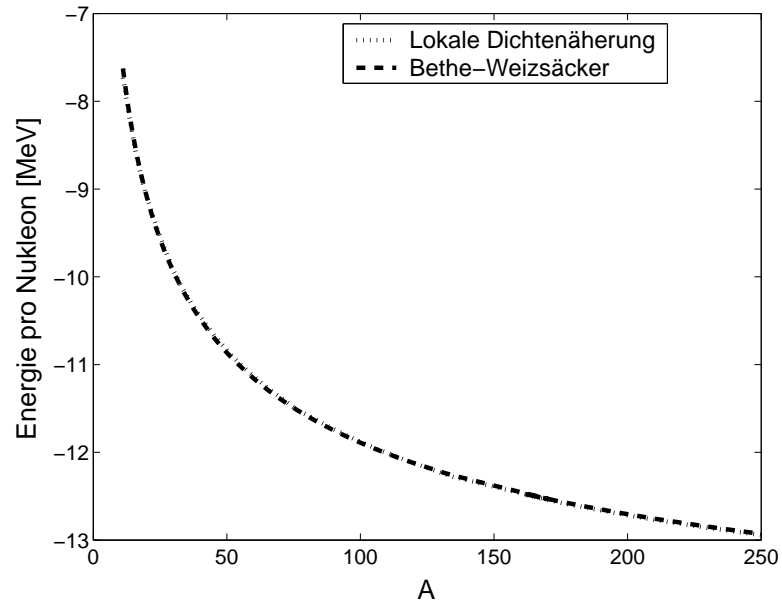


Abbildung 2.4: Bindungsenergien nach der Bethe-Weizsäcker-Formel sowie der hier verwendeten Lokalen Dichtenäherung mit $b_3 = 2,1 \text{ fm}^4$ und $\eta = 12,8 \text{ fm}^3$

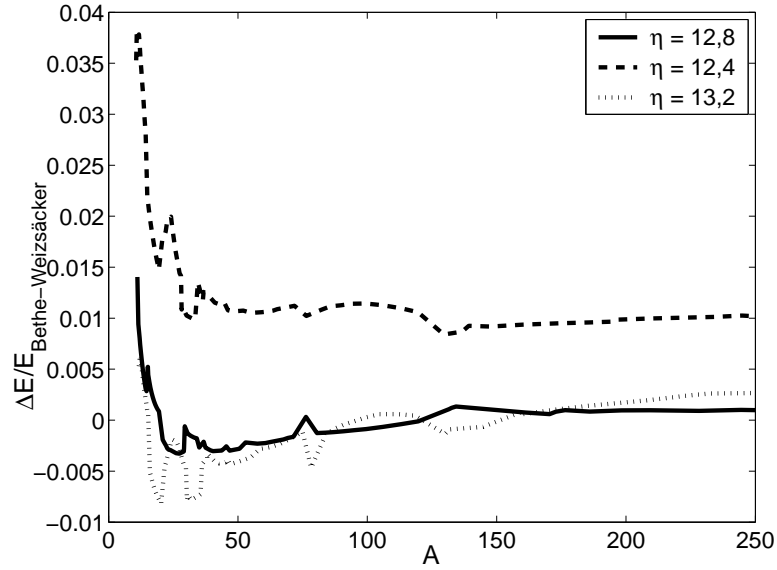


Abbildung 2.5: Relativer Unterschied der Bindungsenergien nach der Bethe-Weizsäcker-Formel und der hier verwendeten Lokalen Dichtenäherung bei konstantem gewähltem Wert von $b_3 = 2,1 \text{ fm}^4$ und verschiedenen Werten für η

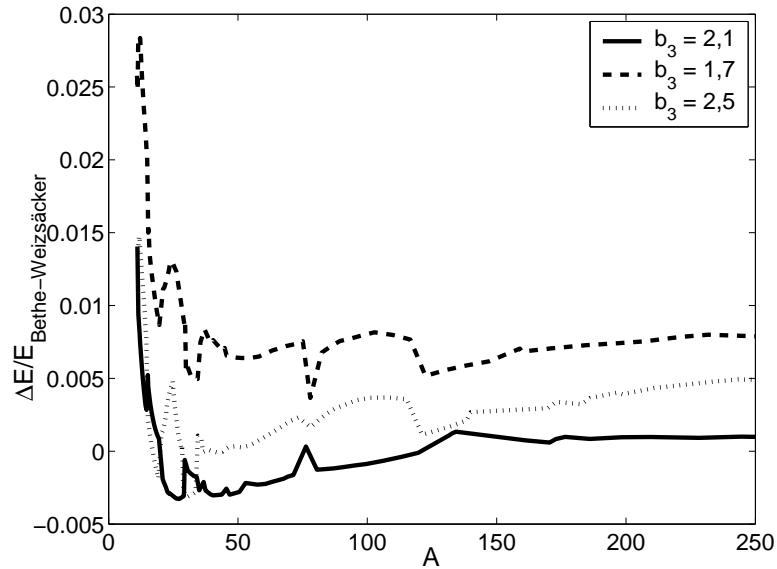


Abbildung 2.6: Relativer Unterschied der Bindungsenergien nach der Bethe-Weizsäcker-Formel und der hier verwendeten Lokalen Dichtenäherung bei konstantem gewähltem Wert von $\eta = 12,8 \text{ fm}^3$ und verschiedenen Werten für b_3

2.5 Vergleich mit bisherigen Dichteverteilungen

Es wurden schon verschiedene Dichteverteilungen in den GiBUU-Code implementiert. Hier sind vor allem zwei zu nennen, die bei den Simulationen zur Zeit benutzt werden.

Dies ist zum einen die von Horst Lenske implementierte Dichteverteilung. Ihr zugrunde liegt eine Woods-Saxon-Verteilung, die verschiedene Radien für die Protonen- und Neutronenverteilung verwendet.

Zum anderen gibt es eine von Luis Alvarez-Ruso implementierte Verteilung. Diese basiert auf einer Veröffentlichung von J. Nieves et al. [NOGR93], in der pionische Atome und das Problem der Anomalien theoretisch betrachtet werden. Die Proton-Dichteverteilungen in [NOGR93] wurden aus der Veröffentlichung von C. W. de Jager et al. [JVV87] entnommen. Dort finden sich die Parameter der Protonenverteilungen von Kernen, welche durch Elektronenstreuung bestimmt wurden.

Neben dem Vergleich der Dichteverteilungen, zu sehen in den Abbildungen 2.7, 2.9 und 2.11, ist auch der Vergleich von $r^2\rho(r)$ interessant. Diese Größe beschreibt (bis auf den Faktor 4π) die Wahrscheinlichkeit, ein Nukleon auf einer Kugelschale mit dem Radius r um den Mittelpunkt des Kerns zu finden. Dies macht, siehe Abbildungen 2.8, 2.10 und 2.12, im Gegensatz zur reinen Dichteverteilung deutlich, wo die Nukleonen am häufigsten anzutreffen sind. Eine Eigenschaft der hier vorgestellten Methode fällt im Vergleich mit den anderen Dichteverteilungen besonders auf. Wir haben keinen exponentiellen Abfall der Dichte, was bedeutet, daß der Kern stärker lokalisiert ist. Neben den Dichteprofilen ist auch die Oberflächendicke ein wichtiger Wert. Dies ist der Bereich, in dem die Dichte von 90 % auf 10 % der Zentraldichte fällt. In Abbildung 2.13 ist die Oberflächendicke des hier vorgestellten Modells in Abhängigkeit von der Massenzahl zu sehen. Für die Kerne Sauerstoff-16, Calcium-40 und Blei-208 sind auch die Werte der anderen beiden Modelle eingezeichnet.

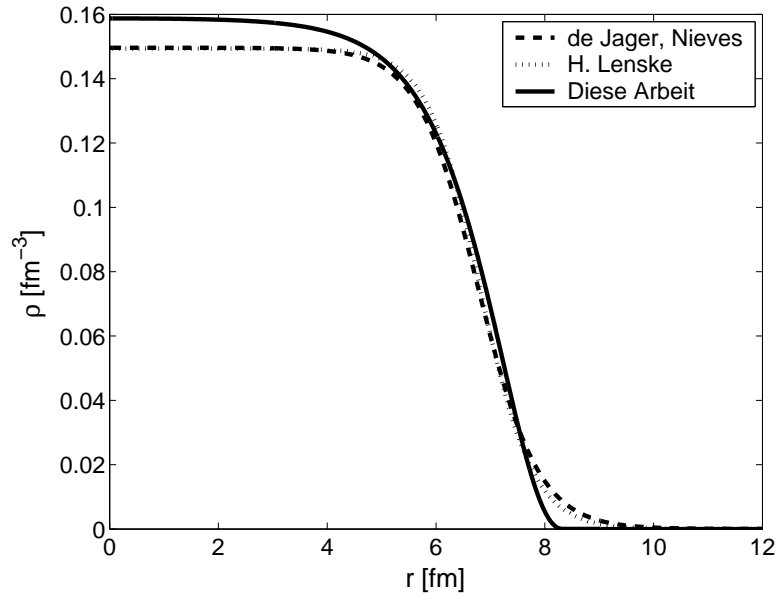


Abbildung 2.7: Dichteverteilungen für Pb-208

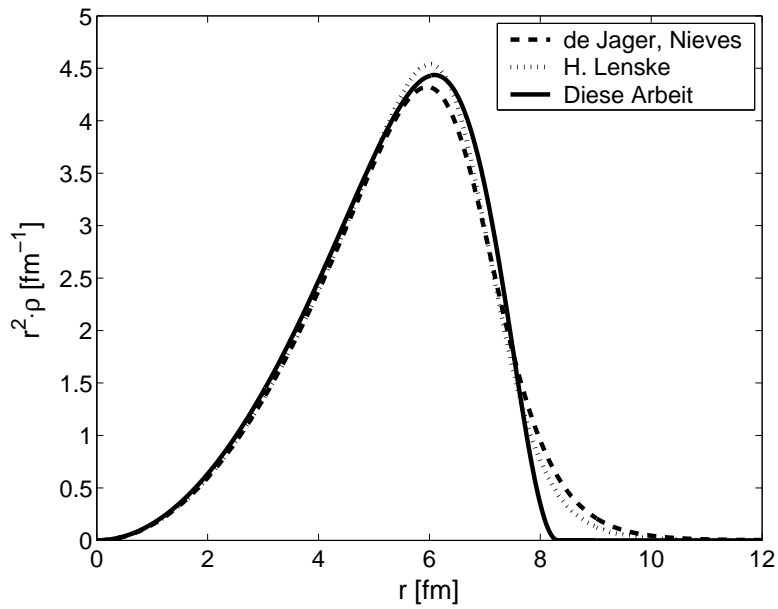


Abbildung 2.8: Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Pb-208

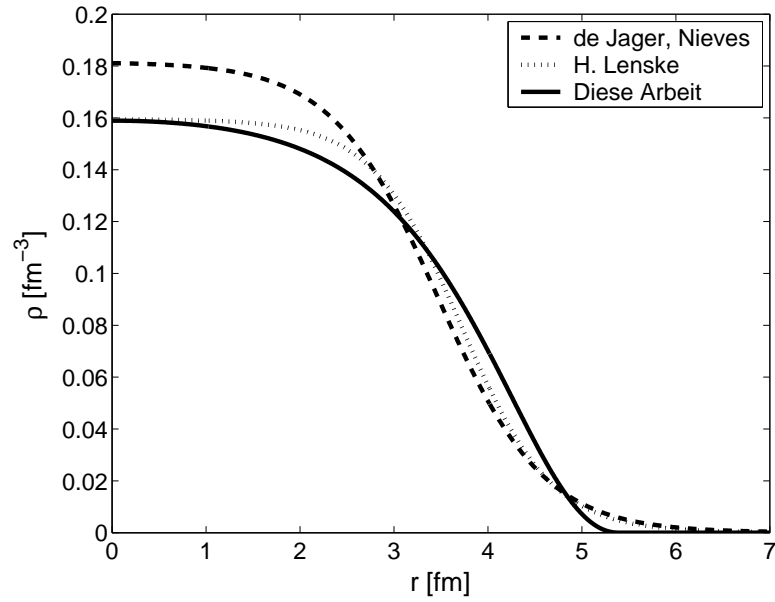


Abbildung 2.9: Dichteverteilungen für Ca-40

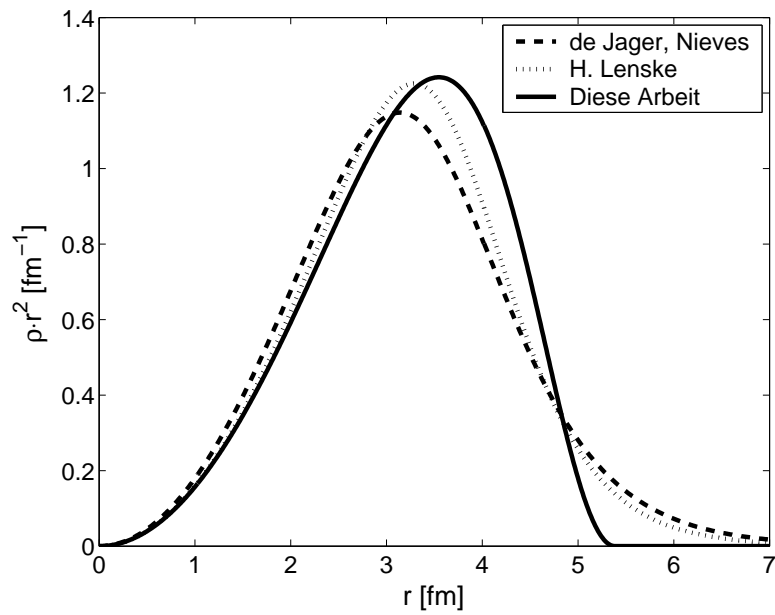


Abbildung 2.10: Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Ca-40

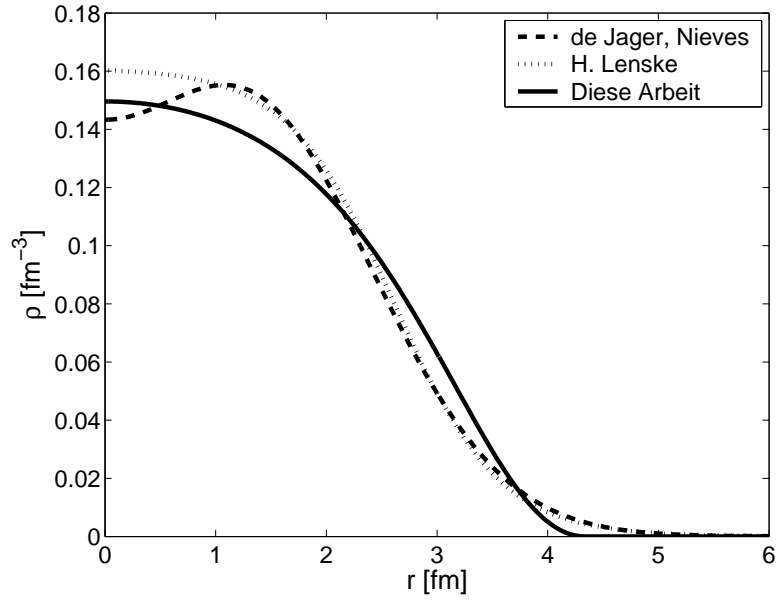


Abbildung 2.11: Dichteverteilungen für O-16

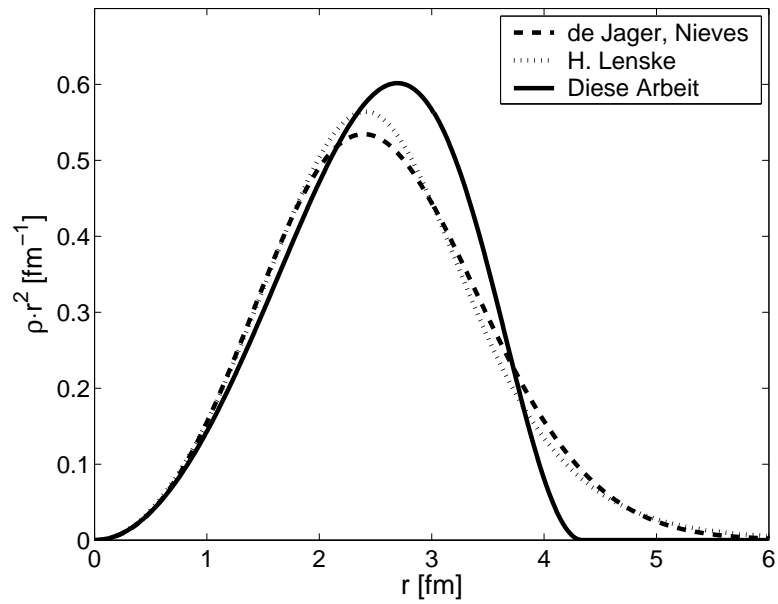


Abbildung 2.12: Wahrscheinlichkeitsverteilungen für O-16

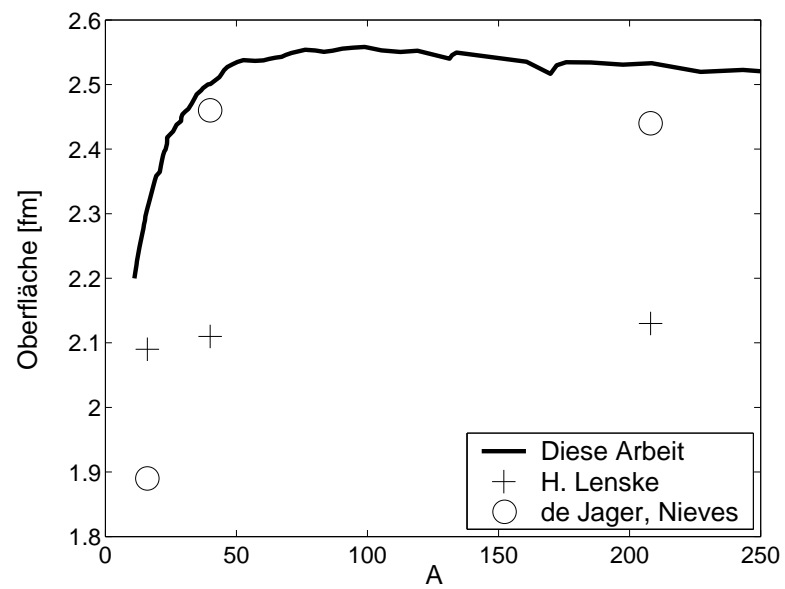


Abbildung 2.13: Oberflächendicke in Abhängigkeit der Massenzahl

Kapitel 3

Technische Aspekte

Im vorherigen Kapitel haben wir uns mit der Bestimmung der Dichteverteilung beschäftigt. In diesem Kapitel werden wir uns damit auseinandersetzen, was den Transportcode ausmacht und wie der Kern initialisiert wird.

3.1 Die BUU-Gleichung

Die Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck-Gleichung, siehe dazu die Veröffentlichungen von E. A. Uehling und G. E. Uhlenbeck [UU33] sowie G. F. Bertsch et al. [BKDG84], im folgenden BUU-Gleichung genannt, die dem verwendeten Transportcode zugrunde liegt, werden wir hier nicht herleiten. Für eine etwas ausführlichere Betrachtung empfehlen sich die Dissertationen von M. Effenberger [Eff01] und S. Teis [Tei96]. Die BUU-Gleichung läßt sich folgendermaßen ausdrücken

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{p}, t)}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial H(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{p}} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial H(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = I_{coll} . \quad (3.1)$$

Hier gehen verschiedene Annahmen ein, unter anderem die verschwindende Breite der Spektralfunktion von Nukleonen.¹

Die BUU-Gleichung selbst beschreibt die Änderung der Phasenraumdichte mit der Zeit. Wir können die einzelnen Teile der BUU-Gleichung wie folgt interpretieren: Wenn es keine Kollision von Nukleonen gibt ($I_{coll} = 0$), so ist die totale Zeitableitung der Phasenraumdichte Null. Die Bewegung der Teilchen wird dann nur durch die Funktion H bestimmt, die die Hamiltonfunktion für das Einteilchenpotential ist, siehe [BDG88] und [Tei96]. In unserem

¹In dieser Arbeit betrachten wir nur Teilchen mit verschwindender Breite. Der Fall einer endlichen Breite, also der Behandlung von Offshell-Teilchen, wird unter anderem in der Dissertation von J. Lehr [Leh03] und der Diplomarbeit von D. F. Kalok [Kal07] beschrieben.

Fall ist die Funktion H abhängig von einem mittleren Feld aller Nukleonen. Sie läßt sich aus der Gesamtenergie, siehe Gleichungen (2.13) und (2.9), mit der Beziehung

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = (2\pi)^3 \frac{\delta E}{\delta f(\vec{r}, \vec{p})} \quad (3.2)$$

herleiten. Hierbei ist zu beachten, wie Phasenraumdichte und Dichte zusammenhängen, siehe Gleichung (2.4). Weiterhin darf das Integral zur Bestimmung der mittleren kinetischen Energie nicht vor der Funktionalableitung durchgeführt werden. Die Funktionalableitungen der einzelnen Terme finden sich in Anhang A.2 und ergeben

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2M_N} + 2b_1\rho(\vec{r}) + \frac{7}{3}b_2\rho(\vec{r})^{4/3} + \frac{8}{3}b_3\rho(\vec{r})^{5/3} - 2a\vec{\nabla}^2\rho(\vec{r}) . \quad (3.3)$$

Relativistisch sieht die Funktion H folgendermaßen aus

$$\begin{aligned} H(\vec{r}, \vec{p}) = & \sqrt{M_N^2 + \vec{p}^2} + 2b_1\rho(\vec{r}) + \frac{7}{3}b_2\rho(\vec{r})^{4/3} \\ & + \frac{8}{3}b_3\rho(\vec{r})^{5/3} - 2a\vec{\nabla}^2\rho(\vec{r}) . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Für den Grundzustand eines Kerns ist der Unterschied zwischen relativistischer und nichtrelativistischer Rechnung sehr gering. Bei einem Impuls von 260 MeV, was dem Fermiimpuls bei einer Dichte von $0,16 \text{ fm}^{-3}$ entspricht, beträgt die relative Differenz der kinetischen Energie 2 %. Wenn wir den Kollisionsterm Null setzen, so wird Gleichung (3.1) zur Vlasov-Gleichung. Dies werden wir zur Untersuchung der Stabilität und Energieerhaltung des Grundzustandes später auch tun. Der Kollisionsterm kann durch Reaktionen, wie in der Dissertation von Teis, siehe [Tei96], beschrieben, die Phasenraumdichte mit der Zeit ändern. Dies ist für die Simulation von Stoßexperimenten von Interesse, da der Kollisionsterm die Reaktionen beschreibt, die vorkommen können.

