

# Das Inverse Streuprobblem bei fester Energie mit der Methode von Cox und Thompson

Diplomarbeit  
von  
Oliver Melchert  
aus  
Siegbach-Übernthal

Angefertigt am

Institut für Theoretische Physik  
der Justus-Liebig-Universität Gießen

Gießen 2005



Du musst in der Ursache das Resultat und  
im Resultat die Ursache erkennen können

Dasui Fazhen  
*Zen. Worte großer Meister*



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Das Inverse Streuprobem bei fester Energie . . . . .	1
1.2	Aufgabe und Zielsetzung dieser Arbeit . . . . .	3
1.3	Hinführung und Notation . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Das Inverse Streuprobem (ISP) bei fester Energie</b>	<b>6</b>
2.1	Die Streuwellenfunktion und der Transformationskern . . . . .	6
2.2	Das Streupotential im ISP . . . . .	7
2.3	Ansätze für den Transformationskern . . . . .	8
2.3.1	Ansatz der Newton-Sabatier-Methode . . . . .	8
2.3.2	Ansatz der Cox-Thompson-Methode . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Die Methode von Cox und Thompson (CT)</b>	<b>11</b>
3.1	Einführung zur CT-Methode . . . . .	11
3.2	Bestimmung der Entwicklungsfunktionen des Transformationskerns	12
3.3	Das gekoppelte System nichtlinearer Gleichungen . . . . .	14
3.4	Die generalisierte Riccati-Bessel-Funktion . . . . .	17
3.5	Die Behandlung geladener Teilchen . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Inversion am Beispiel eines Kastenpotentials</b>	<b>20</b>
4.1	Inversion bei festem Abschneidedrehimpuls $\ell_{\max}$ . . . . .	22
4.2	Inversion bei festem Transformationsradius $r_a$ . . . . .	25
4.3	Rekursive Inversion . . . . .	28
<b>5</b>	<b>Inversion am Beispiel eines Woods-Saxon-Modellpotentials</b>	<b>31</b>
5.1	Inversion bei festem Anpassungsradius $r_a$ . . . . .	33
5.2	Inversion bei festem Abschneidedrehimpuls $\ell_{\max}$ . . . . .	36
5.3	Inversionspotential für die Parameterwahl $\ell_{\max}=14$ und $r_a=9.25$ fm	38
<b>6</b>	<b>Inversion experimentell begründeter Streudaten</b>	<b>40</b>
6.1	$n$ - $\alpha$ -Streuung im Bereich $11.92 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 18.95 \text{ MeV}$ . . . . .	40

6.2	$n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung im Bereich $8.22 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 11.08 \text{ MeV}$ . . . . .	45
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>50</b>
<b>A</b>		<b>52</b>
A.1	Überführung der Matrixelemente $M'_{\ell L}$ in die Form der Gl. (3.16) . .	52
A.2	Das erste Moment und die Potentialtiefe des Inversionspotentials . .	53
A.3	Numerische Umsetzung . . . . .	54
	A.3.1 Globale Minimierung via Simulated Annealing . . . . .	55
	A.3.2 Das multidimensionale Newton-Raphson-Rootfinding . . . .	56
A.4	$n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale . . . . .	56

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Das Inverse Streuproblem bei fester Energie

Das Ziel von Streuexperimenten ist es, die Wechselwirkungen zwischen den Streupartnern zu ermitteln. Im Kontext der quantenmechanischen Beschreibung atomarer sowie nuklearer Systeme besteht die Möglichkeit, auf formalem Weg Streuprozesse zu beschreiben und Auskunft über verschiedene Systemgrößen zu erhalten. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich in diesem Zusammenhang auf nichtrelativistische, elastische atomare und nukleare Streuprozesse.

Bezüglich der Streutheorie kann zunächst zwischen dem *direkten* und dem *inversen* Zugang differenziert und entsprechend das direkte und das inverse Streuproblem formuliert werden [6, 29]. Aufgabe des direkten Problems ist, ausgehend von der Kenntnis der “Ursache” auf deren “Folgen” zu schliessen. Die Vorgehensweise ist wie folgt: Die Wechselwirkung zwischen den Streuteilnehmern ist bekannt und dient zur Konstruktion des Hamiltonoperators und der asymptotischen Wellenfunktion. Daraus resultiert schliesslich der differentielle Wirkungsquerschnitt des Streuprozesses. Wenn die Aufgabenstellung es verlangt, können die den Hamiltonoperator definierenden Parameter variiert werden, um einen bestmöglichen Fit an gegebene Daten zu ermöglichen.

Für die Deutung experimenteller Daten und die Rekonstruktion der zugrundeliegenden Wechselwirkungen ist hingegen das inverse Streuproblem (ISP) von grossem Interesse. Die Aufgabe des ISP besteht darin, via experimentell zugänglicher Größen auf das Streupotential zu schliessen, welches für die experimentellen Daten verantwortlich ist. Beide Wege sind in Abb. 1.1 dargestellt.

Bevor eine solche *Inversion* überhaupt vorgenommen werden kann, muss an erster Stelle ein Datensatz bereitgestellt werden, der als Input für die Inversionsprozedur dienen kann. In diesem Zusammenhang ist es möglich, zwei Herangehensweisen an das ISP zu unterscheiden: das ISP bei festem Drehimpuls und das ISP bei fester

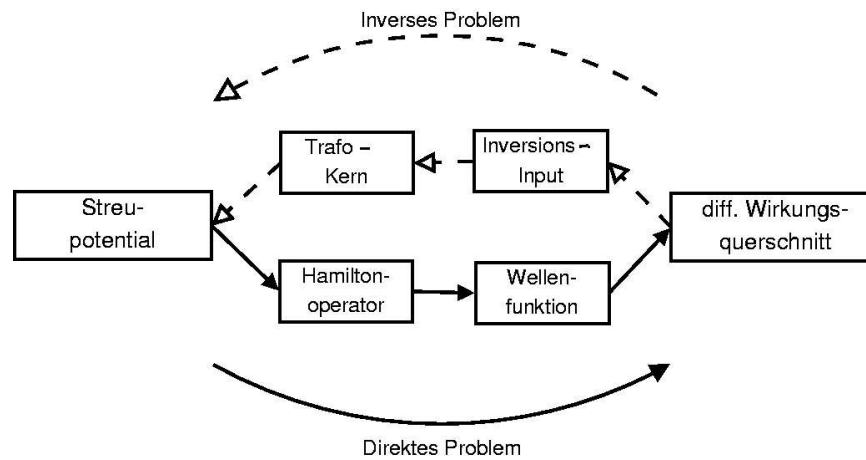


Abbildung 1.1: Direkter und inverser Zugang zur Streuproblematik

Energie. Ersteres nutzt zweierlei Input, die energieabhängigen Phasenverschiebungen  $\delta(E)$  des betrachteten Drehimpulses und die Energiewerte der gebundenen Systemzustände. Es gibt unterschiedliche Ansätze, die, wie in [6] beschrieben, auf Gel'fand und Levitan, Jost und Kohn oder Marchenko zurückgehen. Als Input des inversen Streuproblems bei fester Energie dienen die Phasenverschiebungen  $\delta_\ell$  zu den Partialwellen  $\ell$  bei der gegebenen fixierten Energie  $E$ . Die bereits erwähnten Phasenverschiebungen sind bei einem Streuexperiment in den gemessenen Wirkungsquerschnitten enthalten und müssen zunächst durch eine Phasenanalyse extrahiert werden. Im wesentlichen besteht die Phasenanalyse darin, die Streuamplituden ausgehend von dem differentiellen Wirkungsquerschnitt zu bestimmen, was keineswegs ein eindeutiger Schritt ist. Die Problematik der Phasenanalyse wird in dem Artikel [5] aufgezeigt und soll in dieser Arbeit nicht näher besprochen werden.

Die Methode von Cox und Thompson (CT) ist eine Inversionsmethode zur Lösung des ISP bei fester Energie. Die Aufgabe der CT-Methode ist es, Phasenverschiebungen zur Rekonstruktion eines radialsymmetrischen Streupotentials zu verwenden. Es gibt bereits erfolgreiche Inversionstechniken bei fester Energie, wie die sogenannte Newton-Sabatier-Methode (NS) [21], die durch May und Scheid eine Erweiterung auf geladene Streusysteme erfuhr und als modifizierte Newton-Sabatier-Methode (mNS) in der Literatur bekannt ist [17, 19, 20].



## 1.2 Aufgabe und Zielsetzung dieser Arbeit

Die Methode von Cox und Thompson wurde bereits im Jahr 1970 als Lösungsprozedur zum inversen Streuproblem bei fester Energie vorgestellt [8, 7]. Im Jahr 2002 wurde diese Methode von Apagyi et al. erstmals auf synthetische, reellwertige Potentiale angewandt [3].