3.2 Initialisierung

Zur Zeitentwicklung der Phasenraumdichte müssen wir die BUU-Gleichung, siehe Gleichung (3.1), numerisch lösen. Dafür gäbe es einmal die Möglichkeit, die Phasenraumdichte auf einem Gitter im 6-dimensionalen Phasenraum zu initialisieren und dann die BUU-Gleichung auf diesem Gitter zu lösen. Im GiBUU-Code wird dieses Problem anders behandelt. Um die Phasenraumdichte zu erzeugen, wird die sogenannte Testteilchenmethode verwendet. Eine

Beschreibung der Realisierung der Testteilchenmethode findet sich in [Eff01]. Über die Testteilchenmethode realisieren wir eine diskretisierte Approximation der kontinuierlichen Phasenraumdichte. Hierfür werden endlich viele Testteilchen entsprechend der vorgegebenen Phasenraumdichte, siehe Gleichung (2.1), mit dazugehöriger Orts- und Impulsraumkoordinate initialisiert. Die Testteilchen werden zu Ensembles zusammengefaßt. In jedem Ensemble befinden sich A Nukleonen.

Auch wenn wir die Phasenraumdichte über die Testteilchen simulieren, benötigen wir dennoch ein Gitter im Ortsraum. Für die Funktion H benötigen wir die Ortsraumdichte und diese wird für jeden Gitterpunkt bestimmt, indem die Nukleonen mittels einer Gaußverteilung über die benachbarten Gitterpunkte verschmiert werden. Jedes Nukleon trägt also zur Dichte auf den Gitterpunkten in seiner Nähe bei. So kommt man, in der Summe über alle Ensembles, auf eine Dichteverteilung. Die Dichteverteilung stimmt im Limes, daß die Anzahl der Ensembles gegen Unendlich und der Gitterabstand gegen Null geht, mit der theoretischen Verteilung überein.

Für jedes Nukleon wird dann sein Impuls in der Fermikugel, deren Radius durch

$$p_F = \left(\frac{3\pi^2}{2} \rho(\vec{r}) \right)^{1/3} \quad (3.5)$$

gegeben ist, zufällig bestimmt. Die Dichte am Ort eines Nukleons ist, wenn es nicht auf einem Gitterpunkt liegt, erst einmal unbekannt. Man nimmt hier entweder den Dichtewert des nächsten Gitterpunktes oder eine Interpolation aus den Werten der nächsten Gitterpunkte.

Bei der Initialisierung kann es passieren, daß die Energie initialisierter Nukleonen größer als Null ist. Dies liegt an der Verteilung der Nukleonen, die, da zufällig, von der numerisch berechneten Verteilung abweichen kann. Ein weiteres Problem ist der endliche Gitterabstand, der vor allem bei der Berechnung der Ableitungen zu Fehlern führt. Man kann dies verhindern, wenn man fordert, daß die Energie eines Nukleons bei der Initialisierung negativ sein muß. Diese Initialisierung entspricht dann nicht mehr der Phasenraumdichte, wie wir sie in Kapitel 2 angenommen haben und führt zu einem etwas stärker gebundenen Kern. Im nächsten Kapitel wird im Abschnitt 4.2.3 für Calcium-40 auf diese Initialisierung kurz eingegangen. Die Ortsraumverteilung ändert sich dabei nicht.

3.3 Energiebestimmung

Wir wollen während der Simulation des Kerns auch sicherstellen, daß die Energie des Kerns erhalten bleibt. Für die Überprüfung der Energieerhaltung müssen wir die Energie des Kerns bestimmen. Dafür summieren wir die Anteile der simulierten Nukleonen an der Gesamtenergie wie folgt

$$E(\vec{r}_i, p_i) = \frac{p_i^2}{2M} + b_1 \rho(\vec{r}_i) + b_2 \rho(\vec{r}_i)^{4/3} + b_3 \rho(\vec{r}_i)^{5/3} - a \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}_i) , \quad (3.6)$$

wobei p_i der Betrag des Impulses des Nukleons und \vec{r}_i sein Ortsvektor ist. Die einzelnen Anteile entsprechen Gleichung (2.15), wobei für den kinetischen Term der exakte Wert eingesetzt wurde. Für die Durchschnittsenergie pro Nukleon gilt

$$\langle E_B \rangle = \frac{\sum_i E(\vec{r}_i, p_i)}{\sum_i 1} . \quad (3.7)$$

Die Summe läuft über alle Testteilchen. Vergleichen wir diese Größe nun mit der auf der Energiedichte, siehe Gleichung (2.13), basierenden Größe

$$E_B = \frac{E}{A} = \frac{\int d^3r \epsilon}{\int d^3r \rho} . \quad (3.8)$$

Die Ergebnisse der beiden Gleichungen (3.7) und (3.8) sind nur für den Grenzwert, daß der Gitterabstand gegen 0 und die Testteilchenzahl gegen unendlich geht, identisch. Betrachten wir dazu in einem System mit Z Ensembles ein Volumen d^3r um den Punkt \vec{r} , in dem sich $n(\vec{r})$ Nukleonen befinden. Für den kinetischen Teil der Energie ist die Gleichheit durch Gleichung (2.6) gefordert, also betrachten wir nur den potentiellen Anteil und den Gradiententerm. Da d^3r klein und Z sehr groß ist, können wir annehmen, daß die Breite der Gaußverschmierung der Nukleonen klein gegen das Volumen d^3r ist, die Dichte in d^3r konstant ist mit dem Wert $\rho(\vec{r})$ und $\vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r})$ ebenfalls konstant ist. Damit ist die Dichte in d^3r gegeben durch $\frac{n(\vec{r})}{Z \cdot d^3r}$. Also gilt für die Summe über alle Volumina d^3r :

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{\text{alle} \\ d^3r}} \sum_{\vec{r} \in d^3r} E(\vec{r}, 0) &= \sum_{\substack{\text{alle} \\ d^3r}} n(\vec{r}) V(\rho(\vec{r})) \\ &= Z \sum_{\substack{\text{alle} \\ d^3r}} d^3r \rho(\vec{r}) V(\rho(\vec{r})) . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Die Summation über alle Volumina entspricht also der Integration über den potentiellen Teil und den Gradiententerm der Energiedichte. Wenn wir noch

den kinetischen Term addieren, ergibt sich für die Summe $Z \int d^3r \epsilon$. Die Summe im Nenner von Gleichung (3.7) ergibt die Anzahl aller Testteilchen, denn

$$\sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Testteilchen}}} 1 = Z \cdot A = Z \int d^3r \rho. \quad (3.10)$$

Damit ist die Identität der beiden Gleichungen (3.7) und (3.8) für den Kontinuums Grenzwert gezeigt.

Eine Bedingung, die die in Kapitel 2 hergeleitete Dichteverteilung erfüllen soll, ist eben diese Energieerhaltung. Oszillationen des Kerns, die aufgrund der numerischen Ungenauigkeit unvermeidbar sind, sollten ebenfalls minimal sein. Alternativ könnte man auch die in Gleichung (3.8) auftretenden Integrale numerisch über das Gitter berechnen, was, siehe die Betrachtung im folgenden Kapitel im Abschnitt über die Energieerhaltung bei den verschiedenen Kernen, etwas ungenauer ist.

3.4 Stabilität des Kerns

Neben der Energieerhaltung werden wir uns im nächsten Kapitel auch mit der Stabilität des Kerns auseinandersetzen. Das Dichteprofil des Kerns zu betrachten, wie es sich mit der Zeit verändert, wäre eine Möglichkeit. Hier bliebe es uns überlassen, ob wir eine Achse auswählen, oder jeweils den Mittelwert für die Kugelschalen ausgeben. Die Methode, die wir benutzen, ist weniger anschaulich. Sie erlaubt es uns aber, die Zeitentwicklungen für verschiedene Initialisierungen miteinander zu vergleichen. Dafür betrachten wir die Wurzel des mittleren Abstandsquadrats der Nukleonen zum Mittelpunkt des Kerns, später auch rms-Radius genannt

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\sum_i \vec{r}_i^2}{\sum_i 1}}. \quad (3.11)$$

In dieser Gleichung läuft die Summe über alle simulierten Nukleonen.

3.5 Dichtebestimmung

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Dichte am Ort eines Nukleons zu berechnen. Die Dichtebestimmung auf den Gitterpunkten geschieht bei allen so, daß ein Nukleon mittels einer Gaußverteilung über die benachbarten Gitterpunkte verschmiert wird. Dies geschieht mit der folgenden Formel

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{i: \vec{r}_i \in U(\vec{r})} e^{-[\vec{\sigma}(\vec{r} - \vec{r}_i)]}. \quad (3.12)$$

Die Konstante $\vec{\sigma}$ ist ein reziproker Gittervektor. Er wird bestimmt als

$$\vec{\sigma} = \frac{1}{d_l} \vec{e}_l, \quad (3.13)$$

wobei d_l die Gitterkonstante in Richtung des l -ten Einheitsvektors ist. Wenn der Gitterpunktabstand reduziert wird, so wird auch die Gaußverteilung schmaler. Die Konstante N wird so bestimmt, daß die Normierung

$$A = \int d^3r \rho(\vec{r}) \quad (3.14)$$

erhalten ist.

Für die Berechnung von $\vec{\nabla}^2 \rho$ wird eine Methode zweiter Ordnung verwendet

$$\frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial x_i^2} = \frac{\rho(\vec{r} - \Delta x_i \vec{e}_i) - 2\rho(\vec{r}) + \rho(\vec{r} + \Delta x_i \vec{e}_i)}{(\Delta x_i)^2}. \quad (3.15)$$

Man benötigt also für die Berechnung von $\vec{\nabla}^2 \rho$ die Dichte an sieben verschiedenen Punkten. Diese Abfrage ist, wenn man eine Interpolation der jeweils acht benachbarten Gitterpunkte verwendet, sehr zeitaufwendig. Es gibt die Alternative, die Dichte des am Nächsten gelegenen Gitterpunktes zu nehmen, statt einer Interpolation der benachbarten Punkte. Dies ist ungenauer, geht aber schneller. Einen Mittelweg zwischen den beiden Methoden stellt die Entkoppelung von Verschmierungsbreite der Nukleonen und dem Gitterabstand dar. Hierfür wird die Dichte auf mehr Gitterpunkten gespeichert. Dennoch bleibt die Verschmierung so, als ob wir einen größeren Gitterabstand hätten. Wenn man bei Dichteabfragen nun die Dichte des nächsten Gitterpunktes zurückgibt, hat man eine feinere Auflösung zur Verfügung. Dies bezahlt man mit einem erhöhten Speicherbedarf für das feinere Gitter und mehr Zeit, um die Dichte auf diesen Gitterpunkten nach jedem Zeitschritt zu aktualisieren. Im folgenden Kapitel werden wir uns genauer mit den Laufzeitunterschieden auseinandersetzen.

In den Abbildungen 3.1, 3.3 und 3.4 ist dargestellt, wie die Dichteverteilung für die verschiedenen Methoden nach der Initialisierung bei einem Gitterabstand von 0,8 fm entlang einer ausgewählten Achse, hier genannt z -Achse, aussieht. Man erkennt hierbei gut die Stufenform der Verteilung, wenn die Interpolationsmethode nicht verwendet wird. Bei halb so großem Gitterabstand wird die achtfache Anzahl von Ensembles verwendet, um eine konstante Anzahl von Nukleonen pro Gitterbox zu haben. Wie in den Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7 zu sehen ist, folgt aus dem geringeren Gitterabstand eine bessere Annäherung der simulierten Dichte an die numerisch berechnete Lösung der Differentialgleichung, vor allem im Bereich der Oberfläche. In

Abbildung 3.7 sehen wir eine gewisse Abweichung der inneren Dichte von der numerischen Berechnung, die an der zufälligen Verteilung der Testteilchen im Ortsraum liegt. Die initialisierte Dichteverteilung in Abbildung 3.1 weicht am deutlichsten von der Lösung der Differentialgleichung ab. Daß dies an der Breite der Gaußverteilung liegt, können wir zeigen, indem wir die Breite dieser Verteilung verringern. In Abbildung 3.2 sehen wir, wie sich die interpolierte Dichteverteilung bei halber Breite der Gaußverteilung verändert. Die Oberfläche wird besser nachgebildet, aber im Inneren des Kerns haben wir eine zu hohe Dichte im Vergleich zur Lösung der Differentialgleichung.

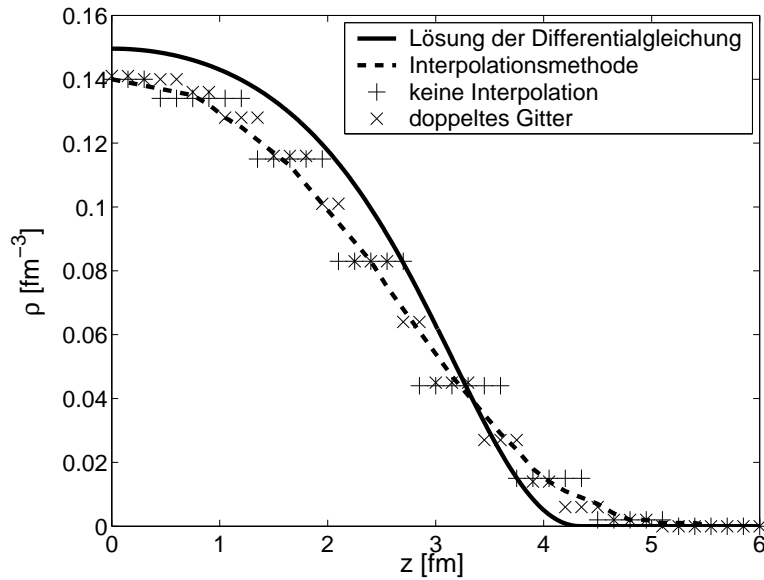


Abbildung 3.1: Der Vergleich der numerisch berechneten Dichteverteilung entlang der z -Achse mit den verschiedenen Dichtebestimmungsmethoden für Sauerstoff-16 bei einem Gitterabstand von 0,8 fm und der Verwendung von 1000 Ensembles

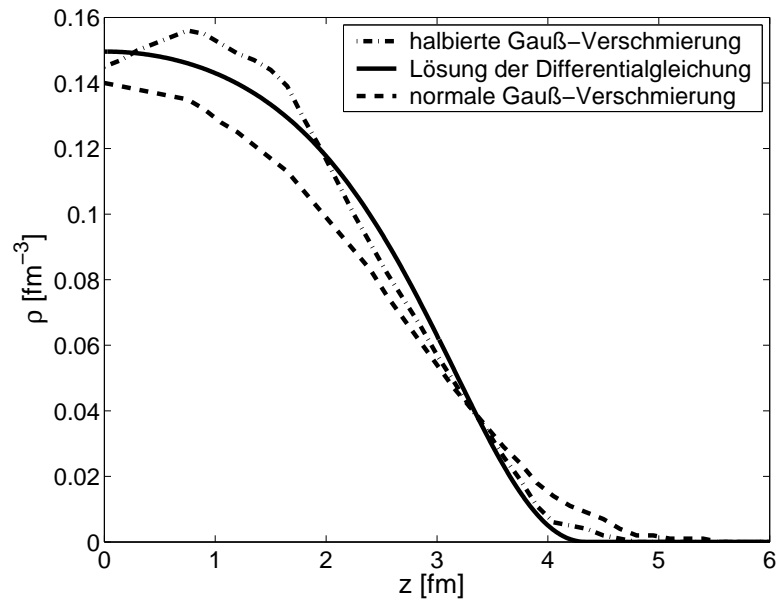


Abbildung 3.2: Der Vergleich der numerisch berechneten Dichteverteilung entlang der z -Achse bei Verwendung der Interpolationsmethode und verschiedenen Breiten der Gaußverteilung für Sauerstoff-16 bei einem Gitterabstand von 0,8 fm und der Verwendung von 1000 Ensembles

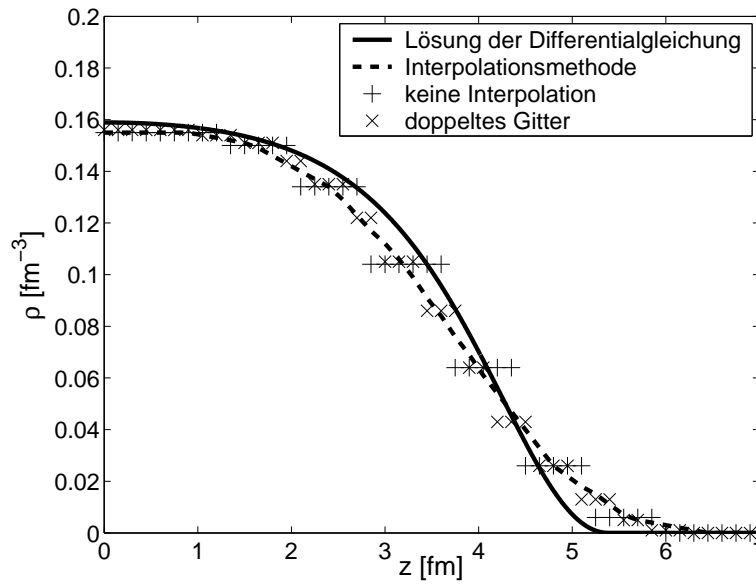


Abbildung 3.3: Der Vergleich der numerisch berechneten Dichteverteilung entlang der z-Achse mit den verschiedenen Dichtebestimmungsmethoden für Calcium-40 bei einem Gitterabstand von 0,8 fm und der Verwendung von 1000 Ensembles

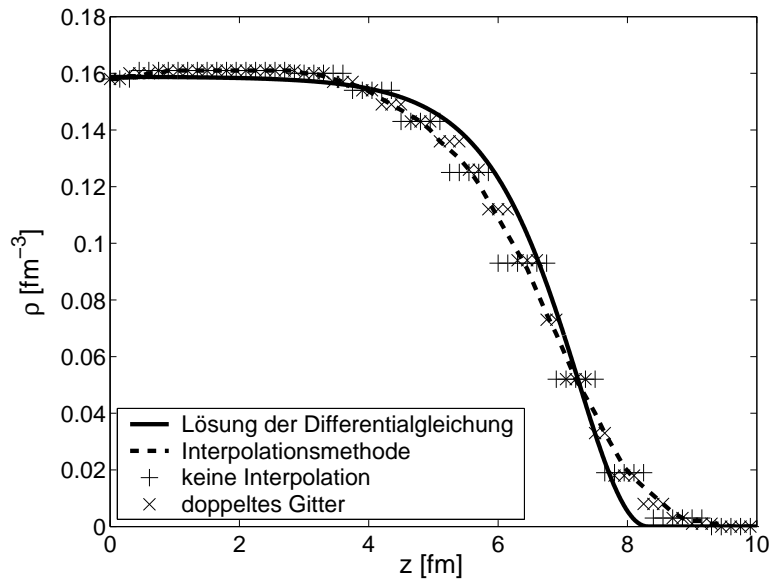


Abbildung 3.4: Der Vergleich der numerisch berechneten Dichteverteilung entlang der z-Achse mit den verschiedenen Dichtebestimmungsmethoden für Blei-208 bei einem Gitterabstand von 0,8 fm und der Verwendung von 1000 Ensembles

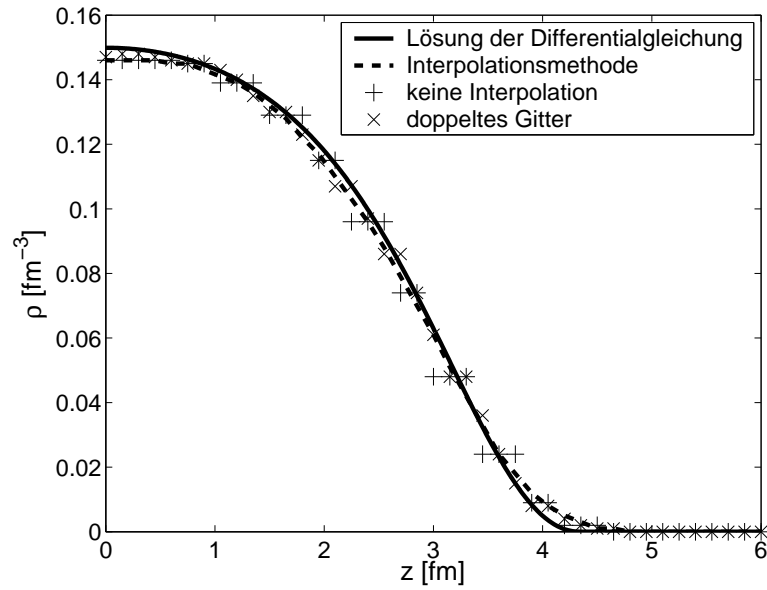


Abbildung 3.5: Der Vergleich der numerisch berechneten Dichteverteilung entlang der z-Achse mit den verschiedenen Dichtebestimmungsmethoden für Sauerstoff-16 bei einem Gitterabstand von 0,4 fm und der Verwendung von 8000 Ensembles