Die CT-Methode nutzt einen endlichen Satz von Phasenverschiebungen als Inversionsinput um ein Streupotential zu erhalten. Im direkten Vergleich mit bereits bestehenden Inversionstechniken wie der Newton-Sabatier-Methode [21] bzw. der modifizierten Newton-Sabatier-Methode [20] lassen sich zwei Vorteile der Methode von Cox und Thompson hervorheben, die ein physikalischeres Verhalten des Lösungspotentials versprechen. Der erste Vorteil betrifft das invertierte Potential am Koordinatenursprung. Dieses ist bei Verwendung der CT-Methode endlich und weist keine Singularität auf, wie es bei der mNS-Methode der Fall ist. Der zweite Vorteil besteht darin, dass das erste Moment des invertierten Potentials bei der CT-Methode nicht verschwinden muss. Ein verschwindendes erstes Moment wie bei der NS-Methode hat nichtphysikalische Oszillationen des invertierten Potentials zur Folge. Neben diesen Vorteilen ist zu bemerken, dass die Lösung des ISP via CT-Methode auf ein gekoppeltes System nichtlinearer Gleichungen führt, die eine Herausforderung an die Numerik stellen. Diese gekoppelten, nichtlinearen Gleichungen stellen das charakteristische Merkmal der CT-Methode dar.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, das Verfahren von Cox und Thompson zur Lösung des inversen Streuproblems bei fester Energie auf komplexwertige (d.h. optische) Potentiale mit einem asymptotischen Coulombabfall zu erweitern, um auch die Behandlung derjenigen Streusysteme zu ermöglichen, die eine Coulombwechselwirkung einschliessen.

Die Struktur dieser Arbeit ist dabei wie folgt: Im zweiten Kapitel wird zunächst der grundlegende Zugang zur Streutheorie sowie die Bestimmung des Inversionspotentials erläutert. Darauf aufbauend wird im dritten Kapitel speziell die Methode von Cox und Thompson diskutiert und deren Erweiterung auf optische Potentiale durchgeführt. In diesem Kontext wird ebenfalls aufgezeigt, wie die Streuung geladener Teilchen auf die Streuung ungeladener Teilchen zurückgeführt werden kann. Das vierte, fünfte und sechste Kapitel beinhaltet numerische Resultate, die zu synthetisch erzeugten wie auch experimentell gewonnenen Streudaten korrespondieren. Das siebte Kapitel liefert schliesslich eine Zusammenfassung dieser Arbeit sowie einen Ausblick.

### 1.3 Hinführung und Notation

Ein nichtrelativistisches, quantenmechanisches System wird im Ortsraum durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = [-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.1)$$

beschrieben [18]. Die Dynamik des quantenmechanischen Systems wird hierbei vollständig durch die Lösungswellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  erfasst.

Gleichung (1.1) kann, nach Substitution des Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , als

$$i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.2)$$

geschrieben werden. Hängt der Hamiltonoperator nicht explizit von der Zeit ab, dann ist die Wellenfunktion von der Form

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\{-iEt/\hbar\} \quad , \quad (1.3)$$

und (1.1) reduziert sich auf die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$E \psi(\mathbf{r}) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}) \quad , \quad (1.4)$$

eine Eigenwertgleichung in der die Eigenfunktion  $\psi(\mathbf{r})$  nur noch von den Koordinaten  $\mathbf{r}$  abhängt und die Schwerpunktsenergie als Eigenwert zum Hamiltonoperator auftritt. Die Lösung dieses Eigenwertproblems kann durch eventuelle Symmetrieeigenschaften des Hamiltonoperators erheblich vereinfacht werden. So besitzt der Hamiltonoperator im Falle eines Zentralpotentials  $V = V(r)$  Rotationsinvarianz und das Eigenwertproblem (1.4) kann unter Verwendung von Kugelkoordinaten vollständig separiert werden. Mit dem Separationsansatz  $\psi_{Elm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{El}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  für die Lösungswellenfunktion von (1.4) zerfällt das Eigenwertproblem in zwei Unterprobleme niedrigerer Dimension: das Eigenwertproblem für den Drehimpuls und die Lösung der radialen Schrödingergleichung.

Die radiale Schrödingergleichung entspricht einem Eigenwertproblem im eindimensionalen Hilbertraum der Radialwellenfunktionen  $R_{El}(r)$ . Mit der üblichen Substitution  $R_{El}(r) = \varphi_{El}(r)/r$  wird der Übergang zu einem speziellen Hilbertraum, dem Raum der quadratintegrablen Funktionen auf der positiven, reellen Halbachse, vollzogen. Damit lautet die radiale Schrödingergleichung schliesslich

$$r^2[\nabla_r^2 + (2m/\hbar^2)(E - U(r))] \varphi_\ell(r) = \ell(\ell + 1) \varphi_\ell(r) \quad . \quad (1.5)$$

Um die Übersichtlichkeit zu erhöhen kann diese bei fester Energie unter Berücksichtigung von  $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ , einem Wechsel zu der dimensionslosen Koordinaten  $\rho = kr$  sowie dem Potential  $V(\rho) = U(r)/E$  in die Gleichung

$$\hat{D}^V(\rho) \varphi_\ell(\rho) = \ell(\ell + 1) \varphi_\ell(\rho) \quad (1.6)$$

umgeschrieben werden, wobei der Schrödingeroperator zum Potential  $V(\rho)$  in der Form

$$\hat{D}^V(\rho) = \rho^2[\nabla_\rho^2 + 1 - V(\rho)] \quad (1.7)$$

substituiert wurde.

# Kapitel 2

## Das Inverse Streupproblem (ISP) bei fester Energie

### 2.1 Die Streuwellenfunktion und der Transformationskern

Den Zugang zum ISP bei fester Energie eröffnet eine Integraldarstellung der regulären Streuwellenfunktion  $\varphi_\ell(\rho)$  bezüglich der  $\ell$ -ten Partialwelle. Sie wird als Povzner-Levitan-Darstellung der regulären Streuwellenfunktion bezeichnet und hat die Definition

$$\varphi_\ell^V(\rho) = \varphi_\ell^{V_0}(\rho) - \int_0^\rho \frac{ds}{s^2} \mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, s) \varphi_\ell^{V_0}(s) . \quad (2.1)$$

Hierbei tritt die reguläre Lösung  $\varphi_\ell^{V_0}(\rho)$  der radialen Schrödingergleichung zum Potential  $V_0(\rho)$  auf, und  $\varphi_\ell^V(\rho)$  soll der Schrödingergleichung zum gesuchten Potential  $V(\rho)$  genügen, d.h.

$$\hat{D}^V(\rho) \varphi_\ell^V(\rho) = \ell(\ell + 1) \varphi_\ell^V(\rho) \quad (2.2)$$

mit dem in Gleichung (1.7) angegebenen Schrödingeroperator  $\hat{D}^V(\rho)$ . Die Gleichung (2.1) löst die radiale Schrödingergleichung, wenn der Transformationskern  $\mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, \rho')$  die Eigenschaften

$$[\hat{D}^V(\rho) - \hat{D}^{V_0}(\rho')] \mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, \rho') = 0 \quad (2.3)$$

$$\mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, 0) = 0 , \quad \mathbf{L}_{V_0}^V(0, \rho') = 0 \quad (2.4)$$

besitzt. Die erste Zeile dieser Eigenschaften ist eine partielle Differentialgleichung, die ebenso schwer zu lösen ist, wie die radiale Schrödingergleichung selbst, da sie explizit Bezug auf das unbekannte Potential  $V(\rho)$  nimmt. Die zweite Zeile stellt Randbedingungen bezüglich des Ursprungs dar. Um zu gewährleisten, dass der

Transformationskern  $\mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, \rho')$  tatsächlich die genannten Eigenschaften besitzt, kann er unter Verwendung einer weiteren linearen Integralgleichung vom Gel'fand-Levitan-Regge-Typ mit der Definition

$$\mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, \rho') = g(\rho, \rho') - \int_0^\rho \frac{ds}{s^2} \mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, s)g(s, \rho'), \quad \text{für } \rho \geq \rho' \quad (2.5)$$

konstruiert werden, wobei der symmetrische Kern  $g(\rho, \rho')$  den Forderungen

$$[\hat{D}^{V_0}(\rho) - \hat{D}^{V_0}(\rho')] g(\rho, \rho') = 0 \quad (2.6)$$

$$g(0, \rho') = 0, \quad g(\rho, 0) = 0 \quad (2.7)$$

genügen muss [6]. Die Lösungen der Schrödingergleichung zum Referenzpotential  $V_0(\rho)$  werden als bekannt vorausgesetzt. Für die Wahl  $V_0(\rho) = 0$  entsprechen diese gerade den regulären und irregulären Riccati-Bessel-Funktionen  $u_\ell(\rho)$  und  $v_\ell(\rho)$  [1]. Der Transformationskern  $\mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, \rho')$  kann durch einen geeigneten Ansatz für den symmetrischen Kern konstruiert werden. Damit liegt das ganze Handwerkszeug vor, um das gesuchte Potential zu ermitteln.

## 2.2 Das Streupotential im ISP

Die Povzner-Levitan-Darstellung der Streuwelle (2.1) nutzt den Kern  $\mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, \rho')$ , um eine bekannte Lösung der Schrödingergleichung zum Potential  $V_0(\rho)$  auf eine Lösung zum Potential  $V(\rho)$  zu transformieren. Für eine übersichtlichere Darstellung wird im folgenden  $\mathbf{L}_{V_0}^V(\rho, \rho') = L(\rho, \rho')$  gesetzt. Um in Erfahrung zu bringen, wie der Integrationskern  $L(\rho, \rho')$  mit dem Potential  $V(\rho)$  zusammenhängt, ist es nützlich, die Integrodifferentialgleichung

$$\hat{D}^V(\rho) L(\rho, \rho') = \hat{D}^V(\rho) g(\rho, \rho') - \hat{D}^V(\rho) \int_0^\rho \frac{ds}{s^2} L(\rho, s) g(s, \rho'). \quad (2.8)$$

näher zu untersuchen. Wird die Differentiation in  $\hat{D}^V(\rho)$  im zweiten Term auf der rechten Seite explizit ausgeführt, kann unter Verwendung der geforderten Eigenschaften (2.3) des Transformationskerns  $L(\rho, \rho')$  und einer zweifachen partiellen Integration die Bestimmungsgleichung

$$V(\rho) = V_0(\rho) - \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \frac{L(\rho, \rho)}{\rho} \right) \quad (2.9)$$

für das gesuchte Potential hergeleitet werden, in der das als bekannt vorausgesetzte Referenzpotential  $V_0(\rho)$  und die Diagonalwerte  $L(\rho, \rho)$  des Transformationskerns auftreten. Das durch Gleichung (2.9) berechnete Inversionspotential ist mit dem physikalischen Potential durch die Beziehung

$$U(r) = E \cdot V(\rho) \quad (2.10)$$

verknüpft.