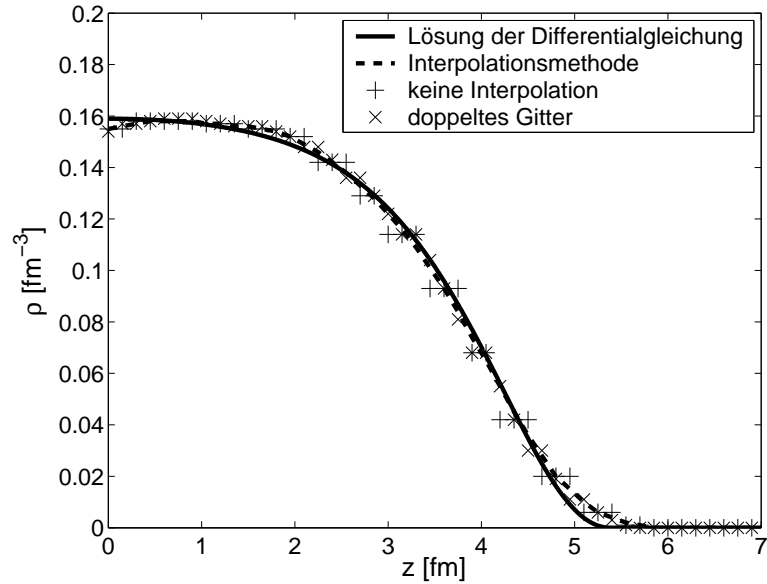


Abbildung 3.6: Der Vergleich der numerisch berechneten Dichteverteilung entlang der z-Achse mit den verschiedenen Dichtebestimmungsmethoden für Calcium-40 bei einem Gitterabstand von 0,4 fm und der Verwendung von 8000 Ensembles

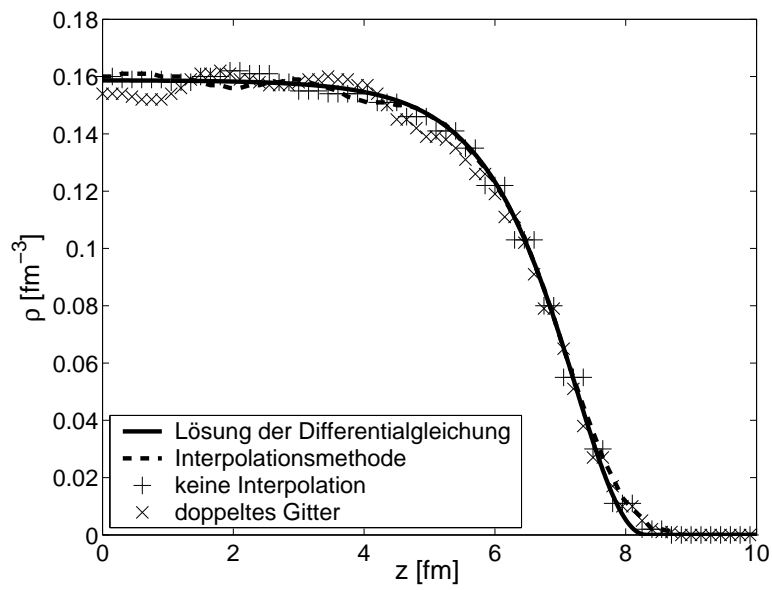


Abbildung 3.7: Der Vergleich der numerisch berechneten Dichteverteilung entlang der z -Achse mit den verschiedenen Dichtebestimmungsmethoden für Blei-208 bei einem Gitterabstand von 0,4 fm und der Verwendung von 8000 Ensembles

3.6 Das Welke-Potential

Wir werden im folgenden Kapitel den Berechnungen des Brueckner-Potentials eine der Kombinationen aus Dichteverteilung und Potential gegenüberstellen, die zur Zeit im GiBUU-Code verwendet werden. Als Dichteverteilung nehmen wir die schon erwähnte Implementierung einer Woods-Saxon-Verteilung von Horst Lenske. Diese ist nicht konsistent mit dem Potential, bietet aber eine gute Näherung an experimentell bestimmte Dichteverteilungen. Das Potential, das vor allem bei photonen-, elektronen- und neutrinoinduzierten Kernreaktionen derzeit verwendet wird, ist ein impulsabhängiges Potential, das auf einer Arbeit von Welke et al., siehe [WPK⁺88], beruht.

Das Potential sieht folgendermaßen aus:

$$V(\vec{r}, \vec{p}) = A \frac{\rho(\vec{r})}{\rho_0} + B \left(\frac{\rho(\vec{r})}{\rho_0} \right)^\tau + \frac{2C}{\rho_0} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{\lambda^2 f(\vec{r}, \vec{p}')}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2} . \quad (3.16)$$

Die Parameter sind aus der Arbeit von Effenberger [Eff01] entnommen. Ihre Zahlenwerte sind in Tabelle 3.1 zu finden.

Die Grundidee hinter dem Potential ist, daß zwei Nukleonen schwächer miteinander wechselwirken, wenn ihre Impulse stark unterschiedlich sind. Die Verwendung dieses Potentials liefert für Simulationen von Streuexperimenten Ergebnisse, die näher an den experimentellen Daten liegen, als bei einem impulsunabhängigen Potential, siehe beispielsweise [BLMAR07].

A	−29,25 MeV
B	57,25 MeV
τ	1,76
λ	2,13 fm ^{−1}
C	−63,52 MeV

Tabelle 3.1: Die Parameter für das Welke-Potential im GiBUU-Code

Kapitel 4

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden wir das Verhalten verschiedener Kerne betrachten. Wir untersuchen jeweils, wie die Veränderung der Anzahl der Ensembles und die Veränderung der Methode zur Berechnung der Dichte sich auf die Stabilität und die Energieerhaltung der Kerne auswirken. Hier ist es von Interesse, zu sehen, wieviele Ensembles für einen stabilen Kern notwendig sind. Denn die Zeit, die für die Berechnung benötigt wird, hängt linear mit der Zahl der Ensembles zusammen. Wir werden als Vertreter der leichten Kerne Sauerstoff-16 betrachten und für die mittelschweren Kerne Calcium-40. Dies sind beides symmetrische Kerne, der Vertreter der schweren Kerne, Blei-208, ist naturgemäß keiner. Dies macht in unserem Fall, da wir nicht zwischen Protonen und Neutronen unterscheiden, für die Stabilität keinen Unterschied. Für die Simulationen benutzen wir einen Gitterabstand von 0,8 fm. Diese Wahl bedeutet, daß die Oberfläche, die eine Dicke um 2,4 fm und mehr hat, mit 3 Gitterpunkten aufgelöst wird, wenn wir uns auf einer Achse befinden und mit 2 Gitterpunkten, wenn wir uns auf einer Raumdiagonalen befinden. Das Gitter hat, für Sauerstoff und Calcium, ein Volumen von 16^3 fm^3 . Für Blei müssen wir ein größeres Gitter wählen, da der Kern eine größere Ausdehnung hat. Wir wählen ein Volumen von 24^3 fm^3 , und müssen somit mehr als dreimal so viele Gitterpunkte simulieren.

Zur Untersuchung der Stabilität des Kernes variieren wir die Anzahl von Ensembles. Außerdem betrachten wir die Auswirkungen der im letzten Kapitel beschriebenen Methoden zur Bestimmung der Dichte. Die Simulationen laufen immer über einen Zeitraum von 150 fm/c und die Zeitschritte sind 0,25 fm/c. Um zu überprüfen, ob dies eine Verbesserung gegenüber der bisherigen Situation ist, vergleichen wir die Ergebnisse mit dem Verhalten des Kernes, wenn er mit einer Woods-Saxon-Verteilung initialisiert wird und das Potential wie in [Tei96] und [WPK⁺88] gewählt wird. Dieses Potential hat einen entscheidenden Unterschied zu dem in dieser Arbeit vorgestellten Po-

tential. Es ist, neben der Dichteabhängigkeit, auch noch impulsabhängig. Einen Versuch, das hier vorgestellte Potential um einen impulsabhängigen Teil zu erweitern, werden wir später noch unternehmen.

4.1 Sauerstoff-16

4.1.1 Energieerhaltung

Wir werden uns zuerst ansehen, wie gut die Energieerhaltung für unser Modell gilt. Die Bindungsenergie pro Nukleon, die sich bei der Lösung der Differentialgleichung ergibt, ist $-8,62$ MeV. Für diese Berechnung wurde die Dichteverteilung, die wir als Lösung der Differentialgleichung erhalten, in Gleichung (3.8) eingesetzt und das Energie-Dichte-Funktional aus Gleichung (2.13) verwendet. Wir bestimmen die Energie während der Simulation wie in Gleichung (3.7) beschrieben. Die Simulation mit der geringsten Anzahl an Ensembles, siehe Abbildung 4.1, hat von vorneherein eine größere Abweichung von dem theoretischen Wert und zeigt die größten Oszillationen. Es ist aber zu bemerken, daß die Energie im Verlauf der Berechnung, bei der die Dichte linear interpoliert wurde, auch hier stabil ist. Dies ist bei den anderen beiden Methoden, der Dichtebestimmung über den nächstgelegenen Gitterpunkt und der Verdopplung der Gittergenauigkeit, nicht der Fall. Auch bei Berechnungen mit mehr Ensembles bleibt, von der Sicht der Energieerhaltung, die Interpolationsmethode die beste Wahl. Die anderen beiden Methoden sind für 500 Ensembles, siehe Abbildung 4.2, noch nicht zu empfehlen. Bei 1000 Ensembles, siehe Abbildung 4.3, und 2000 Ensembles, siehe Abbildung 4.4, sieht dies schon anders aus. Hier wird die Gesamtenergie auch bei Anwendung der schlechteren Methoden gut erhalten. Der Laufzeitunterschied der verschiedenen Methoden und Ensembles ist in Tabelle 4.2 zu sehen. Die Dauer der Berechnungen ist linear von der Anzahl der Ensembles abhängig. Wir erkennen, daß die Methode der Interpolation etwa siebenmal so viel Zeit benötigt wie die einfachste Methode und etwa dreimal so viel wie bei der Verwendung eines doppelt so feinen Gitters. Zur Laufzeit ist noch zu erwähnen, daß bei den Berechnungen unter Verwendung der Woods-Saxon-Initialisierung und des Welke-Potentials immer die Interpolationsmethode zur Bestimmung der Dichte verwendet wurde.

Die berechnete Energie ist bei Verwendung von 2000 Ensembles, siehe Tabelle 4.2 geringer, als die Bindungsenergie nach der Berechnung aus der Differentialgleichung sein sollte. Diese Überbindung werden wir etwas genauer untersuchen. Wie wir in Tabelle 4.1 sehen können, gibt es in allen Termen eine recht große Abweichung vom zu erwartenden Wert. Die einzelnen Ener-

gieanteile verhalten sich aber, wie man es von ihnen erwartet. Kinetische und potentielle Energie zusammengekommen sind bei der GiBUU-Initialisierung vom Betrag her geringer als im Fall der Berechnung über die Differentialgleichung. Der Term, der somit für die Überbindung verantwortlich ist, ist der Gradiententerm, was sich durch den großen Gitterabstand erklären läßt. Wenn wir ein feineres Gitter und mehr Ensembles verwenden, siehe ebenfalls Tabelle 4.1, nähern sich die Werte der Energieanteile der Lösung der Differentialgleichung an. Wenn wir die Dichteverteilung, die durch die Testteilchen erzeugt wird, zur Berechnung der Energie pro Nukleon verwenden (siehe Gleichungen (3.8) und (2.13)), so kommen wir zu Beginn der Simulation auf -6,68 MeV im Falle der 2000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm. Wenn wir diese Integration bei 8000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,4 fm durchführen, erhalten wir ein Ergebnis von -8,06 MeV.

	Energie pro Nukleon	kinetische Energie	„potentielle“ Energie	Gradiententerm
Differentialgleichung	-8,62	14,39	-26,39	3,38
GiBUU-Initialisierung (2000 Ensembles, Gitter 0,8 fm)	-8,68	12,93	-23,94	2,32
GiBUU-Initialisierung (8000 Ensembles, Gitter 0,4 fm)	-8,60	14,06	-25,76	3,11

Tabelle 4.1: Vergleich der Energie pro Nukleon für Sauerstoff-16, aufgeschlüsselt in die verschiedenen Anteile des Energie-Dichte-Funktional, siehe Gleichung (2.13). Alle Energien sind in MeV angegeben, bei der Initialisierung wurde die Interpolationsmethode verwendet. Die Energien der GiBUU-Initialisierung wurden wie in Gleichung (3.7) beschrieben berechnet.

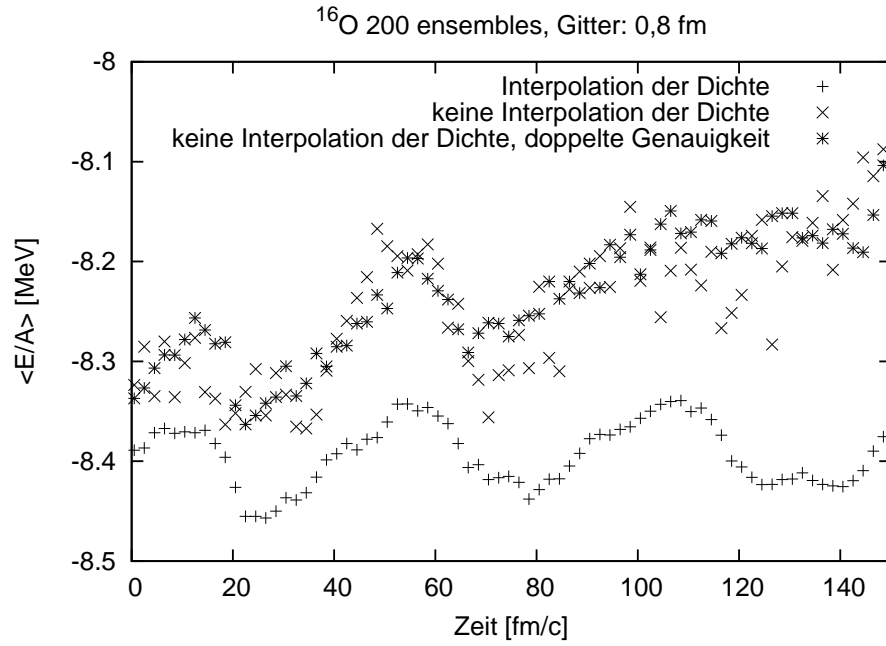


Abbildung 4.1: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Sauerstoff-16 bei 200 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

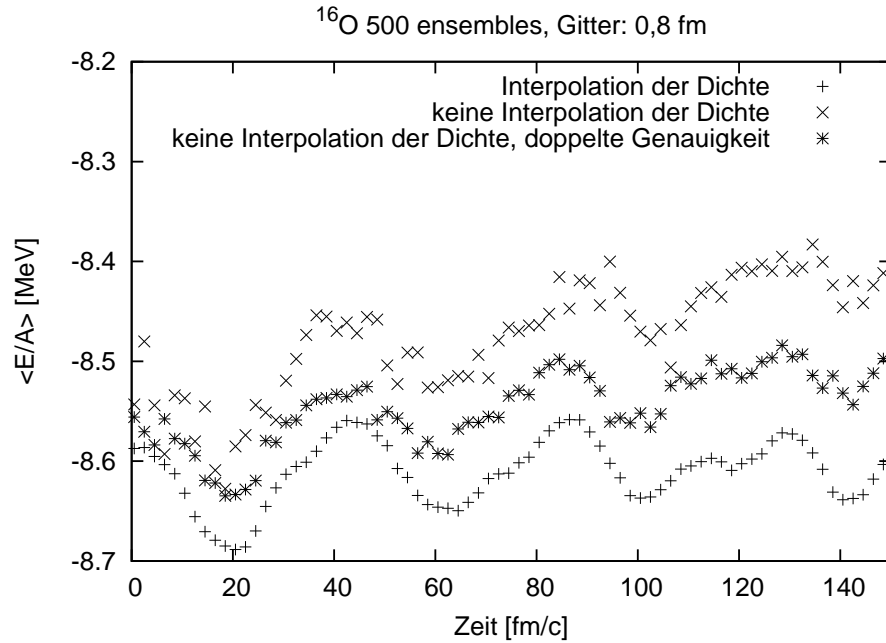


Abbildung 4.2: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Sauerstoff-16 bei 500 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

Anzahl Ensembles	Dichteberechnung	Laufzeit [h:min]	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standardabweichung des rms-Radius [fm]	Anfangswert der Energie [MeV]	Maximale Differenz [MeV]
200	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	1:42 0:16 0:34	2,601 2,601 2,624	0,025 0,036 0,029	-8,389 -8,324 -8,337	0,073 0,236 0,233
500	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	4:20 0:38 1:24	2,590 2,586 2,601	0,029 0,032 0,028	-8,587 -8,543 -8,556	0,109 0,176 0,092
1000	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	8:14 1:17 2:36	2,575 2,571 2,585	0,024 0,030 0,021	-8,585 -8,547 -8,569	0,102 0,157 0,084
2000	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	15:58 2:22 5:21	2,565 2,562 2,575	0,017 0,024 0,015	-8,684 -8,640 -8,676	0,081 0,128 0,079
Welke-Potential mit Woods-Saxon Dichteverteilung						
Anzahl Ensembles	Yukawa	Laufzeit [h:min]	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standardabweichung des rms-Radius [fm]		
500	nein ja	1:22 1:20	2,817 2,681	0,414 0,158		
1000	nein ja	2:41 2:37	2,842 2,644	0,442 0,126		
2000	nein ja	5:20 5:06	2,871 2,668	0,462 0,145		

Tabelle 4.2: In dieser Tabelle befinden sich die Dauer der Berechnungen bei Sauerstoff-16 bei einem Gitterabstand von 0,8 fm sowie der über die Zeit gemittelte rms-Radius und dessen Standardabweichung. Als Maß für die Energieerhaltung sind hier der Anfangswert der Energie und die maximale Abweichung von diesem Wert im Verlauf der Simulation angegeben.

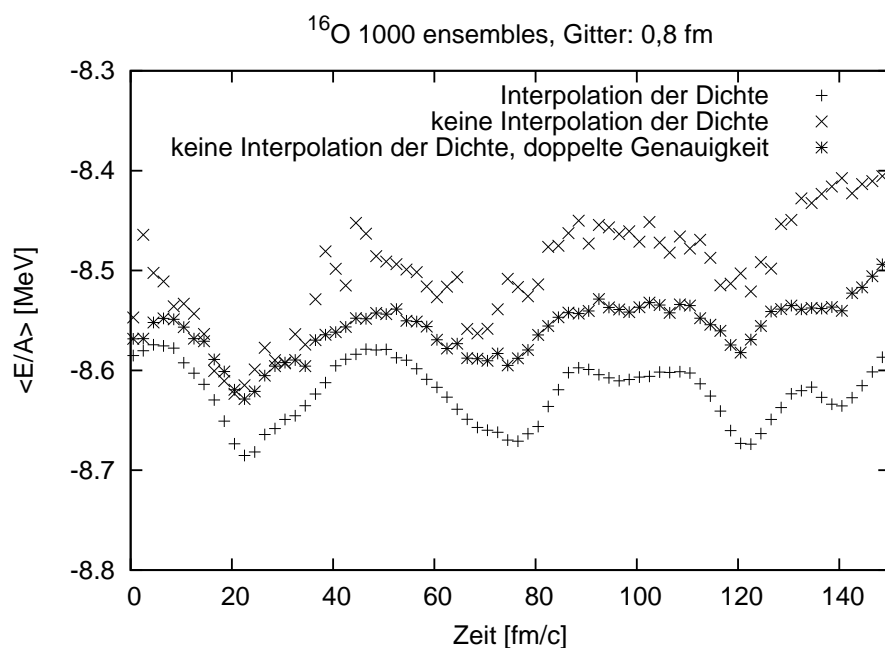


Abbildung 4.3: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Sauerstoff-16 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

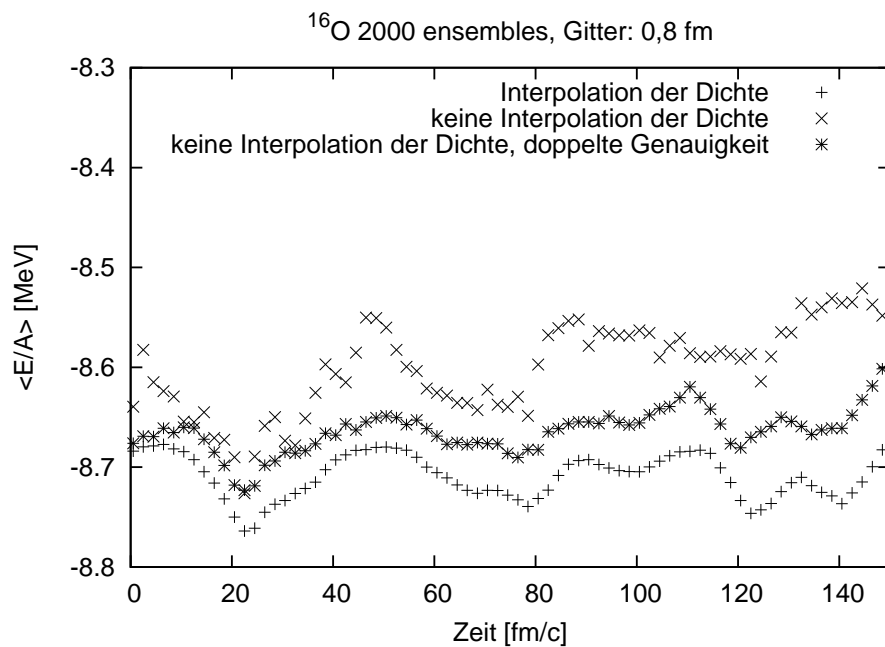


Abbildung 4.4: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Sauerstoff-16 bei 2000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

4.1.2 Stabilität

Neben der Energieerhaltung des Gesamtsystems wollen wir auch untersuchen, ob der Kern stabil ist. Hierfür betrachten wir mit den gleichen Parametern wie oben die Größe $\langle r^2 \rangle^{1/2}$. Die Lösung der Differentialgleichung ergibt hier einen Wert von 2,60 fm. Wie wir in den Abbildungen 4.5 und 4.6 sehen, sind diese über die Zeit von 150 fm/c für 200 und 500 Ensembles nicht stabil. Gegen Ende der Simulation nimmt die beobachtete Größe zu, während sie bei 1000 und 2000 Ensembles, siehe Abbildungen 4.7 und 4.8, zwar oszilliert, aber dies um einen konstanten Wert. Wenn wir uns nun zum Vergleich den bisher verwendeten Potentialen zuwenden, in Abbildung 4.9 und Abbildung 4.10 zu sehen, so bemerken wir als erstes, daß die Oszillation von $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ ab 60 fm/c von einer Expansion überlagert wird. Hier hilft es wenig, wenn wir, wie bei den Berechnungen zu Abbildung 4.10 geschehen, dem Welke-Potential noch einen Yukawa-Term hinzufügen. Auch die anfängliche Oszillation ist mit einer Amplitude von 0,25 fm um eine Größenordnung höher als die Amplitude 0,03 fm, die wir für 2000 Ensembles mit unserer Methode erreichen.