## 2.3 Ansätze für den Transformationskern

Um das gesuchte Potential konstruieren zu können, muss erst der Transformationskern  $L(\rho, \rho')$  in geeigneter Form vorliegen. An einen geeigneten Ansatz sind feste Forderungen und Bedingungen in der Form (2.3) geknüpft, die durch verschiedene Ansätze erfüllt werden können. Im Folgenden sollen zwei Ansätze aufgeführt werden, die im Kontext des ISP zu Inversionspotentialen unterschiedlicher Potentialfamilien führen. In diesem Zusammenhang gilt für das Referenzpotential die spezielle Wahl  $V_0(\rho) = 0$ , sodass die reguläre Lösung der Schrödingergleichung zum Referenzpotential der regulären Riccati-Bessel-Funktion entspricht.

### 2.3.1 Ansatz der Newton-Sabatier-Methode

Newton zeigte, dass das Potential im ISP bei fester Energie durch einen Ansatz für den Transformationskern in der Form

$$L^{\text{NS}}(\rho, \rho') = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} \varphi_{\ell}(\rho) u_{\ell}(\rho') \quad (2.11)$$

zugänglich wird [22], wobei die  $c_{\ell}$  reelle Koeffizienten sind,  $u_{\ell}(\rho)$  für die im Ursprung reguläre Riccati-Bessel Funktion [1] steht und die Summe über den physikalischen Drehimpuls  $\ell$  von 0 bis  $\infty$  läuft. Die Funktionen  $\varphi_{\ell}(\rho)$  sind dabei die Lösungen zur radialen Schrödingergleichung zum gesuchten Potential  $V(\rho)$ , die durch das Gleichungssystem

$$\varphi_{\ell}(\rho) = u_{\ell}(\rho) - \sum_{\ell'=0}^{\infty} K_{\ell\ell'}(\rho) c_{\ell'} \varphi_{\ell'}(\rho) \quad (2.12)$$

mit der durch die Elemente

$$K_{\ell\ell'}(\rho) = \int_0^{\rho} \frac{ds}{s^2} u_{\ell}(s) u_{\ell'}(s) \quad (2.13)$$

definierten Matrix  $K$  verknüpft sind. Zur Konstruktion des Transformationskerns  $L^{\text{NS}}(\rho, \rho')$  via Gleichung (2.5) dient dabei der symmetrische Kern

$$g^{\text{NS}}(\rho, \rho') = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} u_{\ell}(\rho) u_{\ell}(\rho'), \quad (2.14)$$

der die Forderungen (2.6) erfüllt. Um die unbekanntenen Koeffizienten  $c_\ell$  zu berechnen, wird in Gleichung (2.12) der Grenzübergang  $\rho \rightarrow \infty$  vollzogen, was zu einem linearen Gleichungssystem für die  $c_\ell$  führt. Newton [23] zeigt das der Newton'sche Ansatz für den Transformationskern auf Inversionspotentiale mit einem verschwindenden ersten Moment

$$Q_1 = \int_0^\infty r U^{\text{NS}}(r) dr = 0$$

führt. Für Potentiale mit einem nichtverschwindenden ersten Moment  $Q_1 \neq 0$  sind die Entwicklungskoeffizienten  $c_\ell$  nicht mehr absolut summierbar [23]

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} |c_\ell| = \infty .$$

Ebenso führt jeder Versuch, die unendliche Summe in Gleichung (2.11) durch eine endliche Summe zu ersetzen auf ein Inversionspotential mit verschwindendem ersten Moment  $Q_1 = 0$ .

### 2.3.2 Ansatz der Cox-Thompson-Methode

Zur Berechnung des Potentials gemäss Gleichung (2.9) wählten Cox und Thompson [8] einen Ansatz in der Form

$$L^{\text{CT}}(\rho, \rho') = \sum_{L \in T} A_L(\rho) u_L(\rho') . \quad (2.15)$$

Der Transformationskern wird hier nach regulären Riccati-Bessel-Funktionen  $u_L(\rho')$  mit Entwicklungsfunktionen  $A_L(\rho)$  entwickelt, die nach verallgemeinerten, nicht-ganzzahligen Drehimpulsen  $L$  indiziert sind. Diese verallgemeinerten Drehimpulse besitzen einen endlichen Wertevorrat  $T$  und werden durch Lösung eines hochgradig nichtlinearen Systems algebraischer Gleichungen bestimmt (siehe Unterkapitel 3.3 ab Seite 14). Die Entwicklungsfunktionen  $A_L(\rho)$  werden unter Verwendung der Integralgleichung (2.5) und des symmetrischen Kerns

$$g^{\text{CT}}(\rho, \rho') = \sum_{\ell \in S} \gamma_\ell u_\ell(\rho_{<}) v_\ell(\rho_{>}) \quad (2.16)$$

zugänglich. Dabei treten reelle Koeffizienten  $\gamma_\ell$  sowie die regulären und irregulären Riccati-Bessel-Funktionen  $u_\ell(\rho_{<})$  und  $v_\ell(\rho_{>})$  [1] auf, wobei

$$\rho_{\{< >\}} = \left\{ \begin{array}{c} \min \\ \max \end{array} \right\} (\rho, \rho')$$

für den jeweils kleineren bzw. größeren Abstand hinsichtlich des Ursprungs  $\rho = 0$  steht und der physikalische Drehimpuls  $\ell$  den endlichen Wertevorrat  $S$  besitzt. Die von Cox und Thompson gewählte Entwicklung des Transformationskerns führt zu Inversionspotentialen mit einem von Null verschiedenen ersten Moment

$$Q_1 = \int_0^\infty r U^{\text{CT}}(r) dr \neq 0 .$$

Dies entspricht einer anderen Potentialfamilie als im Falle der Newton-Sabatier-Methode.



# Kapitel 3

## Die Methode von Cox und Thompson (CT)

### 3.1 Einführung zur CT-Methode

Wie in Kapitel 2.3 bereits erwähnt, muss zunächst der Transformationskern  $L(\rho, \rho')$  in geeigneter Form vorliegen. Cox und Thompson [8] wählten das Referenzpotential  $V_0(\rho) = 0$  und machten den in Unterkapitel 2.3.2 vorgestellten Ansatz

$$L(\rho, \rho') = \sum_{L \in T} A_L(\rho) u_L(\rho') . \quad (3.1)$$

Dabei wird der Transformationskern  $L(\rho, \rho')$  nach regulären Riccati-Bessel-Funktionen  $u_L(\rho')$  entwickelt, die nach verallgemeinerten, nichtganzzahligen Drehimpulsen  $L \in T$  indiziert sind. Der Wertevorrat  $T$  dieser Drehimpulse ist noch unbekannt und muss im Weiteren bestimmt werden. Die in Gleichung (3.1) auftretenden Entwicklungsfunktionen  $A_L(\rho)$  sind ebenfalls unbekannt und müssen unter Zuhilfenahme der Gel'fand-Levitan-Integralgleichung bestimmt werden. Um die Überlegungen mit Hilfe der Gel'fand-Levitan-Gleichung weiterzuführen, muss noch ein Ansatz für den symmetrischen Kern  $g(\rho, \rho')$  aus (2.5) gemacht werden. Cox und Thompson wählten hier eine Entwicklung nach Green-Funktionen des potentialfreien Schrödingeroperators in der Form

$$g(\rho, \rho') = \sum_{\ell \in S} \gamma_\ell u_\ell(\rho_{<}) v_\ell(\rho_{>}) \quad (3.2)$$

mit reellen Koeffizienten  $\gamma_\ell$ , der regulären Riccati-Bessel-Funktion  $u_\ell(\rho_{<})$  und der irregulären Riccati-Bessel-Funktion  $v_\ell(\rho_{>})$ , wobei der physikalische Drehimpuls  $\ell$  den Wertevorrat  $S$  besitzt. Wie bereits angemerkt sind die Elemente der Menge  $T$

nichtganzzahlig und die Elemente der Menge  $S$  werden durch ganzzahlige Werte des physikalischen Drehimpuls bereitgestellt. Damit besitzen die beiden Mengen  $T$  und  $S$  kein gemeinsames Element. Es gilt:

$$T \cap S = \emptyset . \quad (3.3)$$

### 3.2 Bestimmung der Entwicklungsfunktionen des Transformationskerns

Um Auskunft über die Entwicklungsfunktionen  $A_L(\rho)$  des Transformationskerns zu erhalten, werden die Ansätze für den Transformationskern  $L(\rho, \rho')$  (3.1) und den symmetrischen Kern  $g(\rho, \rho')$  (3.2) in die Gel'fand-Levitan-Integralgleichung (2.5) eingesetzt. Nach einigen Umformungen und einer Umsortierung der auftretenden Terme folgt schliesslich die Beziehung