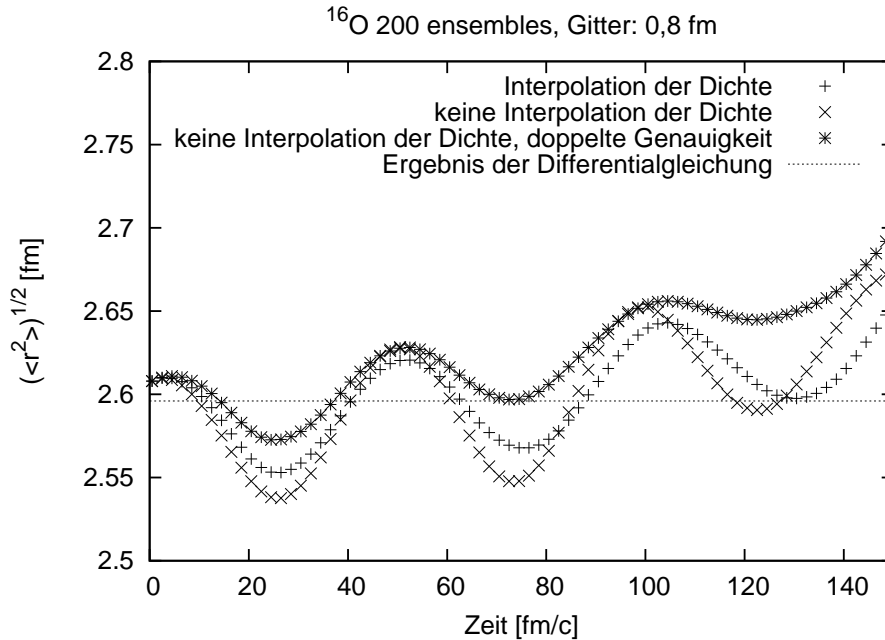


Abbildung 4.5: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei 200 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

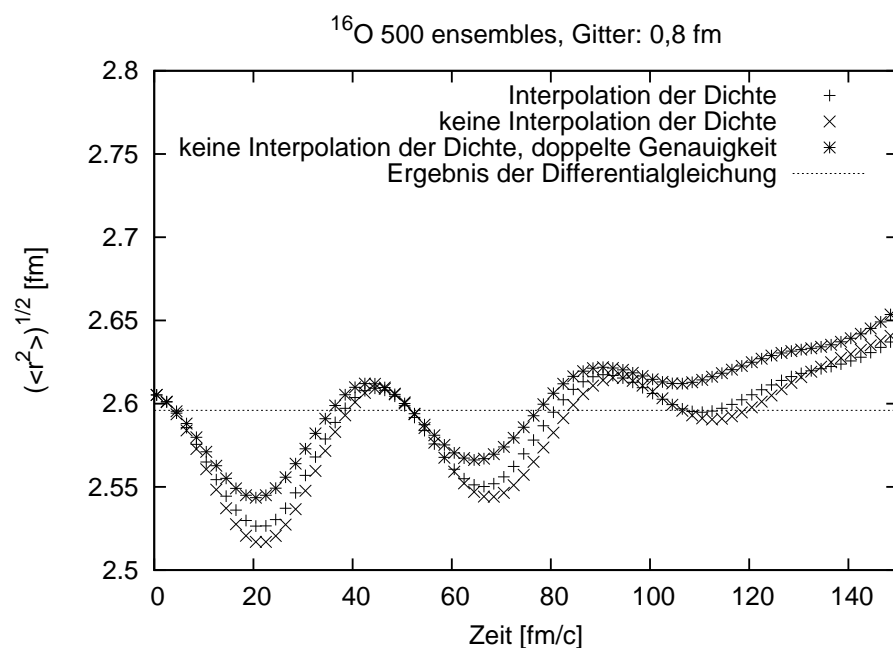


Abbildung 4.6: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei 500 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

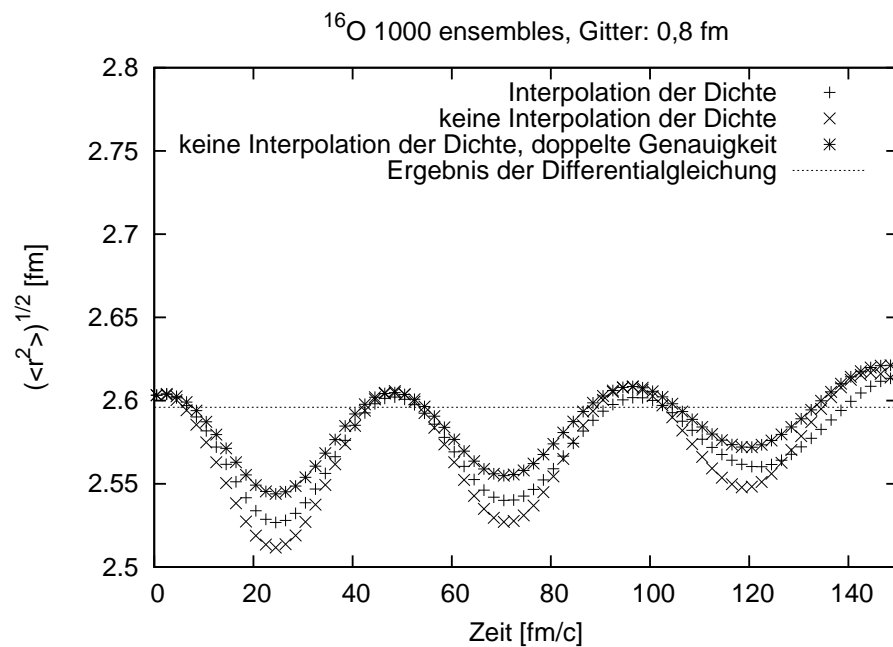


Abbildung 4.7: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

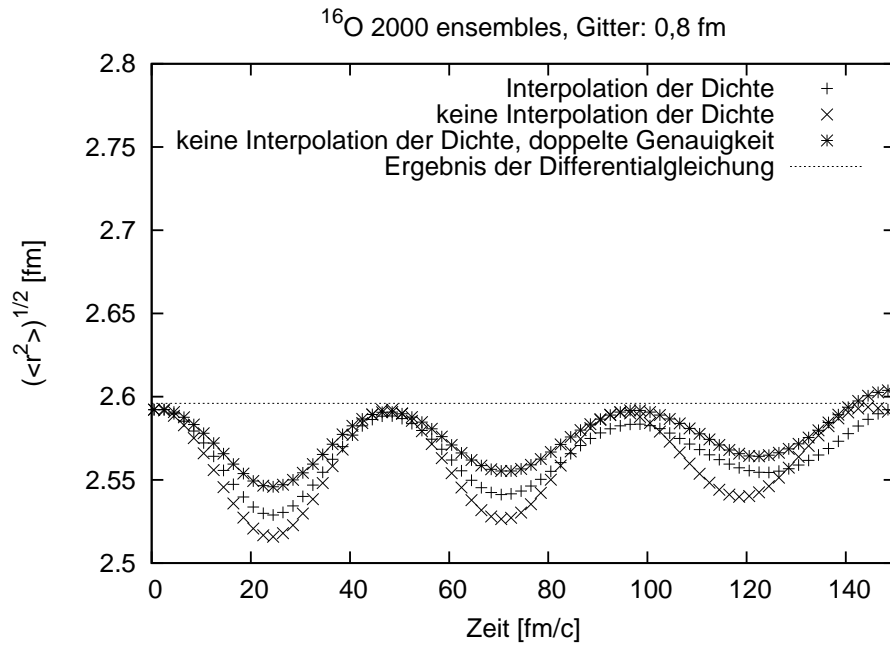


Abbildung 4.8: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei 2000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

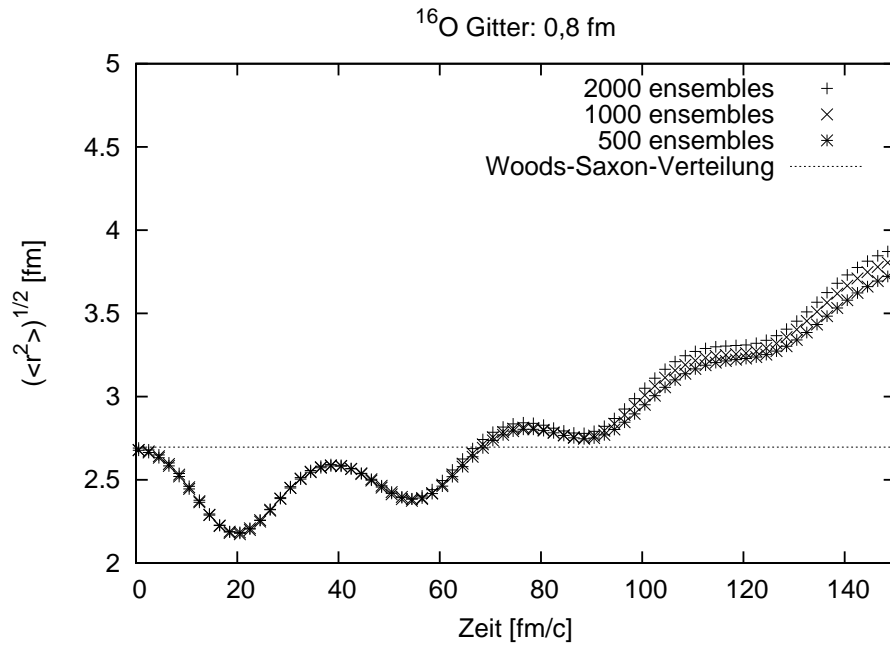


Abbildung 4.9: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei Verwendung des Welke-Potentials, der Woods-Saxon-Verteilung und einem Gitterabstand von 0,8 fm

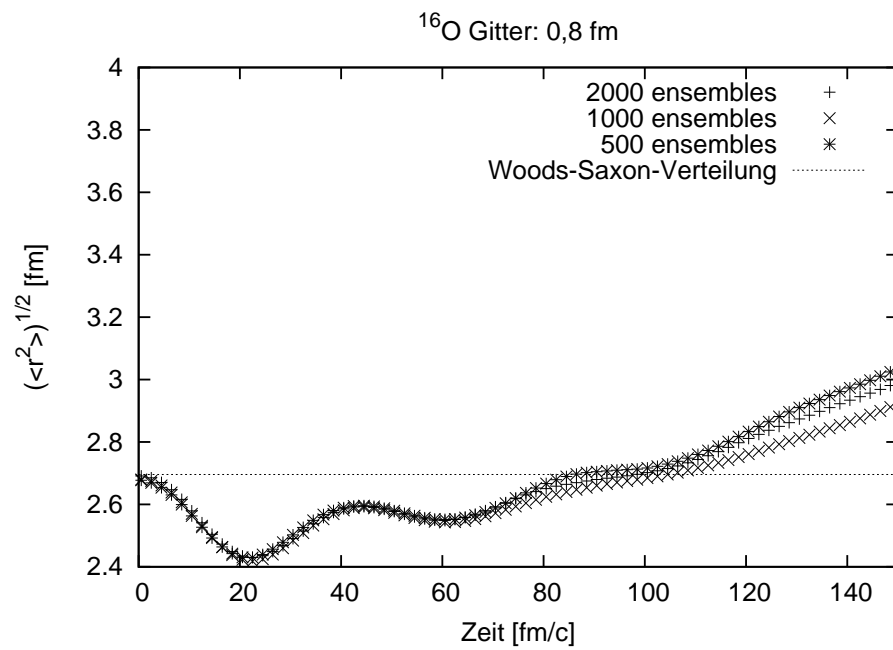


Abbildung 4.10: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei Verwendung des Welke-Potentials mit Yukawa-Term, der Woods-Saxon-Verteilung und einem Gitterabstand von 0,8 fm

4.2 Calcium-40

4.2.1 Energieerhaltung

Für den Kern mit 40 Nukleonen kommen wir mit dem verwendeten Energie-Dichte-Funktional auf eine durchschnittliche Energie von $-10,49$ MeV pro Nukleon. Für diese Berechnung wurde die Dichteverteilung, die wir als Lösung der Differentialgleichung erhalten, in Gleichung (3.8) eingesetzt und das Energie-Dichte-Funktional aus Gleichung (2.13) verwendet. Wir bestimmen die Energie während der Simulation wie in Gleichung (3.7) beschrieben. Wieder sehen wir, daß die Berechnung mit der geringen Anzahl von 200 Ensembles, vgl. Abbildung 4.11, am stärksten oszilliert. Die Energie bleibt aber für die Interpolationsmethode in einem Bereich von ± 1 % um den Startwert erhalten. Für 500 Ensembles ist die Energieerhaltung noch besser, siehe Abbildung 4.12. Eine größere Anzahl von Ensembles bringt für die Interpolationsmethode keinen sichtbaren Unterschied bei der Energieerhaltung, siehe Abbildungen 4.13 und 4.14. Dafür erhöht sich aber die Genauigkeit der Energieerhaltung für die schlechteren Methoden. Zur Laufzeit in Tabelle 4.4 im Vergleich zu Tabelle 4.2 muß noch erwähnt werden, daß die Berechnungen für Calcium und auch Blei auf einem schnelleren System stattfanden. Die Zeiten sind innerhalb einer Tabelle vergleichbar, aber nicht zwischen den Tabellen.

Es tritt bei einigen Initialisierungen wie bei Sauerstoff-16 eine leichte Überbindung auf. Eine genauere Betrachtung der Energieanteile führt zu den gleichen Ergebnissen wie bei Sauerstoff-16, siehe Tabelle 4.3. Auch hier ist die Überbindung auf einen zu kleinen Gradiententerm und somit die Gitterungenauigkeit zurückzuführen. Die Berechnung der Energie pro Nukleon zum Beginn der Simulation als ein Integral über die erzeugte Dichteverteilung (siehe Gleichungen (3.8) und (2.13)) ergibt für 2000 Ensembles und einen Gitterabstand von $0,8$ fm einen Wert von $-8,98$ MeV. Bei 8000 Ensembles und einem Gitterabstand von $0,4$ fm hat das Integral das Ergebnis $-10,05$ MeV.

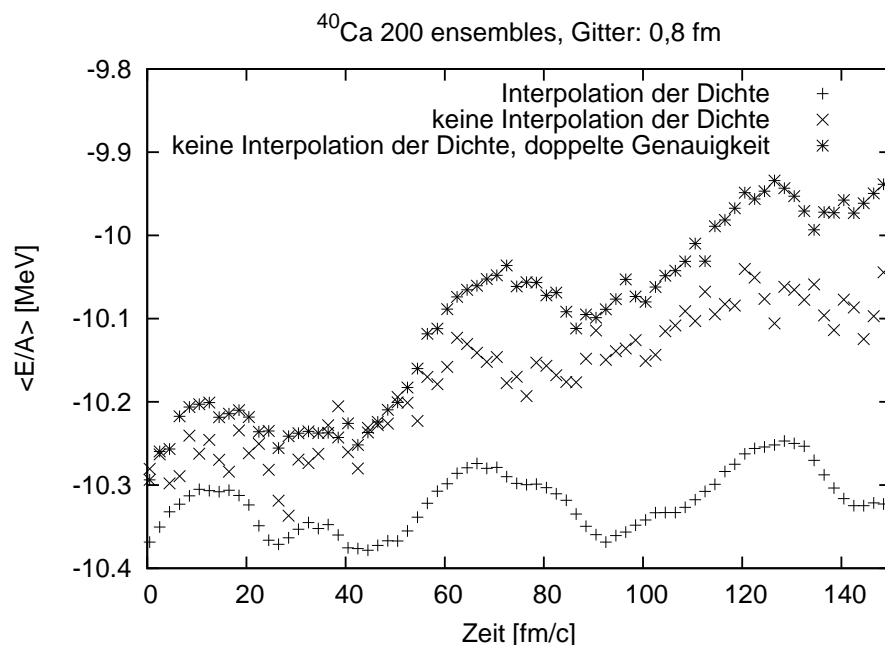


Abbildung 4.11: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Calcium-40 bei 200 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

	Energie pro Nukleon	kinetische Energie	„potentielle“ Energie	Gradiententerm
Differentialgleichung	-10,49	16,17	-29,32	2,66
GiBUU-Initialisierung (2000 Ensembles, Gitter 0,8 fm)	-10,58	15,09	-27,62	1,94
GiBUU-Initialisierung (8000 Ensembles, Gitter 0,4 fm)	-10,47	15,91	-28,87	2,49

Tabelle 4.3: Vergleich der Energie pro Nukleon für Calcium-40, aufgeschlüsselt in die verschiedenen Anteile des Energie-Dichte-Funktional, siehe Gleichung (2.13). Alle Energien sind in MeV angegeben, bei der Initialisierung wurde die Interpolationsmethode verwendet. Die Energien der GiBUU-Initialisierung wurden wie in Gleichung (3.7) beschrieben berechnet.

Anzahl Ensembles	Dichteberechnung	Laufzeit [h:min]	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standardabweichung des rms-Radius [fm]	Anfangswert der Energie [MeV]	Maximale Differenz [MeV]
200	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	3:04 0:27 1:09	3,359 3,347 3,372	0,022 0,020 0,027	-10,369 -10,281 -10,294	0,122 0,265 0,373
500	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	7:27 1:05 2:31	3,327 3,318 3,334	0,007 0,018 0,007	-10,561 -10,489 -10,521	0,076 0,208 0,155
1000	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	14:37 2:07 5:16	3,326 3,314 3,330	0,006 0,010 0,006	-10,617 -10,550 -10,582	0,079 0,137 0,124
2000	Interpolation nächster Punkt doppeltes Gitter	28:29 4:07 9:59	3,323 3,312 3,327	0,004 0,011 0,004	-10,580 -10,516 -10,549	0,053 0,129 0,086
Welke-Potential mit Woods-Saxon Dichteverteilung						
Anzahl Ensembles	Yukawa	Laufzeit [h:min]	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standardabweichung des rms-Radius [fm]		
500	nein ja	2:27 2:25	3,285 3,317	0,201 0,089		
1000	nein ja	4:54 4:47	3,296 3,332	0,203 0,099		
2000	nein ja	9:49 9:23	3,294 3,322	0,207 0,088		

Tabelle 4.4: In dieser Tabelle befinden sich die Dauer der Berechnungen bei Calcium-40 bei einem Gitterabstand von 0,8 fm sowie der über die Zeit gemittelte rms-Radius und dessen Standardabweichung. Als Maß für die Energieerhaltung sind hier der Anfangswert der Energie und die maximale Abweichung von diesem Wert im Verlauf der Simulation angegeben.