$$\begin{aligned} \sum_{L \in T} A_L(\rho) \left[ 1 + \sum_{\ell \in S} \frac{\gamma_\ell}{L(L+1) - \ell(\ell+1)} \right] u_L(\rho') = \\ \sum_{\ell \in S} \gamma_\ell \left[ v_\ell(\rho) + \sum_{L \in T} A_L(\rho) \frac{W[u_L(\rho), v_\ell(\rho)]}{L(L+1) - \ell(\ell+1)} \right] u_\ell(\rho') \end{aligned} \quad (3.4)$$

mit der Wronski-Determinanten  $W[a, b] = ab' - a'b$ . Die lineare Unabhängigkeit der regulären Riccati-Bessel-Funktionen  $u_k(\rho)$  für  $k \in T \cup S$  ermöglicht es die gegebene Beziehung in die beiden Gleichungen

$$\sum_{L \in T} A_L(\rho) \frac{W[u_L(\rho), v_\ell(\rho)]}{L(L+1) - \ell(\ell+1)} = -v_\ell(\rho) \quad (3.5)$$

$$\sum_{\ell \in S} \frac{\gamma_\ell}{L(L+1) - \ell(\ell+1)} = -1 \quad (3.6)$$

zu separieren. Gleichung (3.5) stellt eine Bestimmungsgleichung für die Entwicklungsfunktionen des Transformationskerns dar, wobei die  $A_L(\rho)$  linear und die verallgemeinerten Drehimpulse  $L$  hochgradig nichtlinear auftreten. Die Entwicklungsfunktionen können gemäss

$$A_L(\rho) = - \sum_{\ell' \in S} (M^{-1})_{L\ell'} v_{\ell'}(\rho) \quad (3.7)$$

ermittelt werden, wobei die Matrix  $M^{-1}$  durch Inversion aus der durch die Elemente

$$M_{\ell L} = \frac{W[u_L(\rho), v_\ell(\rho)]}{L(L+1) - \ell(\ell+1)} \quad (3.8)$$

definierte Matrix  $M$  hervorgeht.

Um die Entwicklungskoeffizienten  $\gamma_\ell$  des symmetrischen Kerns zu bestimmen, wurde von Cox und Thompson [7] eine rationale Funktion mit einfachen Polen in  $\ell(\ell + 1)$  mit  $\ell \in S$  definiert:

$$\rho[M(M + 1)] \equiv 1 + \sum_{\ell \in S} \frac{\gamma_\ell}{[M(M + 1) - \ell(\ell + 1)]}. \quad (3.9)$$

Aufgrund von Gleichung (3.6) nimmt die Funktion  $\rho[M(M + 1)]$  im Falle  $M \in T$  oder  $-M - 1 \in T$  den Wert

$$\rho[M(M + 1)] = 0 \quad (3.10)$$

an und die Definition (3.9) liefert im Grenzübergang

$$\lim_{|M(M+1)| \rightarrow \infty} \rho[M(M + 1)] = 1. \quad (3.11)$$

Cox und Thompson folgend [7] kann die Funktion  $\rho[M(M + 1)]$  unter Berücksichtigung der beiden Eigenschaften (3.10) und (3.11) als Quotient zweier Polynome in der Form

$$\rho[M(M + 1)] = \frac{\prod_{L \in T} [M(M + 1) - L(L + 1)]}{\prod_{\ell \in S} [M(M + 1) - \ell(\ell + 1)]} \quad (3.12)$$

dargestellt werden.

Durch den Vergleich der beiden Darstellungen (3.9) und (3.12) folgen die Entwicklungskoeffizienten  $\gamma_\ell$  als die Funktionswerte von  $\rho[M(M + 1)] \cdot [M(M + 1) - \ell(\ell + 1)]$  an den Stellen  $\ell \in S$  [13]:

$$\gamma_\ell = \frac{\prod_{L \in T} [\ell(\ell + 1) - L(L + 1)]}{\prod_{\substack{\ell' \in S \\ \ell' \neq \ell}} [\ell(\ell + 1) - \ell'(\ell' + 1)]}. \quad (3.13)$$

An dieser Stelle soll betont werden, dass der Wertevorrat  $T$  des verallgemeinerten Drehimpulses  $L$  noch nicht bekannt ist und erst bestimmt werden muss, was das Anliegen des nächsten Unterkapitels ist. Zur Berechnung des Inversionspotentials  $V(\rho)$  gemäss Gleichung (2.9) wird neben dem diagonalen Transformationskern  $L(\rho, \rho)$  auch dessen Ableitung

$$L'(\rho, \rho) = \sum_{L \in T} (A'_L(\rho)u_L(\rho) + A_L(\rho)u'_L(\rho)) \quad (3.14)$$

benötigt, in der die Funktionen  $A_L(\rho)$  sowie deren Ableitungen  $A'_L(\rho)$  auftreten. Letztere können durch einfache Differentiation der Beziehung (3.5) nach der dimensionslosen Koordinaten  $\rho$  bestimmt werden und lauten

$$A'_L(\rho) = - \sum_{\ell' \in S} (M^{-1})_{L\ell'} (M'_{\ell'L} A_L + v'_{\ell'}(\rho)). \quad (3.15)$$

Die in dem vorstehenden Ausdruck benötigten Matrixelemente  $M'_{\ell'L}$  können unter Verwendung des Wronskischen Theorems (siehe Anhang A.1) in die Form

$$M'_{\ell'L} = -v_{\ell'}(\rho)u_L(\rho)/\rho^2 \quad (3.16)$$

gebracht werden.

### 3.3 Das gekoppelte System nichtlinearer Gleichungen zur Bestimmung der verallgemeinerten Drehimpulse

Um nun die verallgemeinerten Drehimpulse zu ermitteln, müssen einige Überlegungen im asymptotischen Bereich  $\rho \rightarrow \infty \equiv \rho_\infty$  getätigt werden. Die regulären und irregulären Riccati-Bessel-Funktionen lauten im asymptotischen Bereich

$$\begin{aligned} u_\ell(\rho_\infty) &= \sin(\rho - \ell \pi/2) \\ v_\ell(\rho_\infty) &= -\cos(\rho - \ell \pi/2) . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Besitzt das Streupotential eine endliche Reichweite  $\rho_0 = kr_0$ , so wird die reguläre Streuwellenfunktion im Bereich  $\rho \geq \rho_0$  durch den Ausdruck

$$\varphi_\ell^V(\rho \geq \rho_0) = B_\ell [\cos(\delta_\ell)u_\ell(\rho) - \sin(\delta_\ell)v_\ell(\rho)] \quad (3.18)$$

beschrieben. Asymptotisch reduziert sich das gerade auf

$$\varphi_\ell^V(\rho_\infty) = B_\ell \sin(\rho - \ell \pi/2 + \delta_\ell) , \quad (3.19)$$

wobei die Normierungskonstanten  $B_\ell$  mit  $\ell \in S$  unbekannt sind und die  $\delta_\ell$  für die experimentell zugänglichen Phasenverschiebungen stehen. Während die Gel'fand-Levitan-Integralgleichung die Bestimmung der Entwicklungsfunktionen  $A_L(\rho)$  für noch unbekanntes  $L$  ermöglicht, kann die Povzner-Levitan-Darstellung der regulären Streuwellenfunktion (2.1) genutzt werden, um den Wertevorrat  $T$  und damit die verallgemeinerten Drehimpulse zu ermitteln. Einsetzen der asymptotischen Ausdrücke (3.17) und (3.19) in Gleichung (2.1) liefert den Zusammenhang

$$B_\ell \sin(\rho - \ell \pi/2 + \delta_\ell) = \sin(\rho - \ell \pi/2) + \sum_{L, \ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \cos(\rho - \ell \pi/2) , \quad (3.20)$$

wobei die quadratischen Matrizen

$$\left\{ \begin{array}{c} N \\ M \end{array} \right\}_{\ell L}^\infty = \frac{1}{L(L+1) - \ell(\ell+1)} \left\{ \begin{array}{c} \sin((\ell - L) \pi/2) \\ \cos((\ell - L) \pi/2) \end{array} \right\} \quad (3.21)$$

den verallgemeinerten Drehimpuls  $L$  in hochgradig nichtlinearer Weise enthalten. Die Matrix  $M^\infty$  entspricht der in Gleichung (3.8) definierten Matrix  $M$  im Grenzübergang  $\rho \rightarrow \infty$ . Unter Verwendung der Eulerschen Formel kann Gleichung (3.20) in die zwei Summanden

$$\left[ B_\ell \exp[i\delta_\ell] - 1 - i \sum_{L,\ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \exp[i(\ell - \ell') \frac{\pi}{2}] \right] \exp[i\rho] +$$

$$\left[ B_\ell \exp[-i\delta_\ell] - 1 + i \sum_{L,\ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \exp[-i(\ell - \ell') \frac{\pi}{2}] \right] \exp[-i\rho] = 0$$

zerlegt werden. Für die Koeffizienten der linear unabhängigen Exponentialfunktionen  $\exp[\pm i\rho]$  gilt im Einzelnen

$$B_\ell \exp[i\delta_\ell] = 1 + i \sum_{L,\ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \exp[i(\ell - \ell') \pi/2] \quad (3.22)$$

$$B_\ell \exp[-i\delta_\ell] = 1 - i \sum_{L,\ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \exp[-i(\ell - \ell') \pi/2]. \quad (3.23)$$