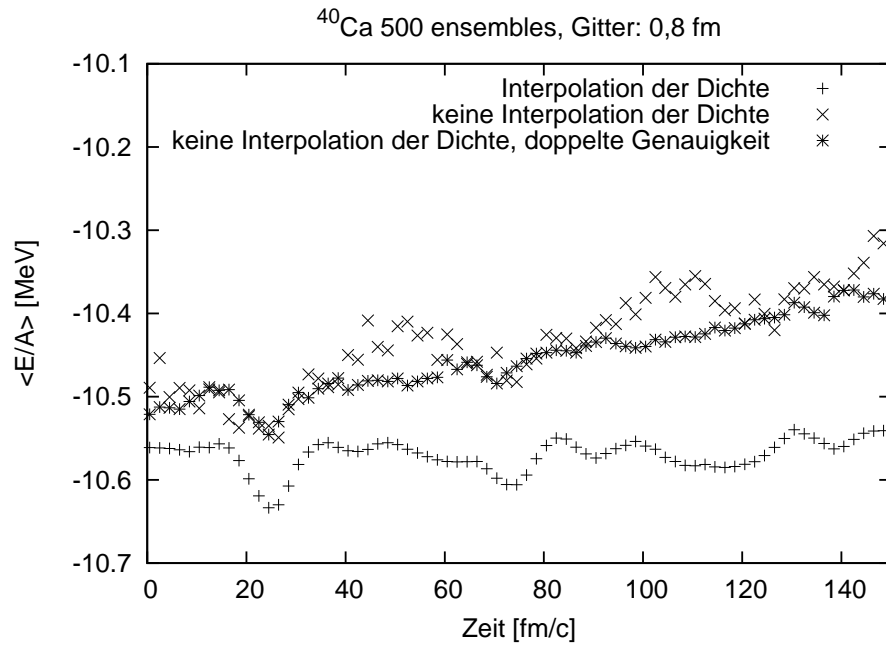


Abbildung 4.12: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Calcium-40 bei 500 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

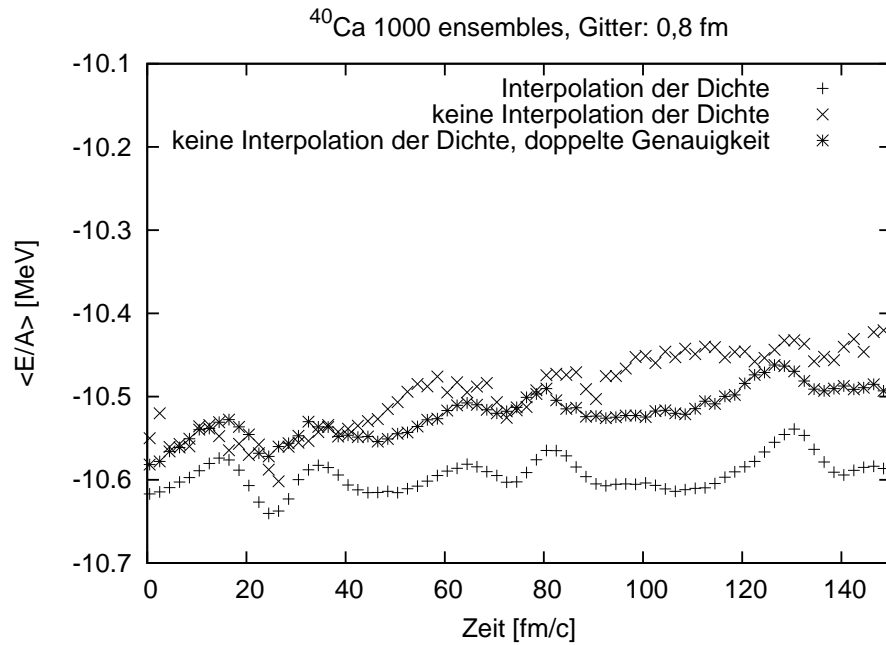


Abbildung 4.13: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Calcium-40 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

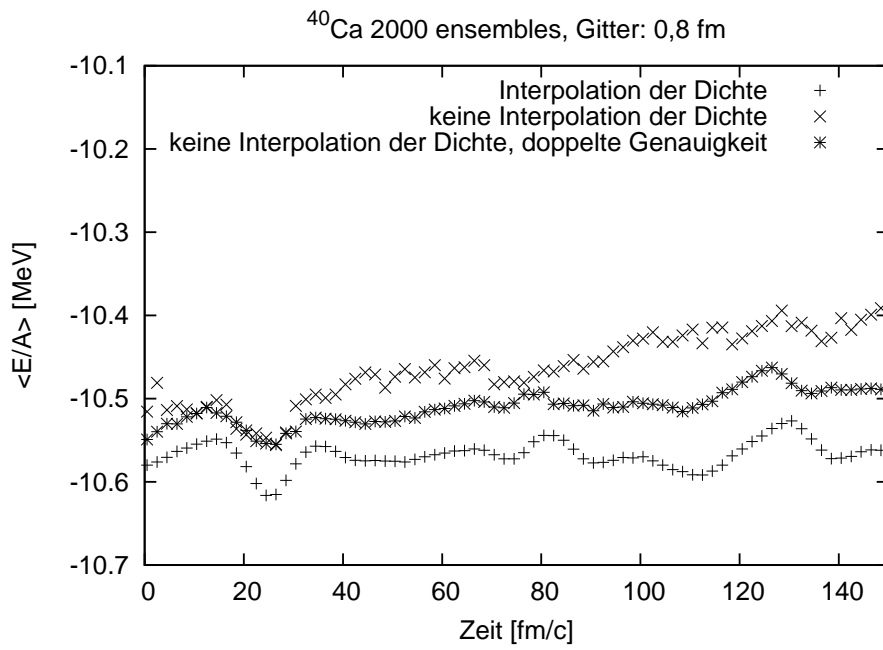


Abbildung 4.14: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Calcium-40 bei 2000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

4.2.2 Stabilität

In diesem Abschnitt werden wir die Ergebnisse der Berechnungen mit dem Brueckner-Potential untereinander und mit der normalerweise verwendeten Methode für Streuexperimente vergleichen. Für das Bruecknermodell ist der berechnete Wert aus der Lösung der Differentialgleichung für den rms-Radius 3,33 fm. Im Fall der 200 Ensembles, siehe Abbildung 4.15, überlagert sich die Oszillation der beobachteten Größe $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ mit einer Ausdehnung des Kerns. Ab 500 Ensembles, siehe Abbildung 4.16, ist der Kern stabil. Dies ist eine Verbesserung gegenüber der Berechnung für Sauerstoff-16, wo der Kern bei 500 Ensembles, siehe Abbildung 4.6, noch nicht stabil ist. Durch die Verwendung von mehr Ensembles, siehe Abbildungen 4.17 und 4.18, verringern sich die Oszillationen. Wenn wir uns die Ergebnisse für das Welke-Potential mit der Woods-Saxon-Initialisierung ansehen, so stellen wir fest, daß die zusätzliche Verwendung eines Yukawa-Terms, siehe Abbildung 4.20, die Expansion des Kerns gegenüber dem normalen Welke-Potential, vgl. Abbildung 4.19, verringert. Es sind aber bei beiden Berechnungen die Oszillationen größer als bei unserem Modell. Weiterhin sind sie, unabhängig von der Anzahl der Ensembles, nicht stabil.

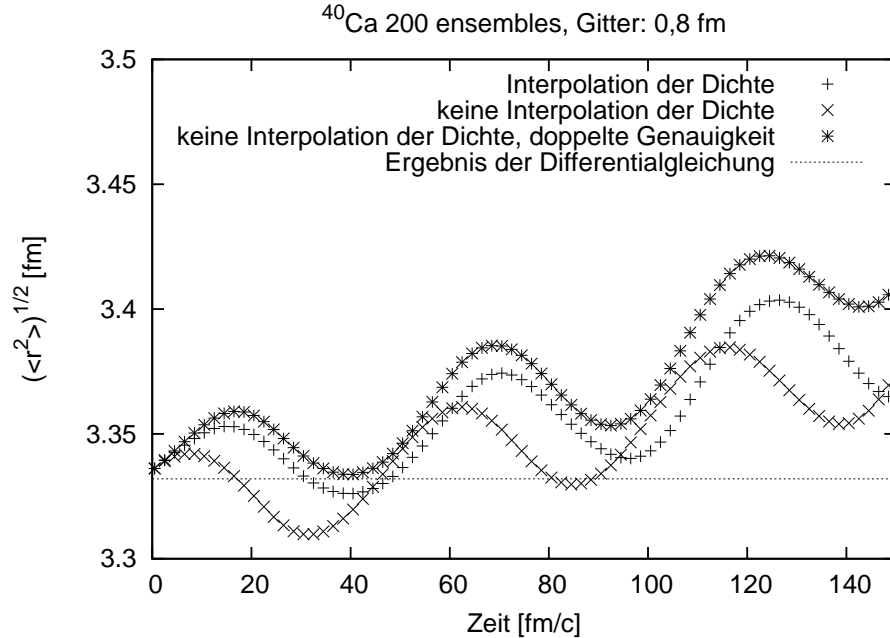


Abbildung 4.15: Der rms-Radius von Calcium-40 bei 200 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

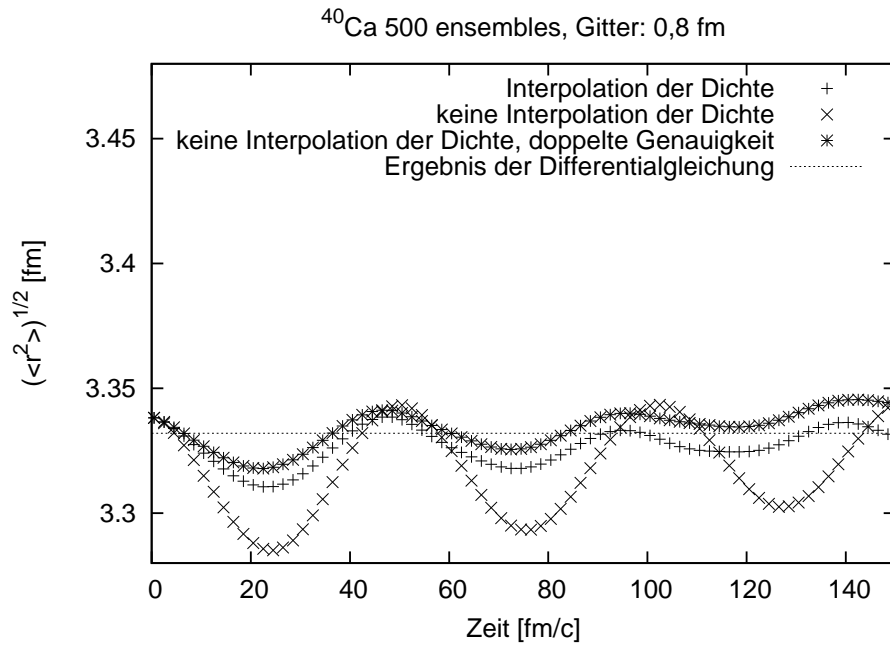


Abbildung 4.16: Der rms-Radius von Calcium-40 bei 500 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

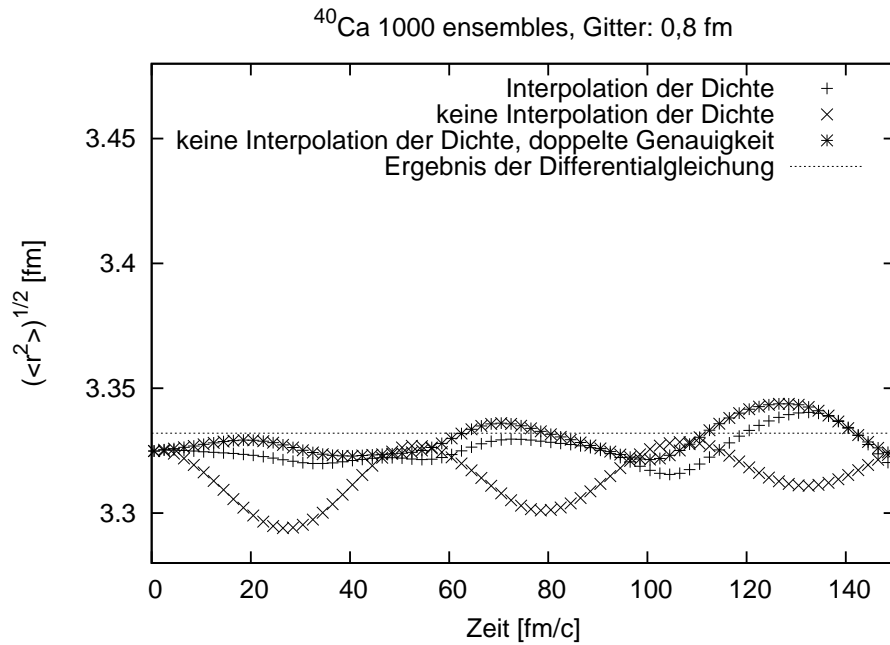


Abbildung 4.17: Der rms-Radius von Calcium-40 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

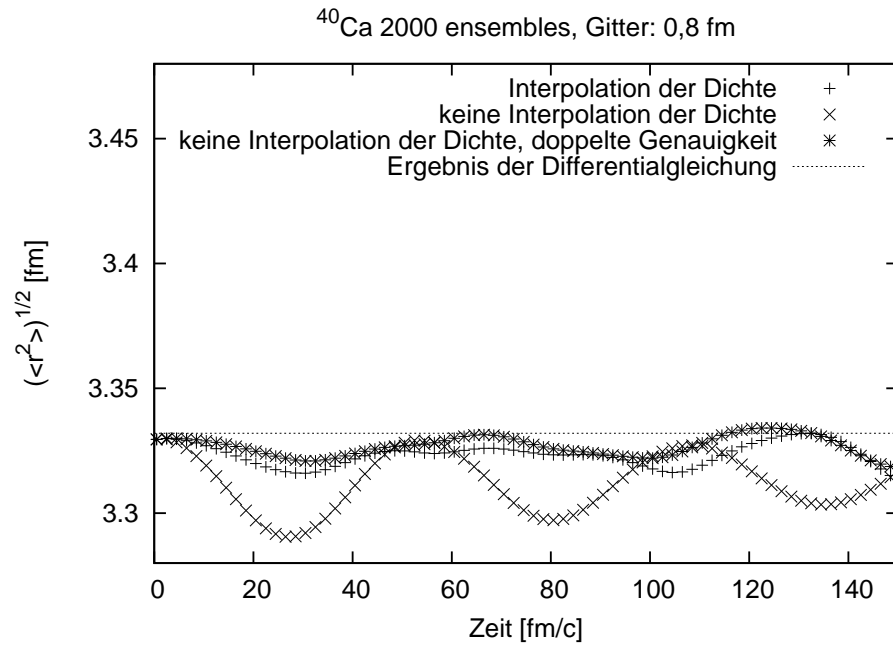


Abbildung 4.18: Der rms-Radius von Calcium-40 bei 2000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

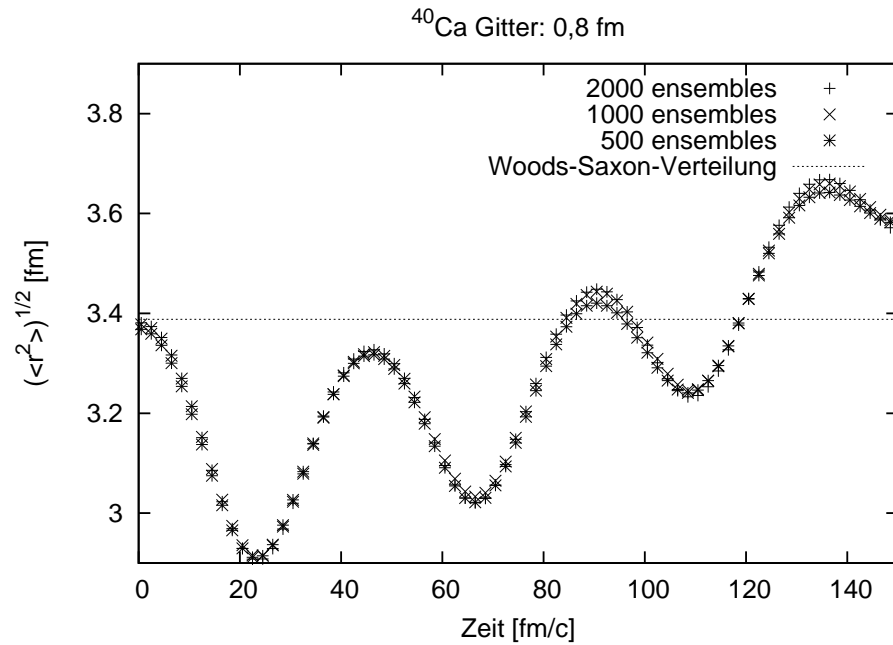


Abbildung 4.19: Der rms-Radius von Calcium-40 bei Verwendung des Wellen-Potentials, der Woods-Saxon-Verteilung und einem Gitterabstand von 0,8 fm

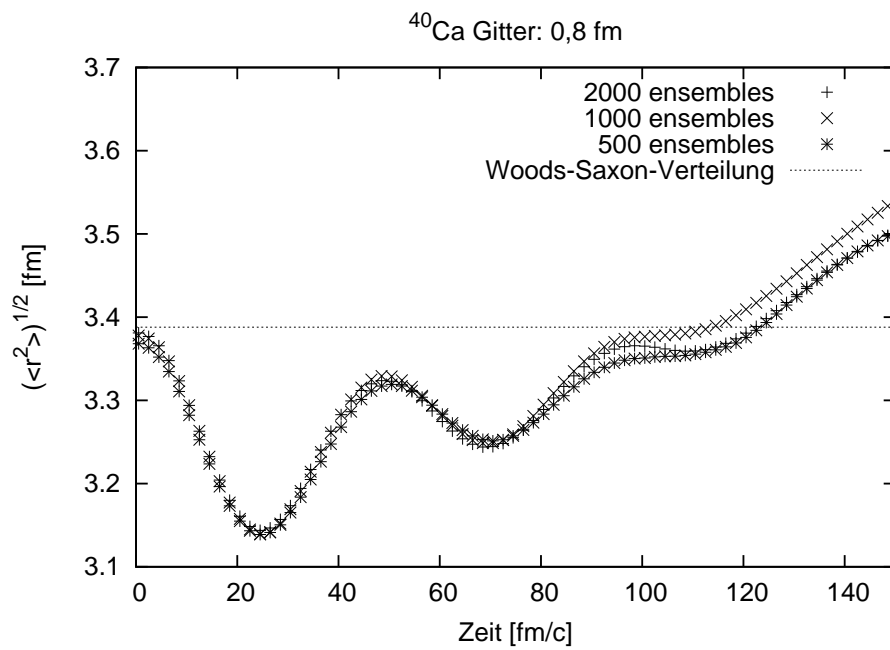


Abbildung 4.20: Der rms-Radius von Calcium-40 bei Verwendung des Welke-Potentials mit Yukawa-Term, der Woods-Saxon-Verteilung und einem Gitterabstand von 0,8 fm

4.2.3 Andere Initialisierung

Am Beispiel von Calcium-40 werden wir eine andere Art der Initialisierung der Nukleonen betrachten. Hierfür fordern wir bei der Initialisierung, daß der Anteil eines Nukleons an der Gesamtenergie kleiner oder gleich Null sein soll. Dies resultiert, wie wir in Abbildung 4.21 sehen können, in einem etwas stärker gebundenen Kern. Außerdem ist der rms-Radius etwas geringer, siehe Abbildung 4.22. Dies deutet darauf hin, daß die geringere Energie zu einer etwas kleineren Ausdehnung des Kerns führt. Die Werte zur Stabilität finden sich in Tabelle 4.5. Im Vergleich zu den Werten in Tabelle 4.4 zeigt sich keine signifikante Verbesserung der Stabilität.

Dichteberechnung	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standard- abweichung des rms-Radius [fm]	Anfangs- wert der Energie [MeV]	Maximale Differenz [MeV]
Interpolation	3,316	0,005	-10,684	0,064
nächster Punkt	3,304	0,013	-10,645	0,159
doppeltes Gitter	3,319	0,005	-10,701	0,117

Tabelle 4.5: In dieser Tabelle befinden sich der über die Zeit gemittelte rms-Radius und dessen Standardabweichung. Als Maß für die Energieerhaltung sind hier der Anfangswert der Energie und die maximale Abweichung von diesem Wert im Verlauf der Simulation angegeben. Für die Berechnungen wurden 1000 Ensembles und ein Gitterabstand von 0,8 fm verwendet.

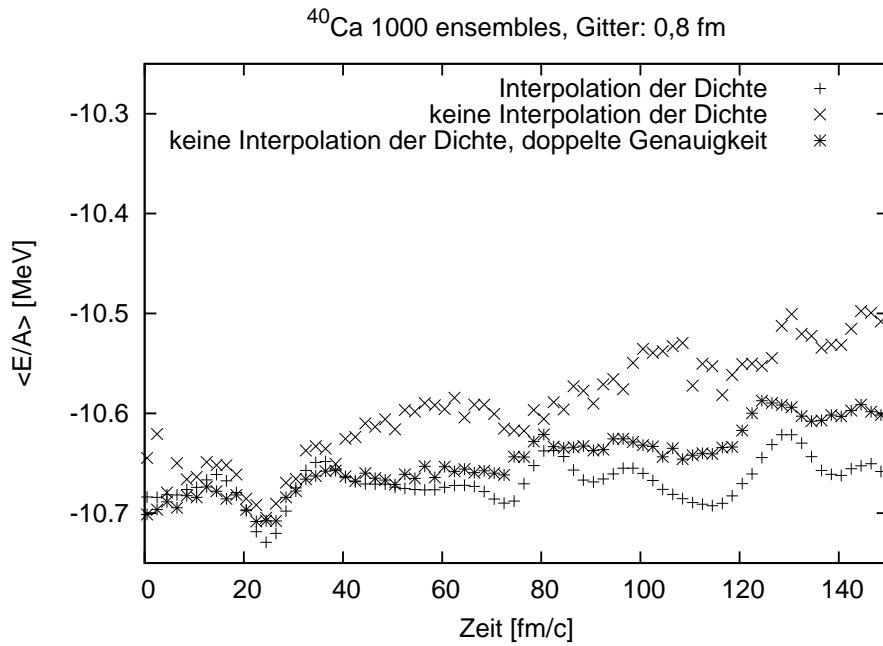


Abbildung 4.21: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Calcium-40 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm mit neuer Initialisierung

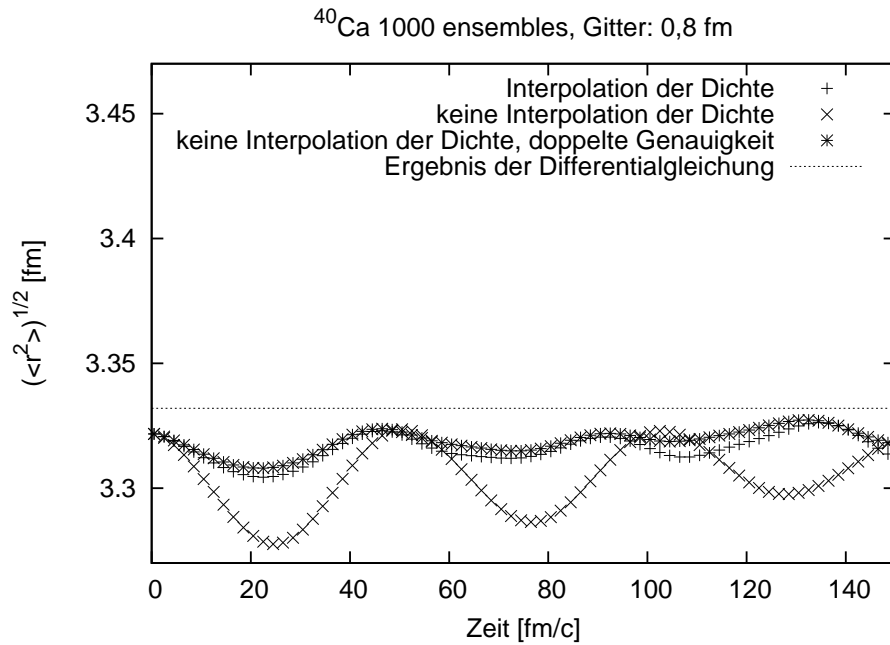


Abbildung 4.22: Der rms-Radius von Calcium-40 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm mit neuer Initialisierung

4.3 Blei-208

4.3.1 Energieerhaltung

Die mittlere Bindungsenergie pro Nukleon für einen Kern der Massenzahl 208 beträgt nach dem verwendeten Energie-Dichte-Funktional $-12,78$ MeV. Für diese Berechnung wurde die Dichteverteilung, die wir als Lösung der Differentialgleichung erhalten, in Gleichung (3.8) eingesetzt und das Energie-Dichte-Funktional aus Gleichung (2.13) verwendet. Wir bestimmen die Energie während der Simulation wie in Gleichung (3.7) beschrieben. Die Energieerhaltung verbessert sich kaum bei Verwendung der Interpolationsmethode mit zunehmender Anzahl von Ensembles, siehe Abbildungen 4.23 bis 4.26. Dies ist nur bei den schnelleren Methoden der Fall, hier gibt es sichtbare Verbesserungen, wenn die Anzahl der verwendeten Ensembles erhöht wird. Die Laufzeiten in Tabelle 4.7 sind mit den Laufzeiten für die anderen Kerne wegen des größeren Gitters nicht vergleichbar.