Im Falle rein reeller Streuphasen  $\delta_\ell$  sind die beiden Gleichungen (3.22) und (3.23) zueinander konjugiert und besitzen den gleichen Informationsgehalt. Um ein Gleichungssystem zur Bestimmung der verallgemeinerten Drehimpulse  $L$  aufzustellen, genügt es daher eine dieser Gleichungen zu betrachten. Die Matrixelemente  $N_{\ell L}^\infty$  und  $(M^{-1})_{L\ell}^\infty$  mit  $\ell \in S$  und  $L \in T$  sind dabei rein reell, und eine Separation von Gleichung (3.22) in Real- und Imaginärteil mit anschließender Division der erhaltenen Gleichungen liefert das nichtlineare System gekoppelter Gleichungen

$$\cot(\delta_\ell - \ell\pi/2) = \frac{\cos(\ell\pi/2) + \sum_{L,\ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \sin(\ell'\pi/2)}{-\sin(\ell\pi/2) + \sum_{L,\ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \cos(\ell'\pi/2)}, \quad (3.24)$$

welches von Apagyi et al. [3] zur Inversion rein reeller Streuphasen verwendet wurde. Im Falle komplexwertiger Streuphasen  $\delta_\ell = \delta_\ell^R + i\delta_\ell^I$  sind die oben erwähnten Matrixelemente sowie die Normierungskonstanten  $B_\ell$  komplexwertig und die beiden Gleichungen nicht zueinander konjugiert. Die unbekanntenen Normierungskonstanten  $B_\ell$  können durch Division der Gleichungen (3.22) und (3.23) in der Form

$$S_\ell = \frac{1 + i\mathcal{K}_\ell^+}{1 - i\mathcal{K}_\ell^-} \quad (3.25)$$

eliminiert werden, wobei die Elemente

$$\mathcal{K}_\ell^\pm = \sum_{L,\ell'} N_{\ell L}^\infty (M^{-1})_{L\ell'}^\infty \exp[\pm i(\ell - \ell') \pi/2] \quad (3.26)$$

sowie die Streumatrix  $S_\ell = \exp[2i\delta_\ell]$  substituiert wurden. Die Beziehung (3.25) stellt ein nichtlineares System gekoppelter Gleichungen zur Bestimmung der verallgemeinerten Drehimpulse  $L$  dar. Wenn der Input-Phasensatz aus  $n$  Streuphasen besteht, dann liefert Gleichung (3.25)  $n$  gekoppelte Gleichungen zur Bestimmung von  $n$  verallgemeinerten Drehimpulsen  $L$  unter Verwendung der  $n$  Streuphasen  $\delta_\ell$ . Für komplexwertige Input-Phasen  $\delta_\ell = \delta_\ell^R + i\delta_\ell^I$  können die Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell = \exp[-2\delta_\ell^I]$  definiert werden. Die Streumatrix nimmt dann die Form  $S_\ell = \eta_\ell \exp[2i\delta_\ell^R]$  an. In diesem Fall liefert das nichtlineare Gleichungssystem komplexwertige verallgemeinerte Drehimpulse  $L$ . Mit dem nun bekannten Wertevorrat  $T$  kann der diagonale Transformationskern  $L(\rho, \rho)$  konstruiert und das Inversionspotential  $U(r)$  berechnet werden. Die Ermittlung der verallgemeinerten Drehimpulse kann auch mit dem alternativen Gleichungssystem

$$\tan(\delta_\ell) = \frac{\mathcal{K}_\ell^+ + \mathcal{K}_\ell^-}{2 + i(\mathcal{K}_\ell^+ - \mathcal{K}_\ell^-)} \quad (3.27)$$

vorgenommen werden. In analytischer Hinsicht macht dies keinen Unterschied, da die Gleichung (3.27) durch einfache Umformungen aus Gleichung (3.25) hervorgeht. Da der Wertebereich von Gleichung (3.25)  $-1 \leq S_\ell \leq 1$  und der von Gleichung (3.27)  $-\infty \leq \tan(\delta_\ell) \leq \infty$  beträgt, macht es allerdings in numerischer Hinsicht einen Unterschied, mit welcher der beiden Gleichungen das in Anhang A.3 beschriebene Verfahren zum Erhalt der generalisierten Drehimpulse  $L$  angewandt wird. Dies liefert dann die Möglichkeit, die unter Verwendung von Gleichung (3.25) gewonnenen Ergebnisse durch erneute Rechnung mit Gleichung (3.27) zu verifizieren bzw. falsifizieren. Im Kontext dieser Arbeit wurde ein **Fortran 77**-Code erstellt und es wurden Testrechnungen mit beiden Gleichungen vorgenommen. Der **Fortran 77**-Code rechnete mit doppelter Genauigkeit und die Ergebnisse der Testrechnungen stimmten typischerweise im Bereich der Rechengenauigkeit überein. Alle in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen wurden unter Verwendung von Gleichung (3.25) durchgeführt.

### 3.4 Die generalisierte Riccati-Bessel-Funktion

Um das Inversionspotential gemäss Gleichung (2.9) nach der Methode von Cox und Thompson konstruieren zu können, dient die in Gleichung (3.1) gezeigte Entwicklung des Transformationskerns  $L(\rho, \rho')$  nach regulären Riccati-Bessel-Funktionen  $u_L(\rho)$  mit einem komplexwertigen Index  $L$ . Diese Funktionen sind Lösung der freien, radialen Schrödingergleichung

$$\hat{D}^0(\rho) u_L(\rho) = L(L+1) u_L(\rho), \quad (3.28)$$

wodurch die Interpretation des Index  $L$  als komplexwertiger Drehimpuls gerechtfertigt wird.  $\hat{D}^0(\rho)$  steht hierbei für den potentialfreien Schrödingeroperator mit der Definition  $\hat{D}^0(\rho) = \rho^2 [\nabla_\rho^2 + 1]$ . Numerisch erfassbar wird die reguläre Riccati-Bessel-Funktion mit komplexwertigem Index durch die Beziehung [1, 16]

$$u_L(\rho) = 2^L \rho^{L+1} e^{-i\rho} \frac{\Gamma(L+1)}{\Gamma(2L+2)} M(L+1, 2L+2, 2i\rho), \quad (3.29)$$

die eine Verbindung zu der konfluenten hypergeometrischen Reihe [1] (resp. Kummer-Funktion [16])

$$M(L+1, 2L+2, 2i\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(L+1)_n}{(2L+2)_n} \frac{(2i\rho)^n}{n!} \quad (3.30)$$

mit dem Pochhammersymbol  $(a)_{n=0} = 1$ ,  $(a)_{n>0} = \prod_{k=0}^{n-1} (a+k)$  und der Gamma-Funktion zu komplexem Argument  $\Gamma(a)$  herstellt.

Unter Verwendung der für die Kummer-Funktion gültigen Umformungsregeln [1, 16] kann die erste Ableitung der generalisierten Riccati-Bessel-Funktion nach der dimensionslosen Koordinaten  $\rho$  durch den Ausdruck

$$u'_L(\rho) = 2^L \rho^{L+1} e^{-i\rho} \frac{\Gamma(L+1)}{\Gamma(2L+2)} \times \left[ \frac{L+1}{\rho} M(L+2, 2L+2, 2i\rho) - i M(L+1, 2L+2, 2i\rho) \right] \quad (3.31)$$

berechnet werden.

### 3.5 Rückführung des Streuproblems geladener Teilchen auf das ungeladener Teilchen

Nehmen sowohl Projektil als auch Target eines Streuprozesses an der elektromagnetischen Wechselwirkung teil, so liefert die Coulombwechselwirkung, beziehungsweise das Coulombpotential zwischen den Streupartnern, einen Beitrag zu den asymptotisch zugänglichen Streuphasen  $\delta_\ell$ . Die Streuphasen setzen sich dann additiv aus den Kernphasen  $\tilde{\delta}_\ell$  und den Coulombphasen  $\sigma_\ell = \arg \Gamma(\ell+1+i\eta)$  mit dem Sommerfeldparameter  $\eta = Z_1 Z_2 e^2 \mu / \hbar^2 k$  zusammen. Die Kernphasen  $\tilde{\delta}_\ell$  beschreiben die asymptotische Phasenverschiebung der regulären Streuwellenfunktion gegenüber der freien Coulomb-Wellenfunktion. Wie bereits von May und Scheid [17] gezeigt wurde, kann der Fall geladener Teilchen durch eine Transformation der Streumatrix  $S_\ell$  auf den Fall ungeladener Teilchen zurückgeführt werden. Diese Transformation geht von der Annahme aus, dass das gesuchte Potential, welches durch die Kernphasen erfasst wird, eine endliche Reichweite besitzt und das gesamte Potential zwischen den Streuteilnehmern asymptotisch gleich dem Coulombpotential ist. Die Idee ist nun, die S-Matrix für ein asymptotisches Coulombpotential im Falle geladener Teilchen auf ein asymptotisch konstantes Potential für den Fall ungeladener Teilchen zu transformieren

$$S_\ell(\delta_\ell) \rightarrow S_\ell(\delta_\ell^{\text{B}}) . \quad (3.32)$$

Das Potential zwischen den geladenen Streuteilnehmern soll ab einem Radius  $r_0$ , und somit  $\rho_0 = kr_0$ , bekannt sein und dem Coulombpotential

$$U(r \geq r_0) = U_C(r) \quad (3.33)$$

entsprechen. Das gesuchte, kurzreichweitige Potential, ist für  $r \geq r_0$  gleich Null. Die Lösungswellenfunktion für die Streuung geladener Teilchen ist damit ab  $r = r_0$  bekannt und lautet [10]

$$\varphi_\ell^V(\rho \geq \rho_0) = B_\ell^V [\cos(\tilde{\delta}_\ell) F_\ell(\rho, \eta) + \sin(\tilde{\delta}_\ell) G_\ell(\rho, \eta)] , \quad (3.34)$$

wobei  $F_\ell(\rho, \eta)$  und  $G_\ell(\rho, \eta)$  für die reguläre bzw. die irreguläre Coulomb-Funktion steht. Als Bezugspunkt der Transformation wird zunächst ein Radius  $r_a \geq r_0$  eingeführt. Unter Festlegung des Referenzpotentials  $U_C(r_a)$  wird die Energie des ungeladenen Referenzsystems bei  $E^{\text{B}} = E_{\text{c.m.}} - U_C(r_a)$  fixiert, wodurch die entsprechende Wellenzahl  $k^{\text{B}}$  und die dimensionslose Koordinate  $\rho^{\text{B}}$  durch die Ausdrücke

$$k^{\text{B}} = \sqrt{2\mu(E_{\text{c.m.}} - U_C(r_a))} / \hbar \quad (3.35)$$

$$\rho^{\text{B}} = k^{\text{B}} r \quad (3.36)$$



gegeben sind. Weiter wird ein Hilfspotential konstruiert:

$$U^{\text{B}}(r) = \begin{cases} U(r) & \text{für } r \leq r_a \\ U_{\text{C}}(r_a) & \text{für } r \geq r_a \end{cases}, \quad (3.37)$$

welches im Innenraum mit dem gesuchten Potential übereinstimmt und asymptotisch konstant ist. Schliesslich lautet die Lösungswellenfunktion des ungeladenen Referenzsystems im Bereich  $r \geq r_0$  unter Verwendung der Riccati-Bessel-Funktionen  $u_\ell(\rho^{\text{B}})$  und  $v_\ell(\rho^{\text{B}})$

$$\varphi_\ell^{\text{VB}}(\rho^{\text{B}} \geq \rho_0^{\text{B}}) = B_\ell^{\text{VB}} [\cos(\delta_\ell^{\text{B}}) u_\ell(\rho^{\text{B}}) - \sin(\delta_\ell^{\text{B}}) v_\ell(\rho^{\text{B}})] . \quad (3.38)$$

Die zu dem ungeladenen Referenzsystem gehörenden Streuphasen  $\delta_\ell^{\text{B}}$  sind dann eindeutig durch die logarithmische Ableitung der Wellenfunktionen zum Potential  $V(\rho)$  am Punkt  $r_a$  bestimmt

$$\left[ \frac{d}{dr} \ln \varphi_\ell^{\text{VB}}(\rho^{\text{B}}) \right]_{r=r_a} = \left[ \frac{d}{dr} \ln \varphi_\ell^{\text{V}}(\rho) \right]_{r=r_a} \quad (3.39)$$

und führen durch die Inversion gerade zu dem Hilfspotential  $U^{\text{B}}(r)$ .

# Kapitel 4

## Inversion synthetischer Streudaten am Beispiel eines Kastenpotentials

Das vorliegende Kapitel beinhaltet die Inversion komplexwertiger Streuphasen, die aus einem komplexwertigen, kastenförmigen Modellpotential mit einem asymptotischem Coulombabfall hervorgehen. In diesem Zusammenhang soll die Rechengenauigkeit des Inversionsprogramms aufgezeigt und die Leistungsfähigkeit der CT-Methode demonstriert werden. Da unstetige Potentiale in numerischer Hinsicht anspruchsvoller als stetige (etwa Woods-Saxon-Potentiale) sind, wurde zu Demonstrationszwecken ein kastenförmiges Potential gewählt. Die analytische Form des verwendeten Kastenpotentials lautet

$$U(r) = U^{\text{R}}(r) + iU^{\text{I}}(r) \quad (4.1)$$

mit dem Realteil

$$U^{\text{R}}(r) = \begin{cases} -5 \text{ MeV} & \text{für } r \leq 3 \text{ fm} \\ Z_1 Z_2 e^2 / r & \text{für } r > 3 \text{ fm} \end{cases}$$

und dem Imaginärteil

$$U^{\text{I}}(r) = \begin{cases} -2 \text{ MeV} & \text{für } r \leq 2.8 \text{ fm} \\ 0 & \text{für } r > 2.8 \text{ fm} \end{cases} .$$

Die das Streusystem charakterisierenden Größen sind durch  $Z_1 = 2$ ,  $Z_2 = 6$  und  $A_1 = 4$ ,  $A_2 = 12$  gegeben. Der Streuprozess stellt demnach ein naives Modell einer  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung dar. Die Berechnung der Streudaten erfolgte durch numerische Integration der radialen Schrödingergleichung bei der Schwerpunktsenergie  $E_{\text{c.m.}} = 25$  MeV. Die Realteile  $\delta_\ell$  der Kernphasen und die Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell$  sind in

Tabelle 4.1: Komplexes Kastenpotential: Streudaten

$\ell$	$\delta_\ell$	$\eta_\ell$	$\ell$	$\delta_\ell$	$\eta_\ell$
0	-0.738956	0.717	10	-0.000012	1.000
1	1.811857	0.635	11	-0.000013	1.000
2	1.326138	0.750	12	-0.000013	1.000
3	1.263135	0.721	13	-0.000012	1.000
4	0.730408	0.714	14	-0.000012	1.000
5	0.153384	0.947	15	-0.000011	1.000
6	0.023346	0.994	16	-0.000011	1.000
7	0.002957	0.999	17	-0.000011	1.000
8	0.000294	1.000	18	-0.000010	1.000
9	0.000012	1.000	19	-0.000010	1.000

Realteile  $\delta_\ell$  der Kernphasen und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell$  bezüglich der  $\ell$ -ten Partialwelle für die Streuung an dem komplexwertigen Kastenpotential aus Gleichung (4.1).

Tab. 4.1 aufgelistet und dienen als Input der Inversionsprozedur. Ausgehend von den zur Verfügung stehenden Input-Daten wird zunächst die in Unterkapitel 3.5 erläuterte Transformation der S-Matrix auf das ungeladene Referenzsystem ausgeführt, wobei der Anpassungsradius  $r_a$  als technischer Parameter auftritt. Anschliessend wird das gekoppelte System nichtlinearer Gleichungen (3.25) zum Erhalt der verallgemeinerten Drehimpulse  $L$  unter Verwendung der Streuphasen  $\delta_\ell^B$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell^B$  numerisch gelöst. Ist der Wertevorrat der Drehimpulse  $L$  bekannt, wird via Gleichung (3.1) der Transformationskern berechnet und das Hilfspotential  $U^B(r)$  gemäss Gleichung (3.37) ermittelt, welches im Bereich  $r \leq r_a$  mit dem gesuchten CT-Inversionspotential übereinstimmt. Als Mass für die Qualität des CT-Inversionspotentials werden die Phasenverschiebungen  $\delta_\ell^{CT}$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell^{CT}$  herangezogen, die aus dem invertierten Potential hervorgehen.

## 4.1 Inversion bei festem $\ell_{\max}$ und unterschiedlichen Transformationsradien $r_a$

Alle Potentiale in diesem Unterkapitel wurden mit den Input-Daten aus Tab. 4.1 unter der Einschränkung  $\ell_{\max} = 15$  berechnet. Die Berechnung der Inversionspotentiale erfolgt bei 4 verschiedenen Transformationsradien zwischen  $r_a = 5.25$  fm und  $r_a = 9.25$  fm. Die Ergebnisse der Inversionsprozedur zeigt Abb. 4.1. Naiv wäre zu erwarten, dass das CT-Inversionspotential nach einer Transformation der Streumatrix in der Nähe der Potentialkante bei  $r \approx 5$  fm das beste Ergebnis liefert. Bei der Rechnung hat sich allerdings gezeigt, dass bei Verwendung von  $\ell_{\max} = 15$ , d.h. von 16 komplexen Streuphasen, der Transformationsradius  $r_a = 7.25$  fm die beste Wiedergabe der Inputphasen ergibt. Um eine solche Aussage treffen zu können wurde ein  $\chi^2$ -Test [9, 12] für die Eingabe- und CT-Streumatrizen sowie für die Modell- und CT-Inversionspotentiale angefertigt. Der  $\chi^2$ -Test der Streumatrizen

$$\chi_S^2 = \frac{1}{\ell_{\max}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} |S_\ell - S_\ell^{\text{CT}}|^2$$

gibt die mittlere Abweichung der CT-Streumatrix von der Eingabe-Streumatrix an. Der entsprechende Test für das Streupotential

$$\chi_U^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{U(r_i) - U^{\text{CT}}(r_i)}{1 \text{ MeV}} \right|^2$$