Es tritt hier wie bei Sauerstoff-16 und Calcium-40 wieder eine leichte Überbindung auf. Eine Untersuchung dieses Ergebnisses legt die gleichen Schlüsse nahe, siehe Tabelle 4.6. Auch hier ist die Überbindung auf einen zu kleinen Gradiententerm und somit die Gitterungenauigkeit zurückzuführen. Die Berechnung der Energie pro Nukleon zur Zeit $t=0$ als Integral über die erzeugte Dichteverteilung (siehe Gleichungen (3.8) und (2.13)) ergibt für 2000 Ensembles und einen Gitterabstand von $0,8$ fm einen Wert von $-11,90$ MeV. Bei 8000 Ensembles und einem Gitterabstand von $0,4$ fm ist das Ergebnis $-12,52$ MeV.

	Energie pro Nukleon	kinetische Energie	„potentielle“ Energie	Gradiententerm
Differentialgleichung	-12,78	18,3	-32,64	1,56
GiBUU-Initialisierung (2000 Ensembles, Gitter 0,8 fm)	-12,89	17,66	-31,74	1,18
GiBUU-Initialisierung (8000 Ensembles, Gitter 0,4 fm)	-12,75	18,19	-32,45	1,52

Tabelle 4.6: Vergleich der Energie pro Nukleon für Blei-208, aufgeschlüsselt in die verschiedenen Anteile des Energie-Dichte-Funktional, siehe Gleichung (2.13). Alle Energien sind in MeV angegeben, bei der Initialisierung wurde die Interpolationsmethode verwendet. Die Energien der GiBUU-Initialisierung wurden wie in Gleichung (3.7) beschrieben berechnet.

Anzahl Ensembles	Dichteberechnung	Laufzeit [h:min]	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standardabweichung des rms-Radius [fm]	Anfangswert der Energie [MeV]	Maximale Differenz [MeV]
200	Interpolation	15:54	5,531	0,034	-12,861	0,136
	nächster Punkt	2:25	5,509	0,016	-12,795	0,289
	doppeltes Gitter	5:33	5,534	0,028	-12,781	0,489
500	Interpolation	39:38	5,527	0,037	-12,846	0,111
	nächster Punkt	5:56	5,503	0,019	-12,794	0,192
	doppeltes Gitter	13:48	5,520	0,029	-12,793	0,214
1000	Interpolation	77:46	5,522	0,035	-12,874	0,096
	nächster Punkt	11:27	5,498	0,017	-12,825	0,139
	doppeltes Gitter	27:39	5,514	0,028	-12,836	0,140
2000	Interpolation	154:03	5,521	0,036	-12,892	0,091
	nächster Punkt	23:01	5,496	0,018	-12,848	0,124
	doppeltes Gitter	54:31	5,512	0,029	-12,859	0,100
Welke-Potential mit Woods-Saxon Dichteverteilung						
Anzahl Ensembles	Yukawa	Laufzeit [h:min]	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standardabweichung des rms-Radius [fm]		
500	nein	13:05	5,341	0,198		
	ja	13:16	5,409	0,108		
1000	nein	26:11	5,337	0,200		
	ja	26:31	5,408	0,109		
2000	nein	53:32	5,336	0,199		
	ja	53:22	5,404	0,111		

Tabelle 4.7: In dieser Tabelle befinden sich die Dauer der Berechnungen bei Blei-208 bei einem Gitterabstand von 0,8 fm sowie der über die Zeit gemittelte rms-Radius und dessen Standardabweichung. Als Maß für die Energieerhaltung sind hier der Anfangswert der Energie und die maximale Abweichung von diesem Wert im Verlauf der Simulation angegeben.

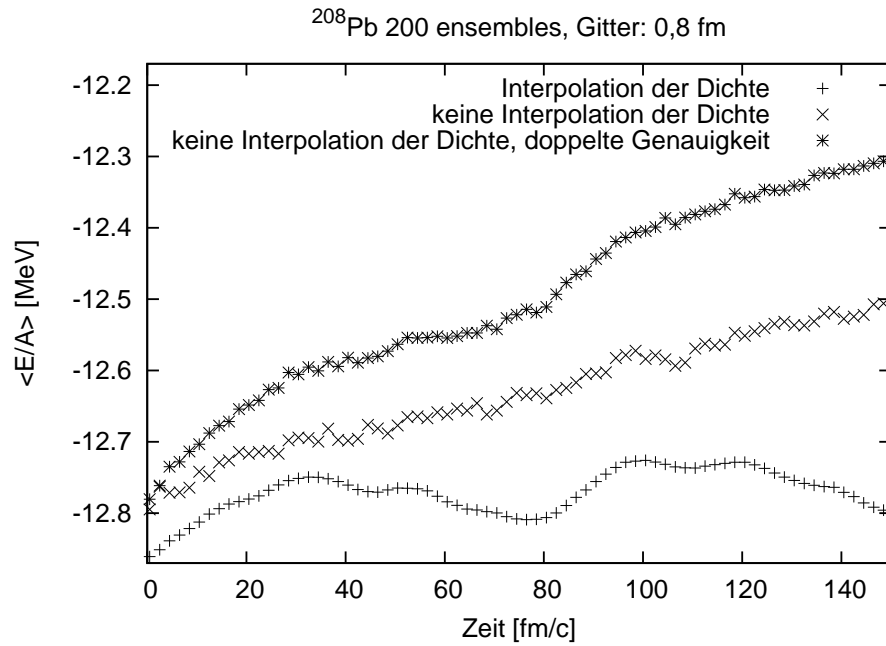


Abbildung 4.23: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Blei-208 bei 200 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

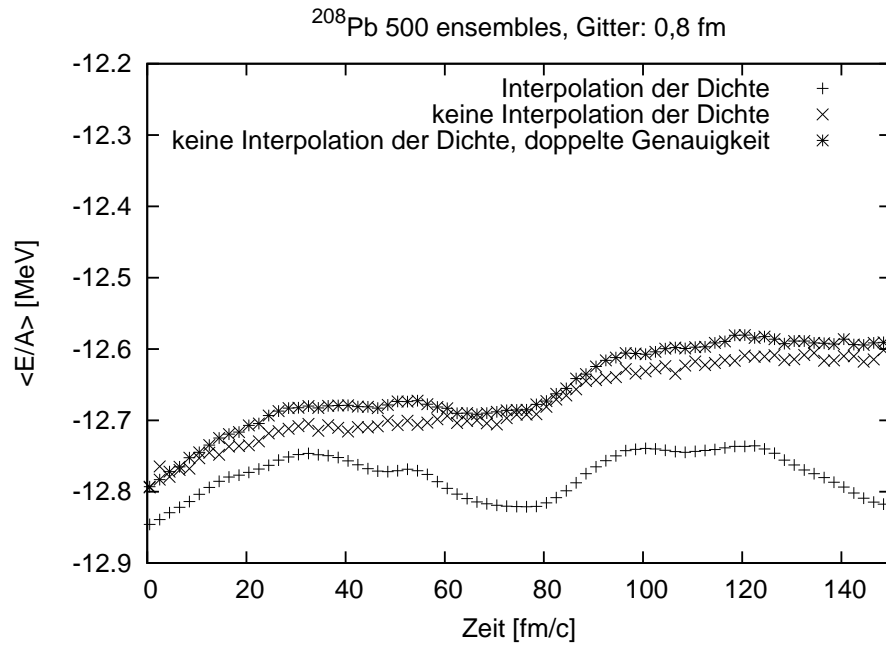


Abbildung 4.24: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Blei-208 bei 500 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

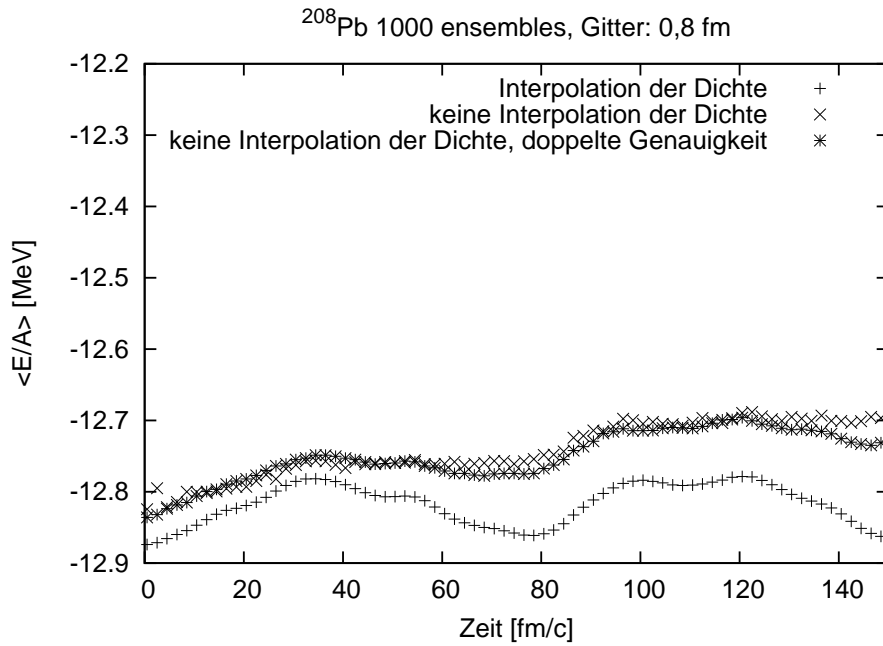


Abbildung 4.25: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Blei-208 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

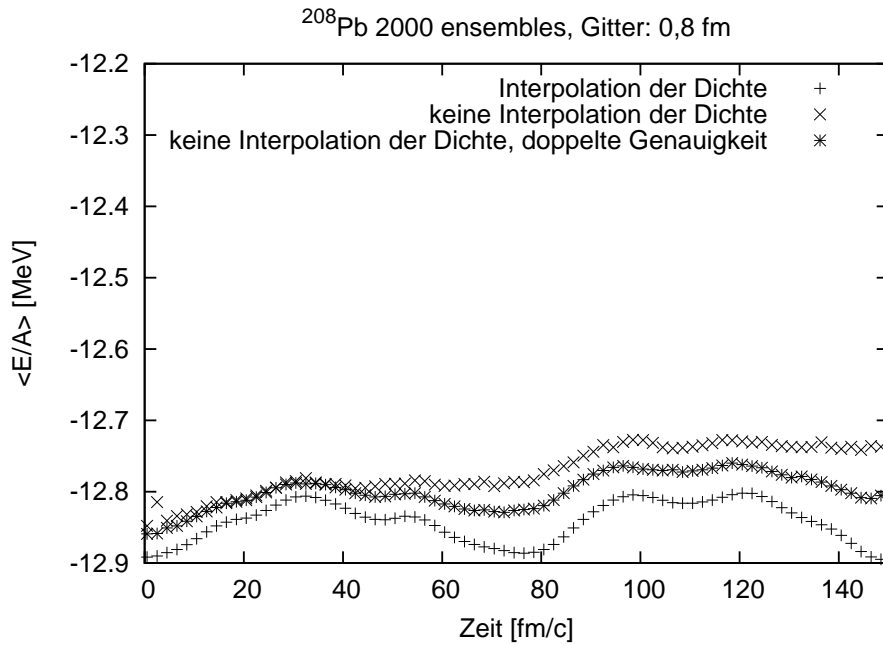


Abbildung 4.26: Die Entwicklung der Gesamtenergie von Blei-208 bei 2000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

4.3.2 Stabilität

Für diesen schweren Kern sind, im Gegensatz zu den leichteren Kernen, alle Simulationen der Kerne stabil, siehe Abbildungen 4.27, 4.28, 4.29 und 4.30. Weiterhin zeigen die Oszillationen keine Abhängigkeit von der Anzahl der Ensembles. Nur die verschiedenen Möglichkeiten zur Dichtebestimmung beeinflussen die Amplitude der Oszillation. Hier ist erstaunlicherweise die Interpolationsmethode die mit den größten Oszillationen. Der Wert des rms-Radius bei ruhendem Kern ist 5,48 fm. Auch die Simulationen mit Woods-Saxon-Initialisierung und dem Welke-Potential, siehe Abbildungen 4.31 und 4.32, sind stabil.

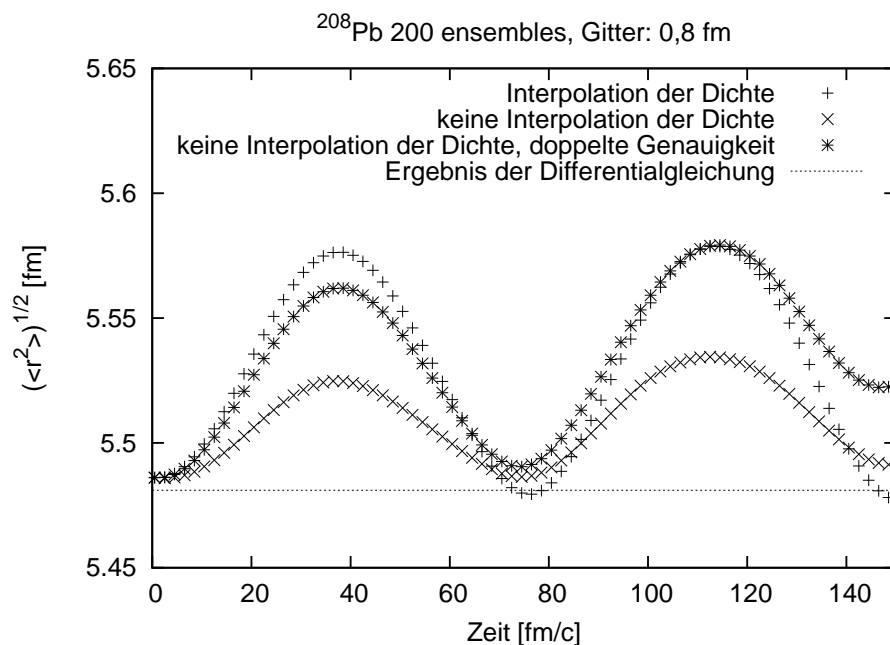


Abbildung 4.27: Der rms-Radius von Blei-208 bei 200 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

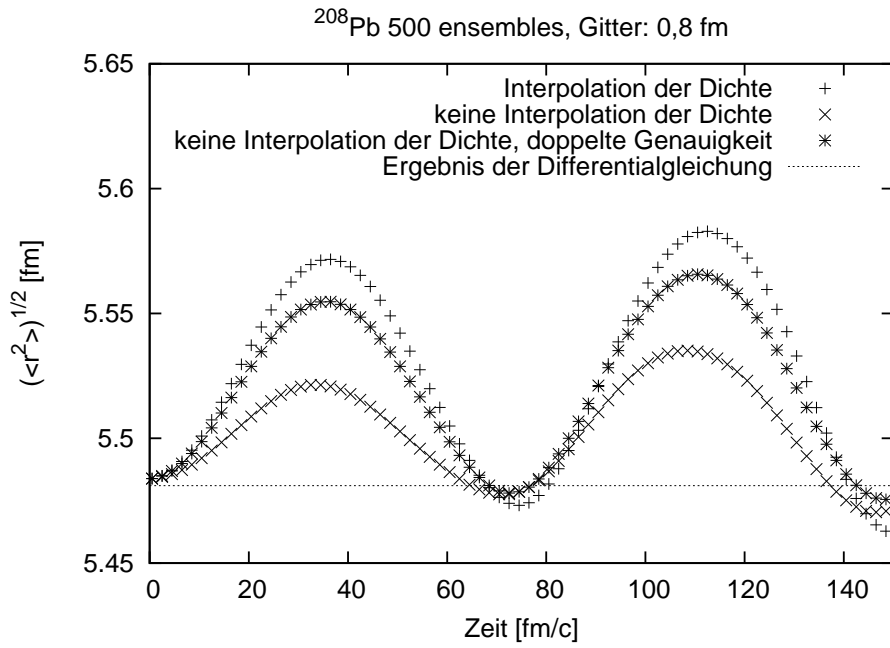


Abbildung 4.28: Der rms-Radius von Blei-208 bei 500 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

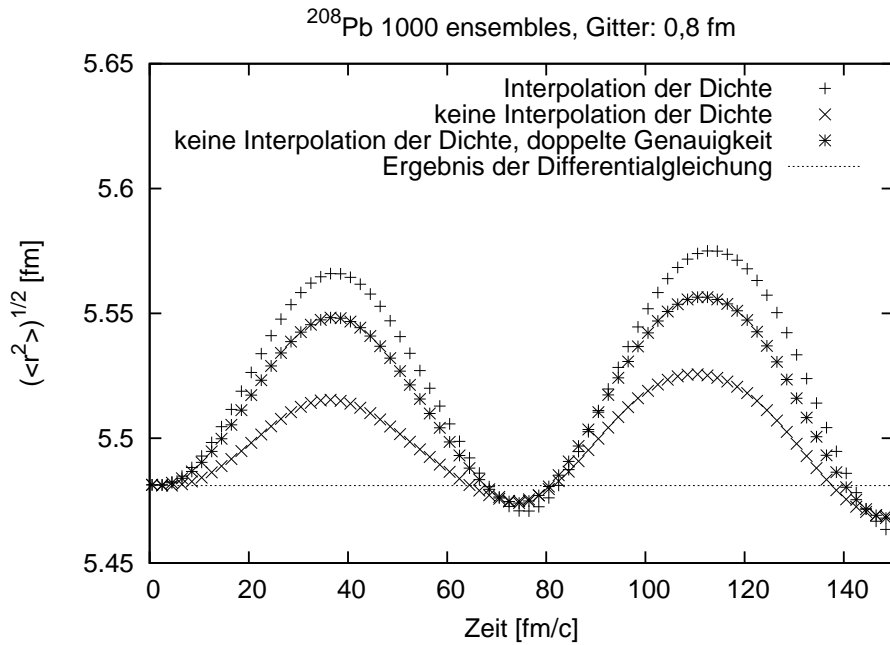


Abbildung 4.29: Der rms-Radius von Blei-208 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

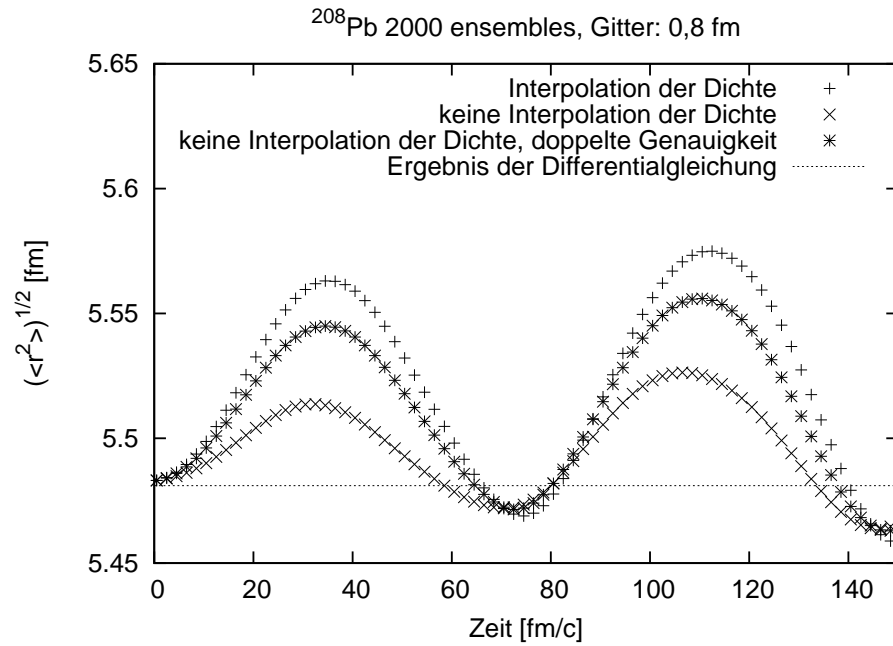


Abbildung 4.30: Der rms-Radius von Blei-208 bei 2000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm

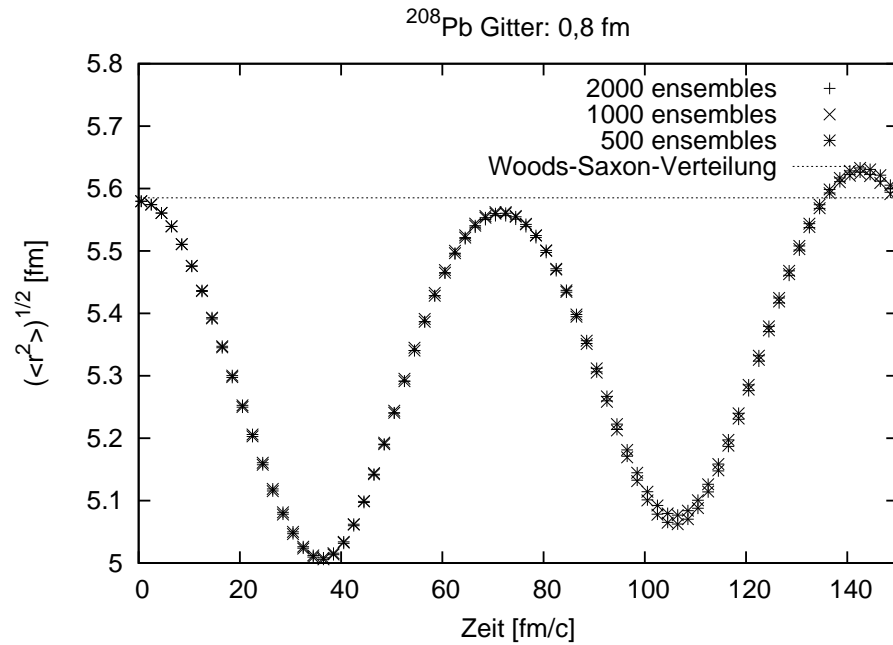


Abbildung 4.31: Der rms-Radius von Blei-208 bei Verwendung des Wellen-Potentials, der Woods-Saxon-Verteilung und einem Gitterabstand von 0,8 fm

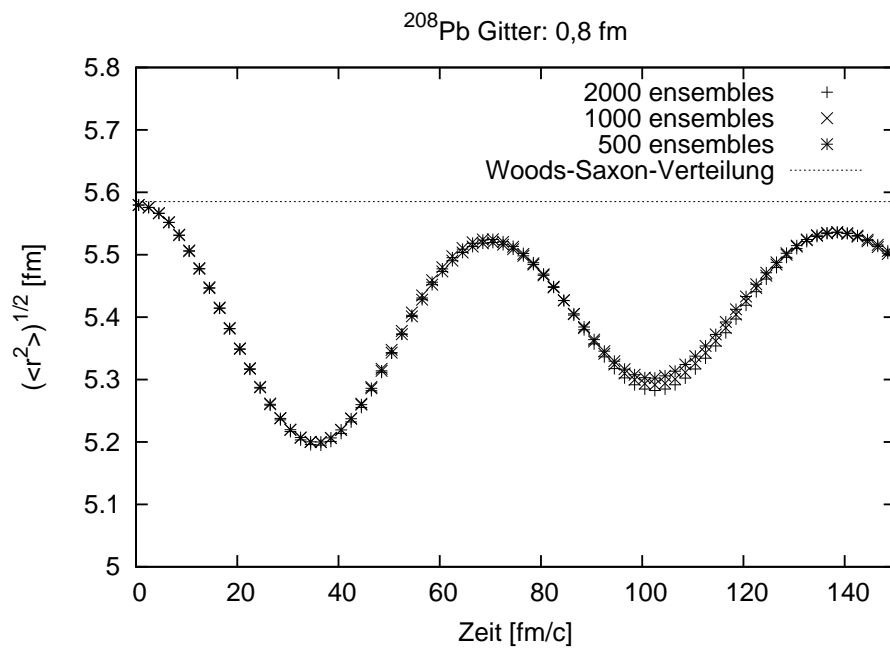


Abbildung 4.32: Der rms-Radius von Blei-208 bei Verwendung des Welke-Potential mit Yukawa-Term, der Woods-Saxon-Verteilung und einem Gitterabstand von 0,8 fm

Kapitel 5

Impulsabhängiges Potential

Die Beschreibung des Kerns, wie wir sie bis jetzt hergeleitet und verwendet haben, liefert gute Resultate für die Dichteverteilung und auch einen stabilen Kern, wenn er im GiBUU-Code zeitlich propagiert wird. Aber es hat sich gezeigt, daß ein impulsabhängiges Kernpotential bessere Resultate bei Streuexperimenten liefert als ein impulsunabhängiges, siehe beispielsweise [BLMAR07]. Hinter diesem Potential steckt die folgende Idee: wenn zwei Teilchen miteinander wechselwirken, so spüren sie ein schwächeres Potential, je stärker sich ihre Impulse voneinander unterscheiden.

Die Parametrisierung wurde von Welke et al. in [WPK⁺88] beschrieben. Wir verwenden, um mit unserer bisherigen Rechnung in Einklang zu bleiben, als Grundlage wieder das Energie-Dichte-Funktional von Brueckner aus [BBJL68].

$$\begin{aligned} \epsilon[f] = & \frac{1}{A} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2M_N} f(\vec{r}, \vec{p}) + b_1 \rho(\vec{r})^2 + b_2 \rho(\vec{r})^{7/3} + b_3 \rho(\vec{r})^{8/3} \\ & + a(\vec{\nabla} \rho(\vec{r}))^2 + \frac{C}{\rho_0} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \frac{\lambda^2 f(\vec{r}, \vec{p}')}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2}, \end{aligned} \quad (5.1)$$

wobei

$$A = \int d^3r \rho(\vec{r}) \quad (5.2)$$

und es gilt wieder

$$\rho(\vec{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}). \quad (5.3)$$

Die Werte $\lambda = 2,13 \text{ fm}^{-1}$ und $C = -63,6 \text{ MeV}$ wurden aus [Eff01] übernommen. Hier führen wir, da wir erst einmal keine Annahme über die Phasenraumdichte machen wollen, eine Funktionalableitung der Gesamtenergie

nach f durch. Die Ableitung der einzelnen Terme wird in Anhang A.2 exakt durchgeführt. Das Ergebnis der Funktionalableitung ist

$$(2\pi)^3 \frac{\delta E[f(\vec{x}, \vec{q})]}{\delta f(\vec{r}, \vec{p})} = \frac{2C}{\rho_0} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{\lambda^2 f(\vec{r}, \vec{p}')}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2} + \frac{p^2}{2M_N} + 2b_1 \rho(\vec{r}) + \frac{7}{3} b_2 \rho(\vec{r})^{4/3} + \frac{8}{3} b_3 \rho(\vec{r})^{5/3} - 2a \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) - \lambda_0. \quad (5.4)$$

Leider ist die Lösung dieser Gleichung zu kompliziert, so daß wir eine einfachere Verfahrensweise wählen. Diese besteht darin, daß wir die Integrale in Gleichung (5.1) mit der Annahme

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = 4\Theta(p_F(r) - p) \quad (5.5)$$

berechnen. Weiterhin müssen wir fordern, daß $\lambda > p_F$ gilt, da wir sonst das sechsfache Impulsintegral nicht ausführen können. Bei einem Wert von $\lambda = 2,13 \text{ fm}^{-1}$, wie wir ihn verwenden, entspräche dieser Fermiimpuls einer Dichte von $0,65 \text{ fm}^{-3}$, wie wir sie nie erreichen werden. Damit ergibt sich für das Energie-Dichte-Funktional

$$\epsilon[\rho] = c_k \rho^{5/3} + b_1 \rho^2 + b_2 \rho^{7/3} + b_3 \rho^{8/3} + a(\nabla \rho)^2 + \frac{C\lambda^3 \rho}{2\pi^2 \rho_0} \left[\frac{3p_F}{\lambda} - \frac{\lambda}{2p_F} + \frac{1}{8} \left(\frac{12\lambda}{p_F} + \frac{\lambda^3}{p_F^3} \right) \cdot \ln \left(\frac{\lambda^2 + 4p_F^2}{\lambda^2} \right) - 4 \cdot \arctan \left(\frac{2p_F}{\lambda} \right) \right]. \quad (5.6)$$

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird p_F nicht durch

$$p_F = \left(\frac{3\pi^2}{2} \rho \right)^{1/3} \quad (5.7)$$

ersetzt. Wir haben jetzt wieder ein Energie-Dichte-Funktional, mit dem wir wie in dem nicht impulsabhängigen Fall verfahren können. Es verwundert nicht, daß wir auf eine sehr ähnliche Dichteverteilung kommen, da wir dieselben Randbedingungen fordern. In Abbildung 5.1 sehen wir, daß der Verlauf des Potentials im interessanten Bereich bis $0,17 \text{ fm}^{-3}$ keinen großen Unterschied zeigt. Wie die restlichen Parameter im Vergleich zum normalen

	b_3	η	b_1	b_2
mit Welketerm	$2,4 \text{ fm}^4$	$12,8 \text{ fm}^3$	$-0,56 \text{ fm}^2$	$0,33 \text{ fm}^3$
ohne Welketerm	$2,1 \text{ fm}^4$	$12,8 \text{ fm}^3$	$-2,98 \text{ fm}^2$	$2,14 \text{ fm}^3$

Tabelle 5.1: Die Parameter des Bruecknerteils des Energie-Dichte-Funktional mit Impulsanteil, wobei b_1 und b_2 von b_3 abhängen

Bruecknerpotential gewählt werden, ist in Tabelle 5.1 zu sehen. Die Kompressibilität beträgt 265 MeV, was etwas weniger als der impulsunabhängige Wert von 267 MeV ist. Dieser geringe Unterschied ist vernachlässigbar und führt dazu, daß die Dichteverteilungen, die wir berechnen, sich sehr stark ähneln, siehe Abbildung 5.2. Wir wollen jetzt noch die Einteilchenenergie für dieses Energie-Dichte-Funktional betrachten. Wie schon in Abschnitt 3.1 berechnen wir sie nichtrelativistisch mit der Beziehung

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = (2\pi)^3 \frac{\delta E}{\delta f(\vec{r}, \vec{p})} . \quad (5.8)$$

Das Ergebnis dieser Berechnung ist

$$\begin{aligned} H(\vec{r}, \vec{p}) = & \frac{p^2}{2M_N} + \frac{2C}{\rho_0} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{\lambda^2 f(\vec{r}, \vec{p}')}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2} + 2b_1 \rho(\vec{r}) \\ & + \frac{7}{3} b_2 \rho(\vec{r})^{4/3} + \frac{8}{3} b_3 \rho(\vec{r})^{5/3} - 2a \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Die Funktionalableitungen der einzelnen Terme sind in Appendix A.2 zu finden. Relativistisch hat die Einteilchenenergie die Form

$$\begin{aligned} H(\vec{r}, \vec{p}) = & \sqrt{M_N^2 + \vec{p}^2} + \frac{2C}{\rho_0} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{\lambda^2 f(\vec{r}, \vec{p}')}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2} \\ & + 2b_1 \rho(\vec{r}) + \frac{7}{3} b_2 \rho(\vec{r})^{4/3} + \frac{8}{3} b_3 \rho(\vec{r})^{5/3} - 2a \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) , \end{aligned} \quad (5.10)$$

die wir zur Propagation des Kernels in der BUU-Gleichung, siehe Gleichung (3.1), verwenden. Das Integral über die Phasenraumdichte in Gleichung (5.10) wird mithilfe der angenommenen Phasenraumverteilung, siehe Gleichung (5.5), ausgerechnet.

5.1 Vergleich der Simulationen

Wir haben die Dichteverteilung und die Einteilchenenergie für die Erweiterung des Brueckner-Modells um einen impulsabhängigen Anteil bestimmt. Damit wollen wir überprüfen, ob ein Kern, der so initialisiert und propagiert wird, auch stabil ist und wie das Ergebnis im Vergleich zu den bisherigen Simulationen ist. Im letzten Kapitel haben wir gesehen, daß die Kerne von Sauerstoff-16 und Calcium-40 für das bisher im GiBUU-Code verwendete Potential nicht stabil sind, dies aber für den Fall des schweren Blei-208 sind. Wir werden uns nicht noch einmal die möglichen Kombinationen aus Anzahl der Ensembles und Methoden der Dichteberechnung ansehen, sondern uns

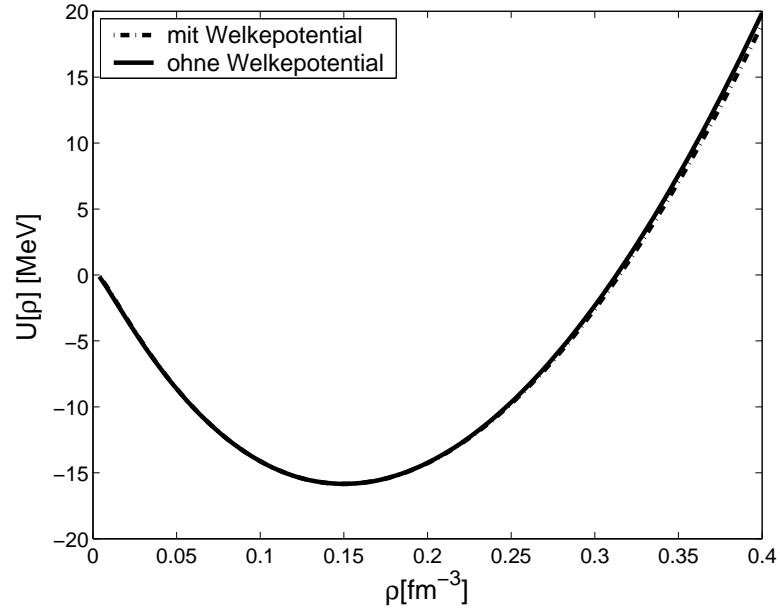


Abbildung 5.1: Vergleich der Energie pro Nukleon bei konstanter Dichte in Abhängigkeit von der Dichte für das Brueckner-Potential mit und ohne impulsabhängigen Anteil

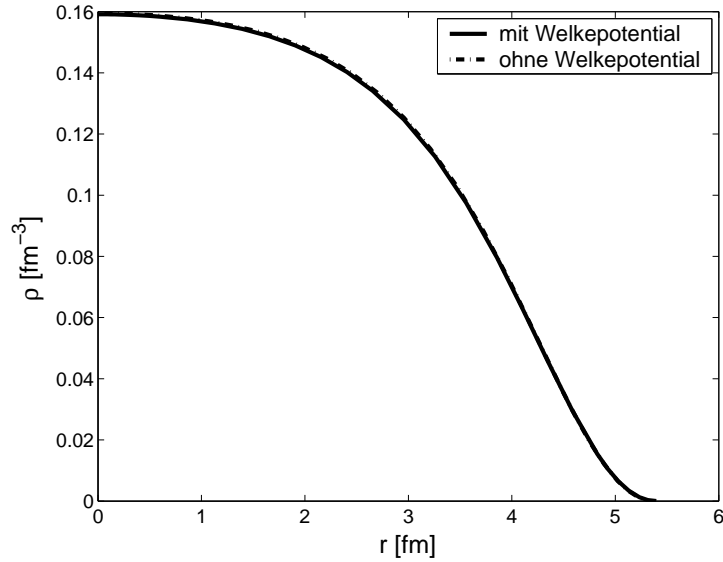


Abbildung 5.2: Vergleich der Dichteverteilungen von Calcium-40 für das Brueckner-Potential mit und ohne impulsabhängigen Anteil

auf einige wenige Beispiele beschränken. Für 1000 Ensembles ist der Kern im Brueckner-Modell stabil und die Oszillationen sind gering, so daß wir uns für diese Anzahl von Ensembles entscheiden.

Wie wir in den Abbildungen 5.4 und 5.6 sehen können, ist der Kern auch bei Verwendung des impulsabhängigen Potentials stabil. Die Werte zur Stabilität finden sich in Tabelle 5.2. Leider sind die Oszillationen deutlich größer als bei Verwendung des impulsunabhängigen Potentials, siehe zum Vergleich die Abbildungen 5.3 und 5.5. Dies liegt vermutlich an den Vereinfachungen, die wir zur Berechnung der Dichteverteilungen durchgeführt haben. Eine realistischere Phasenraumverteilung könnte hier Abhilfe schaffen. Dies hätte Auswirkungen auf die Einteilchenenergie, siehe Gleichung (5.10), und die Minimierung der Energie, die auf dem Energie-Dichte-Funktional, siehe Gleichung (5.1), beruht. Eine genauere Betrachtung dieses Problems wäre interessant, würde aber den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Kern	Welke	Dichteberechnung	Mittelwert des rms-Radius [fm]	Standard- abweichung des rms-Radius [fm]
O-16	nein	Interpolation	2,575	0,024
		keine Interpolation	2,571	0,030
		doppeltes Gitter	2,585	0,021
O-16	ja	Interpolation	2,767	0,095
		keine Interpolation	2,767	0,091
		doppeltes Gitter	2,778	0,097
Ca-40	nein	Interpolation	3,326	0,006
		keine Interpolation	3,314	0,010
		doppeltes Gitter	3,330	0,006
Ca-40	ja	Interpolation	3,547	0,146
		keine Interpolation	3,535	0,134
		doppeltes Gitter	3,554	0,143

Tabelle 5.2: In dieser Tabelle befinden sich der über die Zeit gemittelte rms-Radius und dessen Standardabweichung. Für die Berechnungen wurden 1000 Ensembles und ein Gitterabstand von 0,8 fm verwendet

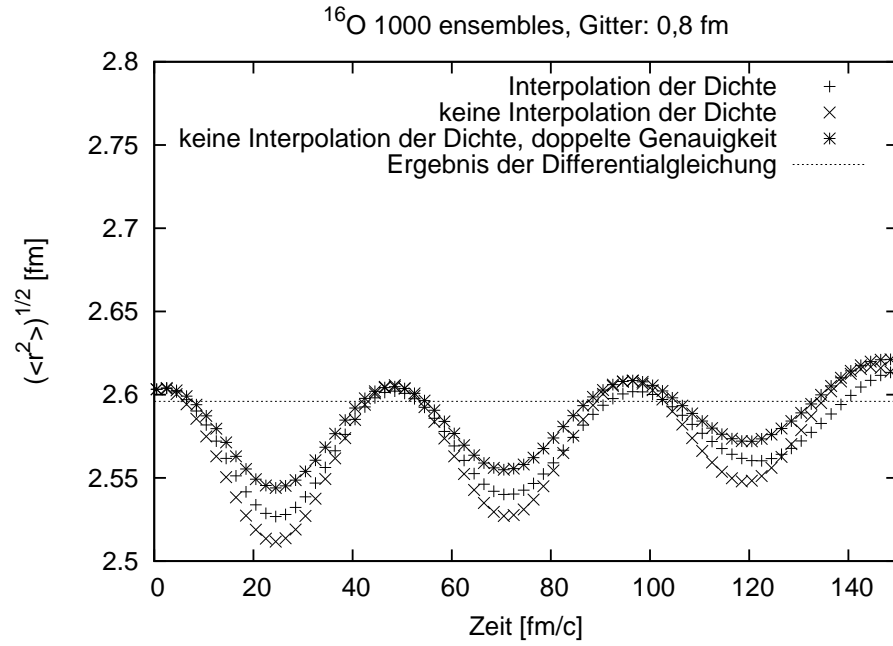


Abbildung 5.3: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm für das Brueckner-Modell

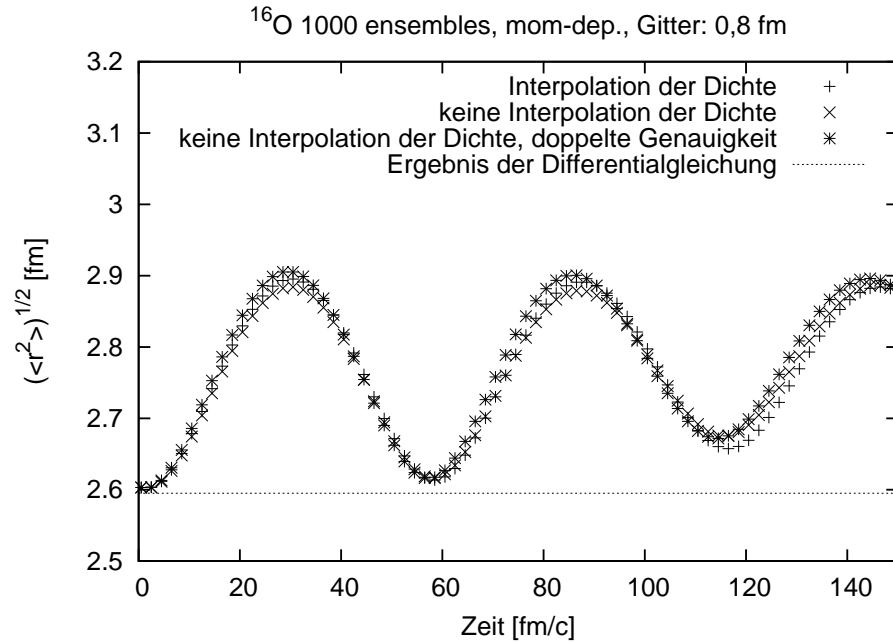


Abbildung 5.4: Der rms-Radius von Sauerstoff-16 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm für das impulsabhängige Brueckner-Modell