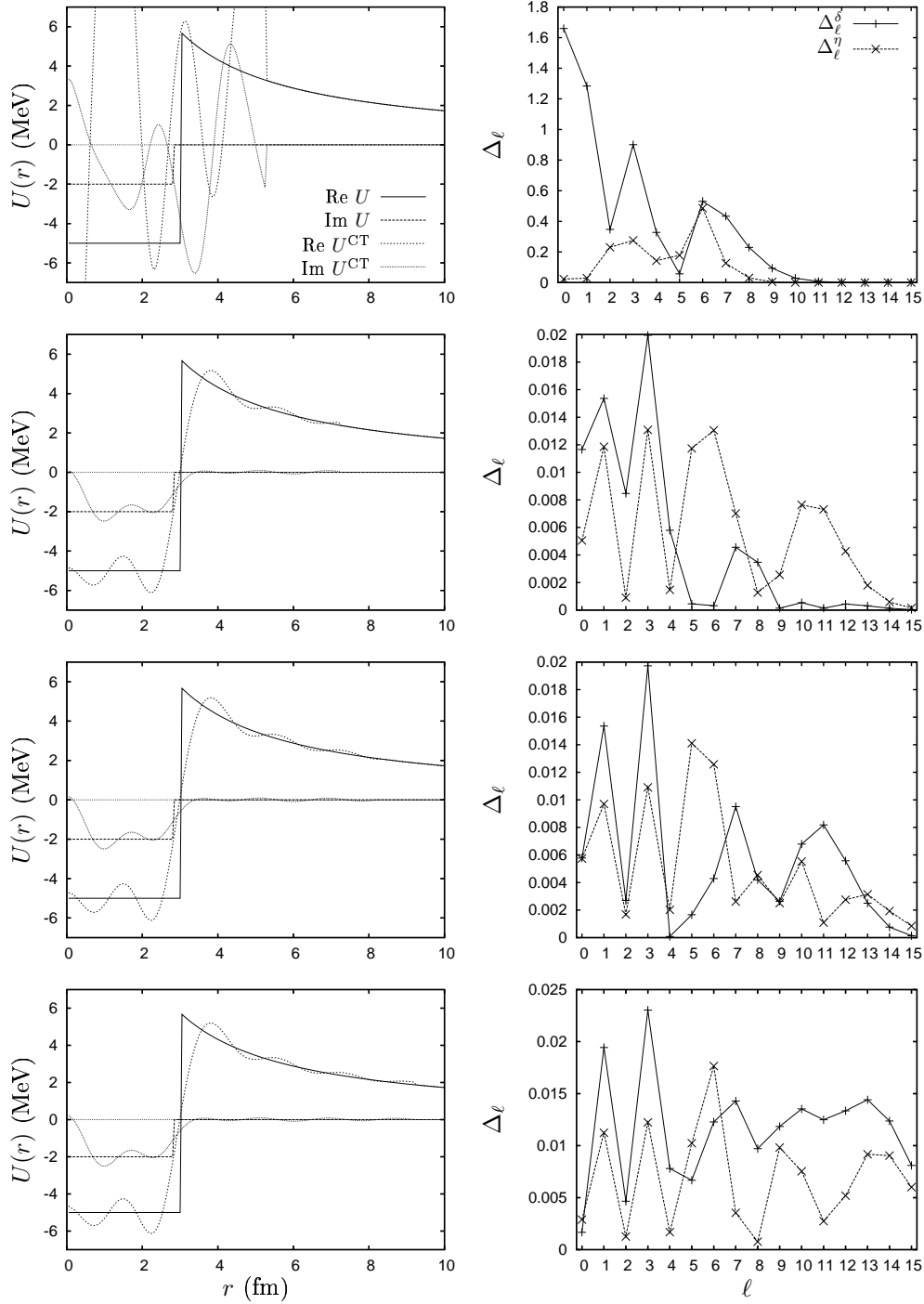
liefert die mittlere quadratische Abweichung des CT-Inversionspotentials von dem Eingabe-Modellpotential. Die Summation umfasst hierbei  $N = 599$  Potential-Stützstellen und startet bei dem Wert  $r_i = 0.05$  fm. Die erhaltenen Grössen sind in Tab. 4.2 aufgelistet. Eine semiklassische Näherung in der Form  $k \cdot a = \ell_{\max}$  liefert einen Zusammenhang zwischen Wellenzahl  $k$ , Potentialradius  $a$  und Abschneide-Drehimpuls  $\ell_{\max}$ , der gewählt werden muss, um die in den Streuphasen enthaltene Information über das zugrundeliegende Potential zu erfassen. Umgekehrt bedeutet das: Wird die Wellenzahl sowie der Abschneidedrehimpuls vorgegeben, so kann ermittelt werden, bis zu welchem Radius  $a$  Potential-Information in den entsprechenden Streuphasen enthalten ist. Die halbklassische Näherung liefert in diesem Fall einen Wert von  $\ell_{\max}/k = 8.83$  fm. Mit diesem Wert ist die Information über das zugrundeliegende Potential bis hin zum gewählten Transformationsradius  $r_a = 8.25$  fm vollständig enthalten. Trotzdem ist die Reproduktion der Inputphasen bei dem Transformationsradius  $r_a = 7.25$  fm von einer besseren Qualität. Die Transformation der Streumatrix bei einem Anpassungsradius  $r_a = 9.25$  fm liefert ein qualitativ schlechteres Ergebnis, da die Anzahl der verwendeten Partialwellen nicht genügend Information beinhaltet, um eine Potentialrekonstruktion bis  $r_a = 9.25$  fm zu gewährleisten.

Tabelle 4.2: Komplexes Kastenpotential: Daten zur Inversion bei festem Abschneidedrehimpuls

$r_a$	$E^B$	$U_C(r_a)$	$\text{Re } U_0$	$\text{Im } U_0$	$\chi_U^2$	$\chi_S^2 \cdot 10^3$
5.25	21.71	3.29	-28.67	3.41	23.38	549.95
6.25	22.24	2.76	-4.88	0.15	0.38	0.24
7.25	22.62	2.38	-4.83	0.12	0.38	0.17
8.25	22.91	2.09	-4.68	0.19	0.38	0.20
9.25	23.13	1.87	-4.68	0.20	0.38	0.58

Einträge von links nach rechts: Anpassungsradien  $r_a$  der Streumatrix-Transformation in fm bei festem  $\ell_{\max} = 15$ , Streuenergie  $E^B$  des ungeladenen Referenzsystems in MeV, entsprechende Referenzpotentialwerte  $U_C(r_a)$  in MeV, Potentialtiefe  $U_0$  des CT-Inversionspotentials in MeV sowie  $\chi^2$ -Test der Modell- und CT-Inversionspotentiale  $\chi_U^2$  und Eingabe- und CT-Streumatrizen  $\chi_S^2$ .

Abbildung 4.1: Komplexes Kastenpotential: Inversion bei den Anpassungsradien  $r_a = 5.25, 7.25, 8.25, 9.25$  fm (von oben nach unten) und festem Abschneidedrehimpuls  $\ell_{\max} = 15$ .



Links: CT-Inversionspotentiale, rechts: Betrag der Differenz zwischen den Input- und den zum CT-Inversionspotential gehörenden Phasen ( $\Delta_\ell^\delta$ ) und Absorptionskoeffizienten ( $\Delta_\ell^\eta$ ). Die Werte von  $\Delta_\ell^\delta$  und  $\Delta_\ell^\eta$  sind von näherungsweise gleicher Grösse.

## 4.2 Inversion bei festem Transformationsradius $r_a$ und unterschiedlichen Werten von $\ell_{\max}$

In diesem Unterkapitel wird die Transformation der Streumatrix an dem Anpassungsradius  $r_a = 7.25$  fm (resp.  $E^B = 22.62$  MeV) bei 4 unterschiedlichen Werten von  $\ell_{\max}$  vorgenommen. Die für die Inversionsprozedur verwendeten komplexwertigen Streuphasen des ungeladenen Referenzsystems sind in Tab. 4.3 aufgelistet, die Werte der  $\chi^2$ -Tests befinden sich in Tab. 4.4, und die CT-Inversionspotentiale zeigt Abb. 4.2. Die Qualität des CT-Inversionspotentials bei der geringen Anzahl von  $\ell_{\max} = 3$  Partialwellen ist nicht gut. Eine semiklassische Näherung liefert in diesem Falle  $a = 1.65$  fm. In den verwendeten Streuphasen ist demnach noch nicht die ganze Information des zugrundeliegenden Potentials enthalten. Die Inputphasen werden von den CT-Phasen ebenfalls schlecht wiedergegeben.

Bei der Verwendung von  $\ell_{\max} = 10$ , also insgesamt 11 komplexwertigen Streuphasen, ist die Qualität des CT-Inversionspotentials besser als zuvor. Eine semiklassische Näherung ergibt  $a = 5.52$  fm. Die verwendeten Phasen enthalten demnach bereits die Information über das Kastenpotential. Die Information über den anschließenden Coulombverlauf bis hin zu  $r_a$  ist hingegen noch nicht ganz enthalten. Die Inputphasen werden von den CT-Phasen wesentlich besser reproduziert.

Werden beide  $\chi^2$ -Tests herangezogen, so liefert der Abschneidedrehimpuls  $\ell_{\max} = 17$  das qualitativ beste Ergebnis. Eine semiklassische Näherung liefert  $a = 8.83$  fm, damit ist die Information über das gesamte Potential bis über den Transformationsradius  $r_a$  hinaus in den verwendeten Phasen enthalten. Die Inputphasen werden von den CT-Phasen mit guter Qualität wiedergegeben. Das vorliegende Inversionspotential zeigt ein unschönes Verhalten in der Nähe des Ursprungs. Die bei der Inversion verwendeten Phasen  $\delta_{\ell=15,16,17}^B$  des ungeladenen Referenzsystems sind etwa  $10^{-4}$  und führen zu numerischen Ungenauigkeiten nahe des Ursprungs.

Bei der Verwendung von  $\ell_{\max} = 19$  bzw. 20 Phasen wird die Qualität des CT-Inversionspotentials schlechter, siehe Tab. 4.4. Das unstetige Verhalten nahe des Ursprungs ist hier sehr deutlich zu erkennen. Die Qualität der CT-Streumatrix hat hingegen weiter zugenommen. Dies ist in dem Umstand begründet, dass die Streuwellenfunktion unter den herrschenden Randbedingungen nahe des Ursprungs kleine Werte annimmt und das Potential für kleine Werte von  $r$  bei der Berechnung der Streuphasen nicht so stark beiträgt.