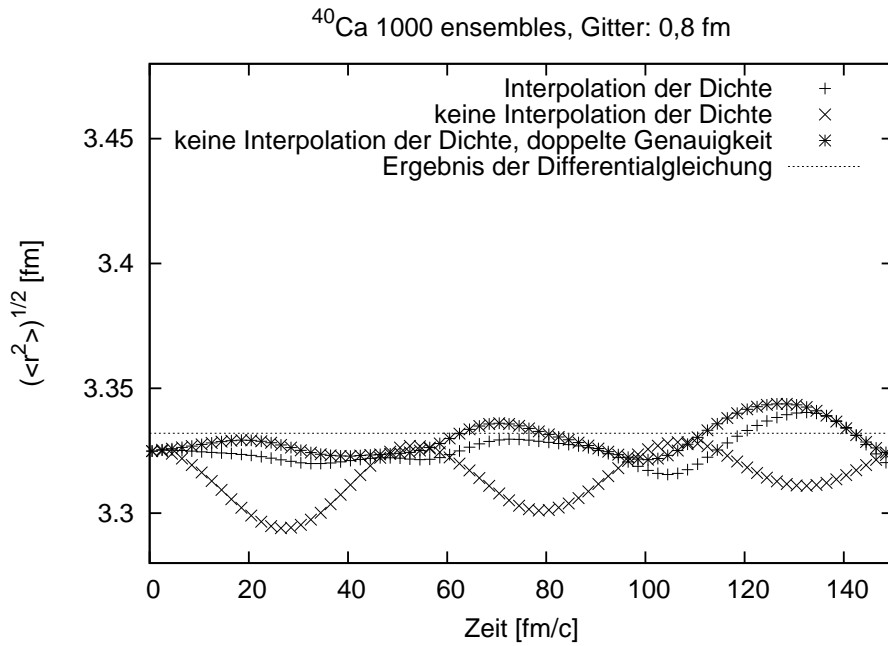


Abbildung 5.5: Der rms-Radius von Calcium-40 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm für das Brueckner-Modell

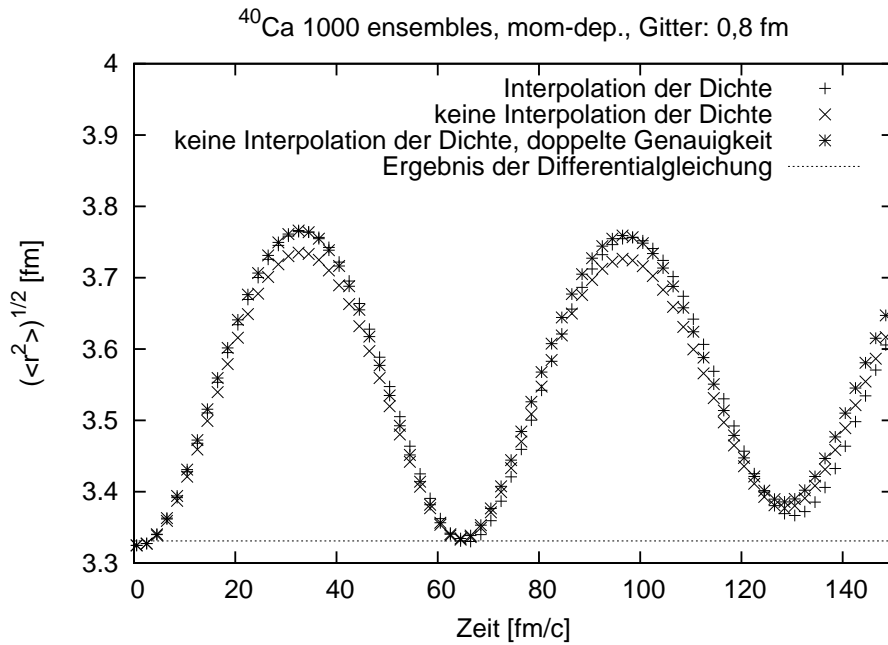


Abbildung 5.6: Der rms-Radius von Calcium-40 bei 1000 Ensembles und einem Gitterabstand von 0,8 fm für das impulsabhängige Brueckner-Modell

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Kernmodell auf seine Verwendbarkeit für den GiBUU-Code untersucht. Der Unterschied dieses Modells zu den bisher im GiBUU-Code implementierten besteht darin, daß das Potential und die Dichteverteilung konsistent sind. Sie werden beide aus einem Energie-Dichte-Funktional hergeleitet, das in [BBJL68] beschrieben wird.

In Kapitel 2 wurde auf die Herleitung des Potentials eingegangen. Das Potential ist nicht sensitiv gegenüber Isospin und elektrischen Ladungen. Die Parameter des Potentials wurden über numerische Berechnungen so angepaßt, daß die Energie der Kerne sehr gut mit der Bethe-Weizsäcker-Formel übereinstimmt. Der Nachteil der lokalen Dichtenäherung ist, daß es keinen exponentiellen Abfall der Dichte gibt, sondern diese an einem Punkt auf Null absinkt. Bis auf diesen Punkt zeigte sich eine Ähnlichkeit der Form der Wahrscheinlichkeitsverteilung zu den anderen im GiBUU-Code implementierten Dichteverteilungen.

In Kapitel 3 wurde auf die technischen Aspekte der Implementierung und des GiBUU-Codes eingegangen. Im Besonderen wurde die Testteilchenmethode vorgestellt, die eine Möglichkeit der Simulierung der Phasenraum-dichte ist. Hier wurde auch beschrieben, wie sich Erwartungswerte im Falle der Testteilchenmethode berechnen lassen.

In Kapitel 4 wurde die Stabilität der simulierten Atomkerne anhand der Beispiele Sauerstoff-16, Calcium-40 und Blei-208 genauer untersucht. Hier wurden verschiedene Methoden der Dichteberechnung und verschiedene Größen der verwendeten Ensembles für das Brueckner-Modell mit dem bisher verwendeten Welke-Potential verglichen, siehe dazu die Arbeit von M. Effenberger [Eff01], basierend auf [WPK⁺88]. Sauerstoff-16 war ab einer Simulation mit 1000 Ensembles stabil, im Gegensatz zu dem Welke-Potential, wo die Oszillation von einer Expansion überlagert wurde. Für eine stabile Simulation von Calcium-40 wurden nur 500 Ensembles in dem neuen Kern-

modell benötigt, während ein stabiler Kern im Welke-Potential unabhängig von der Anzahl der Ensembles nicht möglich war. Im Fall des Blei-208 war der Kern ab einer Verwendung von 200 Ensembles stabil, bei Verwendung des Welke-Potentials war der Kern ebenfalls stabil. Die deutlich verringerte Amplitude der Oszillationen der rms-Radien, bis zu einer Größenordnung, im Vergleich zur Verwendung des Welke-Potentials war bei allen Kernen sichtbar. Der Nachteil des vorgestellten Kernmodells liegt in der um einen Faktor drei höheren Dauer der Grundzustandsberechnungen gegenüber der Verwendung des Welke-Potentials.

In Kapitel 5 wurde versucht, das Brueckner-Modell um einen impulsabhängigen Term zu erweitern. Dies geschah, da ein impulsabhängiges Potential die Ergebnisse von Streuexperimenten besser reproduziert, siehe [BLMAR07]. Die simulierten Kerne waren weiterhin stabil, aber die Amplitude der Oszillation des rms-Radius wurde mindestens dreimal so groß wie bei Verwendung des Brueckner-Modells ohne impulsabhängigen Term. Die Laufzeit änderte sich kaum.

Das impulsunabhängige Potential ist, wie in Kapitel 4 gezeigt, stabil genug. Es wäre in Zukunft interessant, diese Stabilität auch für das impulsabhängige Potential aus Kapitel 5 zu erreichen. Hierfür müßte man die verwendete Phasenraumdichte noch einmal überdenken. So, wie es im Ortsraum eine Oberfläche der Dichteverteilung gibt, müßte dies auch für die Verteilung im Impulsraum eingeführt werden. Ein Ansatz wäre beispielsweise eine Woods-Saxon-Verteilung. Alternativ könnte man auch das Energie-Dichte-Funktional in ein Energie-Phasenraumdichte-Funktional umschreiben, das neben Ableitungen im Ortsraum auch Ableitungen im Impulsraum enthält. Für die Lösung dieses Problems würden dann andere numerische Techniken als die hier vorgestellte benötigt.

Kapitel 7

Danksagung

Als erstem möchte ich Professor Ulrich Mosel danken. Er hatte die Idee zu der Arbeit und ich konnte mich immer an ihn wenden, wenn ich Fragen hatte. Seine Anregungen und Fragestellungen waren eine große Hilfe.

Oliver Buß habe ich für vieles zu danken, ich hoffe, ich lasse hier nichts aus. Er hat mir gezeigt, wie ich mit dem GiBUU-Code arbeiten kann und sein Wissen darüber hat mir die Arbeit sehr erleichtert. Daneben hat er als Administrator zusammen mit Frank Frömel (und seit neuestem Fabian Eichstädt) dafür gesorgt, daß die Rechner keine merkbaren Ausfallzeiten hatten. Ich möchte Oliver auch dafür danken, daß er mich bei der Konzeption der Arbeit unterstützt hat und diese gegengelesen hat.

Alexei Larionov möchte ich für die Gespräche über die Art und den Lösungsweg meiner Aufgabe danken. Sie haben mich zum Nachdenken angeregt und weitergebracht.

Theo Gaitanos hat mich dazu gebracht, daß ich die Grenzen der Stabilität der Kerne nach unten auslote und mir gezeigt, wo eines der Einsatzgebiete meiner Arbeit liegen kann.

Fabian Eichstädt möchte ich für das Gegenlesen meiner Arbeit danken und für die vielen Gespräche im Partyzimmer und auch außerhalb.

Meinen „Mitinsassen“ des Partyzimmers, David Kalok und Stefan Winkelmann möchte ich für die Zeit danken, die wir dort verbracht haben.

Elke Jung war eine große Hilfe bei jeglicher Art von Papierkram und hat sich immer für Probleme bürokratischer Art Zeit genommen.

Meinen Eltern möchte ich für ihre Geduld und Unterstützung danken, ohne sie wäre mir das Studium sehr viel schwerer gefallen.

Meiner Schwester Frauke möchte ich für ihre Fähigkeit danken, mich immer wieder aufs neue zu motivieren, außerdem für ihr offenes Ohr bei jeglicher Art von Problemen.

Anhang A

Erläuterungen

A.1 Beschreibung der numerischen Vorgehensweise zur Lösung der Differentialgleichung

Das Verfahren, das benutzt wurde, um zu einem gewählten λ_0 die passende Dichteverteilung zu bestimmen, soll in diesem Teil des Anhangs beschrieben werden. Die Grundidee des Verfahrens besteht darin, durch eine gerasterte Suche das passende $\rho(0)$ und damit die Dichteverteilung $\rho(r)$ zu bestimmen.

Um dies zu bewerkstelligen, wurde das Programm in drei Teile, das Hauptprogramm und zwei Subroutinen, zerlegt. Die innere Subroutine löst, nach Eingabe von einem $\rho(0)$ und λ_0 , die Differentialgleichung und gibt ein $\rho(r)$ zurück. Die äußere Subroutine erhält den Wert λ_0 , ein Intervall für $\rho(0)$ sowie eine Schrittweite $\Delta\rho$. Diese Subroutine zählt den Wert von $\rho(0)$ mit der Schrittweite $\Delta\rho$ hoch und läßt jeweils die Differentialgleichung von der inneren Subroutine lösen. Sobald eine Lösung $\rho(r)$ von der inneren Subroutine zurückgegeben wird, die an irgendeiner Stelle eine negative Dichte enthält, bricht die äußere Subroutine diese Suche ab. Sie gibt dann die vor dem ungültigen Ergebnis berechnete Dichteverteilung zurück. Im Hauptprogramm kann man die Suchtiefe einstellen. Nach der ersten Suche wird das Intervall zwischen dem zurückgegebenen Wert von $\rho(0)$ und dem nächsten Wert von $\rho(0)$, für den die Lösung auf keinen Fall die Randbedingungen erfüllen kann, abgesucht. Dies geschieht so lange, bis die gewünschte Suchtiefe erreicht ist. Das nun erhaltene Ergebnis für die Dichteverteilung wird ausgegeben.

Dieses Verfahren zu einem gegebenen λ_0 kann man verwenden, um zu einer gesuchten Massenzahl die Dichteverteilung zu bestimmen. Hierfür muß man ein übergeordnetes Programm hinzufügen, das ein Intervall von λ_0 absucht. Aus der Dichteverteilung, die mit dem oben beschriebenen Programm berechnet werden kann, kann durch einfache numerische Integration die Mas-

senzahl bestimmt werden, so daß eine eindeutige Zuordnung von A zu λ_0 möglich ist.

A.2 Variation der Energie

In diesem Abschnitt betrachten wir die Variation der Energie nach der Phasenraumdicke. Es treten vier Sorten von Termen auf, die wir getrennt betrachten werden.

Als erstes gibt es Terme der Art

$$G_1[f(\vec{r}, \vec{p})] = \int d^3r \left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^{1+\alpha/3} \quad (\text{A.1})$$

mit $\alpha \geq 1$. Die Funktionalableitung dieser Terme berechnet sich wie folgt:

$$\begin{aligned} (2\pi)^3 \frac{\delta G_1[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \left[\left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} [f(\vec{r}, \vec{p}) + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p})] \right)^{1+\alpha/3} \right. \\ &\quad \left. - \left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^{1+\alpha/3} \right] (2\pi)^3 \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \left[\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} [f(\vec{r}, \vec{p}) + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p})] \cdot \right. \\ &\quad \left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} [f(\vec{r}, \vec{p}) + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p})] \right)^{\alpha/3} \\ &\quad \left. - \left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^{1+\alpha/3} \right] (2\pi)^3. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Da $\varepsilon \ll 1$, können wir die Klammerausdrücke entwickeln, und erhalten

$$\begin{aligned} (2\pi)^3 \frac{\delta G_1[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \left[\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} [f(\vec{r}, \vec{p}) + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p})] \cdot \right. \\ &\quad \left(\left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^{\alpha/3} + \frac{\alpha}{3} \left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}) \right) \right) \\ &\quad \left. - \left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^{1+\alpha/3} + O(\varepsilon^2) \right] (2\pi)^3. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Diese Gleichung läßt sich weiter vereinfachen zu

$$(2\pi)^3 \frac{\delta G_1[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left(1 + \frac{\alpha}{3}\right) \int d^3r \left[\left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^{\alpha/3} \cdot \left(\int d^3p \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}) \right) + O(\varepsilon^2) \right]. \quad (\text{A.4})$$

Wir verwenden die Beziehung

$$\rho(\vec{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \quad (\text{A.5})$$

und bilden den Grenzwert, womit sich für die Funktionalableitung

$$(2\pi)^3 \frac{\delta G_1[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} = \left(1 + \frac{\alpha}{3}\right) \rho(\vec{x})^{\alpha/3} \quad (\text{A.6})$$

ergibt.

Als zweites gibt es einen Term der Form

$$G_2[f(\vec{r}, \vec{p})] = \int d^3r \left(\vec{\nabla} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^2. \quad (\text{A.7})$$

Die Funktionalableitung nach f ist

$$\begin{aligned} (2\pi)^3 \frac{\delta G_2[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \left[\left(\vec{\nabla} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} [f(\vec{r}, \vec{p}) + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p})] \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \left(\vec{\nabla} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^2 \right] (2\pi)^3 \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \left[\left(\vec{\nabla} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^2 \right. \\ &\quad + 2 \left(\vec{\nabla} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right) \left(\vec{\nabla} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}) \right) \\ &\quad \left. - \left(\vec{\nabla} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right)^2 + O(\varepsilon^2) \right] (2\pi)^3. \quad (\text{A.8}) \end{aligned}$$

Wir integrieren partiell, und erhalten damit

$$\begin{aligned} (2\pi)^3 \frac{\delta G_2[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \left[-2 \left(\vec{\nabla}^2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \right) \cdot \right. \\ &\quad \left. \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}) + O(\varepsilon^2) \right] (2\pi)^3. \quad (\text{A.9}) \end{aligned}$$

Mit Gleichung (A.5) kommen wir auf das Ergebnis

$$(2\pi)^3 \frac{\delta G_2[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} = -2\vec{\nabla}^2 \rho(\vec{x}) . \quad (\text{A.10})$$

Der dritte Term ist der Term der kinetischen Energie. Die Funktionalableitung von

$$G_3[f(\vec{r}, \vec{p})] = \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2M_N} f(\vec{r}, \vec{p}) \quad (\text{A.11})$$

nach f ist

$$\begin{aligned} (2\pi)^3 \frac{\delta G_3[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[\int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2M_N} \left((f(\vec{r}, \vec{p}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}) - f(\vec{r}, \vec{p}) \right) \right] (2\pi)^3 \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[\int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2M_N} \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}) \right] \\ &= \frac{q^2}{2M_N} . \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Die bisherigen Berechnungen sind für die Funktionalableitung der Energie zur Ermittlung des nicht impulsabhängigen Potentials ausreichend. Der vierte Term, den wir betrachten, ist der impulsabhängige Welke-Term. Dieser hat die Form

$$G_4[f(\vec{r}, \vec{p})] = \int d^3r \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\lambda^2 f(\vec{r}, \vec{p}') f(\vec{r}, \vec{p})}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2} . \quad (\text{A.13})$$

Seine Funktionalableitung berechnen wir wie folgt:

$$\begin{aligned}
(2\pi)^3 \frac{\delta G_4[f(\vec{r}, \vec{p})]}{\delta f(\vec{x}, \vec{q})} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \frac{1}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2} \cdot \\
&\quad \left[[(f(\vec{r}, \vec{p}') + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}')) \cdot (f(\vec{r}, \vec{p}) \right. \\
&\quad \left. + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}))] - f(\vec{r}, \vec{p}') f(\vec{r}, \vec{p}) \right] (2\pi)^3 \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \frac{1}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{p}')^2} \cdot \\
&\quad \left[\varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}') f(\vec{r}, \vec{p}) \right. \\
&\quad \left. + \varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) \delta(\vec{q} - \vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}') + O(\varepsilon^2) \right] (2\pi)^3 \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int d^3r \left[\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) f(\vec{r}, \vec{p})}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{q})^2} \right. \\
&\quad \left. + \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon \delta(\vec{x} - \vec{r}) f(\vec{r}, \vec{p}')}{\lambda^2 + (\vec{p}' - \vec{q})^2} + O(\varepsilon^2) \right] (2\pi)^3 \\
&= 2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{f(\vec{x}, \vec{p})}{\lambda^2 + (\vec{p} - \vec{q})^2} . \tag{A.14}
\end{aligned}$$

Literaturverzeichnis

- [BBJL68] BRUECKNER, K. A. ; BUCHLER, J. R. ; JORNA, S. ; LOMBARD, R. J.: Statistical Theory of Nuclei. In: *Phys. Rev.* 171 (1968), Jul, Nr. 4, S. 1188–1195
- [BDG88] BERTSCH, G. F. ; DAS GUPTA, S.: A Guide to microscopic models for intermediate-energy heavy ion collisions. In: *Phys. Rept.* 160 (1988), S. 189–233
- [BKDG84] BERTSCH, G. F. ; KRUSE, H. ; DAS GUPTA, S.: Boltzmann equation for heavy ion collisions. In: *Phys. Rev. C* 29 (1984), Feb, Nr. 2, S. 674–675
- [BLMAR07] BUSS, O. ; LEITNER, T. ; MOSEL, U. ; ALVAREZ-RUSO, L.: Influence of the nuclear medium on inclusive electron and neutrino scattering off nuclei. In: *Phys. Rev. C* 76 (2007), Sept., Nr. 3
- [Dem05] DEMTRÖDER, W.: *Experimentalphysik 4. 2.* Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 2005
- [Eff01] EFFENBERGER, M.: *Eigenschaften von Hadronen in Kernmaterie in einem vereinheitlichten Transportmodell*, Institut für Theoretische Physik, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diss., 2001
- [JVV87] DE JAGER, C. W. ; DE VRIES, H. ; DE VRIES, C.: Nuclear Charge- and Magnetization-Density-Distribution Parameters from Elastic Electron Scattering. In: *At. Data and Nucl. Data Tables* 14 (1987), Nov/Dez, Nr. 5-6, S. 479–508
- [Kal07] KALOK, D. F.: *The Influence of In-Medium Modifications on Quasi-Elastic Electron and Neutrino Scattering on Nuclei*, Institut für Theoretische Physik, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diplomarbeit, 2007

- [KLCR63] KUMAR, K. ; LE COUTEUR, K. J. ; ROY, M. K.: A Fermi-Thomas Type K-Matrix Method for Nuclei. In: *Nucl. Phys.* 42 (1963), März, S. 529–550
- [Leh03] LEHR, J.: *In-Medium-Eigenschaften von Nukleonen und Nukleonresonanzen in einem semiklassischen Transportmodell*, Institut für Theoretische Physik, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diss., 2003
- [NOGR93] NIEVES, J. ; OSET, E. ; GARCIA-RECIO, C.: A theoretical approach to pionic atoms and the problems of anomalies. In: *Nucl. Phys.* A554 (1993), März, S. 509–553
- [Tei96] TEIS, S.: *Transporttheoretische Beschreibung von relativistischen Schwerionenkollisionen*, Institut für Theoretische Physik, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diss., 1996
- [UU33] UEHLING, E. A. ; UHLENBECK, G. E.: Transport Phenomena in Einstein-Bose and Fermi-Dirac Gases. In: *Phys. Rev.* 43 (1933), Apr, S. 552–561
- [Wei35] v. WEIZSÄCKER, C. F.: Zur Theorie der Kernmassen. In: *Zeitschrift für Physik* 96 (1935), Jul, Nr. 7, S. 431–458
- [WPK⁺88] WELKE, G. M. ; PRAKASH, M. ; KUO, T. T. S. ; DAS GUPTA, S. ; GALE, C.: Azimuthal distributions in heavy ion collisions and the nuclear equation of state. In: *Phys. Rev. C* 38 (1988), Nov, Nr. 5, S. 2101–2107

Ich versichere hiermit, daß ich die Diplomarbeit selbständig verfaßt habe.
Weiterhin versichere ich, keine außer den hier angegebenen Hilfsmitteln und
Quellen dafür verwendet zu haben.

Gießen, den