Tabelle 4.3: Komplexes Kastenpotential: Streudaten für das komplexwertige Kastenpotential nach Transformation der S-Matrix

$\ell$	$\delta_\ell^{\text{B}}$	$\eta_\ell^{\text{B}}$	$\ell$	$\delta_\ell^{\text{B}}$	$\eta_\ell^{\text{B}}$
0	0.636852	0.716	10	-0.054351	1.0
1	0.622393	0.635	11	-0.024375	1.0
2	0.450582	0.750	12	-0.008923	1.0
3	0.594730	0.721	13	-0.002690	1.0
4	0.218745	0.714	14	-0.000682	1.0
5	-0.240453	0.947	15	-0.000153	1.0
6	-0.271425	0.994	16	-0.000035	1.0
7	-0.214347	0.999	17	-0.000013	1.0
8	-0.154593	1.0	18	-0.000008	1.0
9	-0.099618	1.0	19	-0.000007	1.0

Streuphasenverschiebungen  $\delta_\ell^{\text{B}}$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell^{\text{B}}$  nach der S-Matrix-Transformation am Transformationsradius  $r_a = 7.25$  fm.

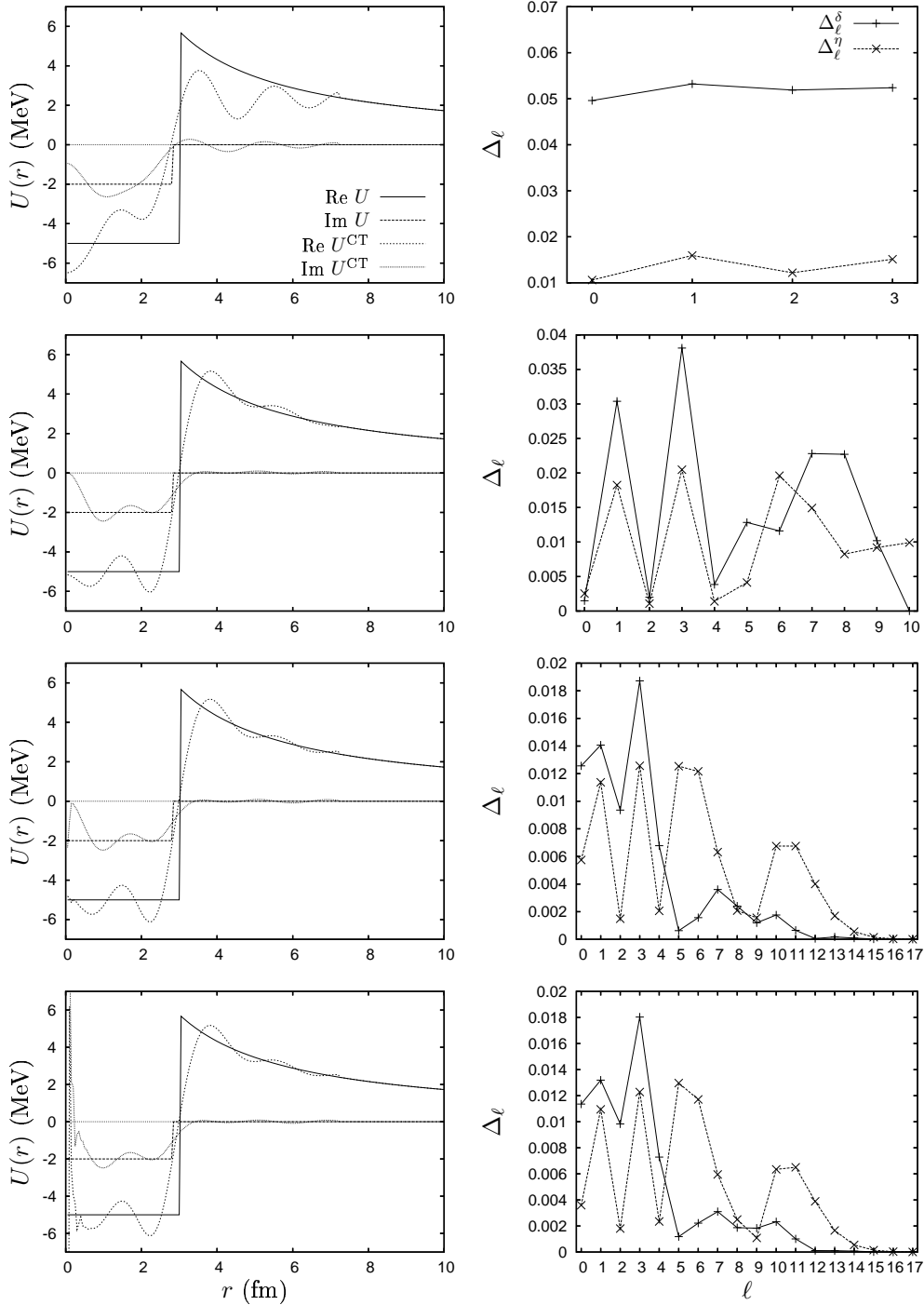
Tabelle 4.4: Komplexes Kastenpotential: Daten zur Inversion bei festem Anpassungsradius

$\ell_{\text{max}}$	Re $U_0$	Im $U_0$	$\chi_{\text{U}}^2$	$\chi_{\text{S}}^2 \cdot 10^3$	$\ell_{\text{max}}$	Re $U_0$	Im $U_0$	$\chi_{\text{U}}^2$	$\chi_{\text{S}}^2 \cdot 10^3$
3	-6.50	-0.93	0.945	5.54	11	-4.80	0.14	0.380	0.67
4	-5.12	0.35	0.938	1.77	12	-4.98	0.08	0.380	0.45
5	-3.03	0.22	0.675	3.18	13	-4.83	0.13	0.380	0.25
6	-6.15	0.08	0.571	5.73	14	-4.90	0.10	0.379	0.21
7	-3.83	0.22	0.451	1.78	15	-4.83	0.12	0.378	0.17
8	-5.63	0.04	0.425	1.57	16	-4.87	0.10	0.382	0.16
9	-4.53	0.18	0.386	1.07	17	-4.82	0.12	0.366	0.14
10	-5.16	0.06	0.384	1.10	19	-4.81	0.12	5.304	0.12

Einträge von links nach rechts: Abschneidedrehimpuls  $\ell_{\text{max}}$  der Inversionsprozedur bei dem Anpassungsradius  $r_a = 7.25$  fm, Potentialtiefe Re  $U_0$ , Im  $U_0$  in MeV sowie  $\chi^2$ -Test der Modell- und CT-Inversionspotentiale  $\chi_{\text{U}}^2$  und Eingabe- und CT-Streumatrizen  $\chi_{\text{S}}^2$ .



Abbildung 4.2: Komplexes Kastenpotential: Inversion bei festem Anpassungsradius  $r_a = 7.25$  fm und Abschneidedrehimpulsen  $\ell_{\max} = 3, 10, 17, 19$  (von oben nach unten).



Links: CT-Inversionspotentiale, rechts: Betrag der Differenz zwischen den Input- und den CT-Phasen ( $\Delta_\ell^\delta$ ) und Absorptionskoeffizienten ( $\Delta_\ell^\eta$ ). Die Werte von  $\Delta_\ell^\delta$  und  $\Delta_\ell^\eta$  sind von näherungsweise gleicher Grösse.

### 4.3 Rekursive Inversion

In diesem Unterkapitel soll die Stabilität der CT-Inversionspotentiale untersucht werden. Zu diesem Zweck wurden die von dem CT-Inversionspotential hervorgegerufenen CT-Phasen erneut invertiert und dieser Prozess zwölfmal wiederholt. Die Inversion wurde mit dem Abschneidedrehimpuls  $\ell_{\max} = 15$  an dem Anpassungsradius  $r_a = 7.25$  fm vorgenommen. Das Ergebnis dieser rekursiven Inversion zeigt Abb. 4.3.

Nach der zweiten Inversion der Streuphasen aus Tab. 4.1 sind bereits Abweichungen zwischen dem CT-Inversionspotential  $U^{\text{CT}}(r)$  und dem neuen Inversionspotential  $\tilde{U}^{\text{CT}}(r)$  zu beobachten. Die größte Abweichung ist im Bereich zwischen 0 und 1 fm zu finden. Dies hat einen starken Einfluss auf die Differenz  $\tilde{\Delta}_\ell$  zwischen den Eingabe- und Ausgabe-Phasen. Die Differenz  $\tilde{\Delta}_\ell$  liegt in der gleichen Größenordnung wie die Differenz  $\Delta_\ell$  zwischen den CT- und Originalphasen.

Die dritte Inversion der Originalstreuphasen führt auf ein Inversionspotential, welches eine stärkere Abweichung von  $U^{\text{CT}}(r)$  aufweist, als es bei der vorherigen Rechnung der Fall war. Die größten Abweichungen liegen wie zuvor im Bereich zwischen 0 und 1 fm, hinzu kommen deutliche Abweichungen im Bereich zwischen 1 bis 5.5 fm. Die Differenz  $\tilde{\Delta}_\ell$  liegt auch hier in der gleichen Größenordnung wie  $\Delta_\ell$ .

Nach der sechsten Inversion sind die Abweichungen des erhaltenen Inversionspotentials von  $U^{\text{CT}}(r)$  im Bereich von 0 bis 1 fm weiter gestiegen, und es sind deutliche Abweichungen bis hin zum Anpassungsradius zu erkennen. Die Differenz  $\tilde{\Delta}_\ell$  liegt gerade noch in der gleichen Größenordnung wie die Differenz  $\Delta_\ell$  zwischen den CT- und Originalphasen.

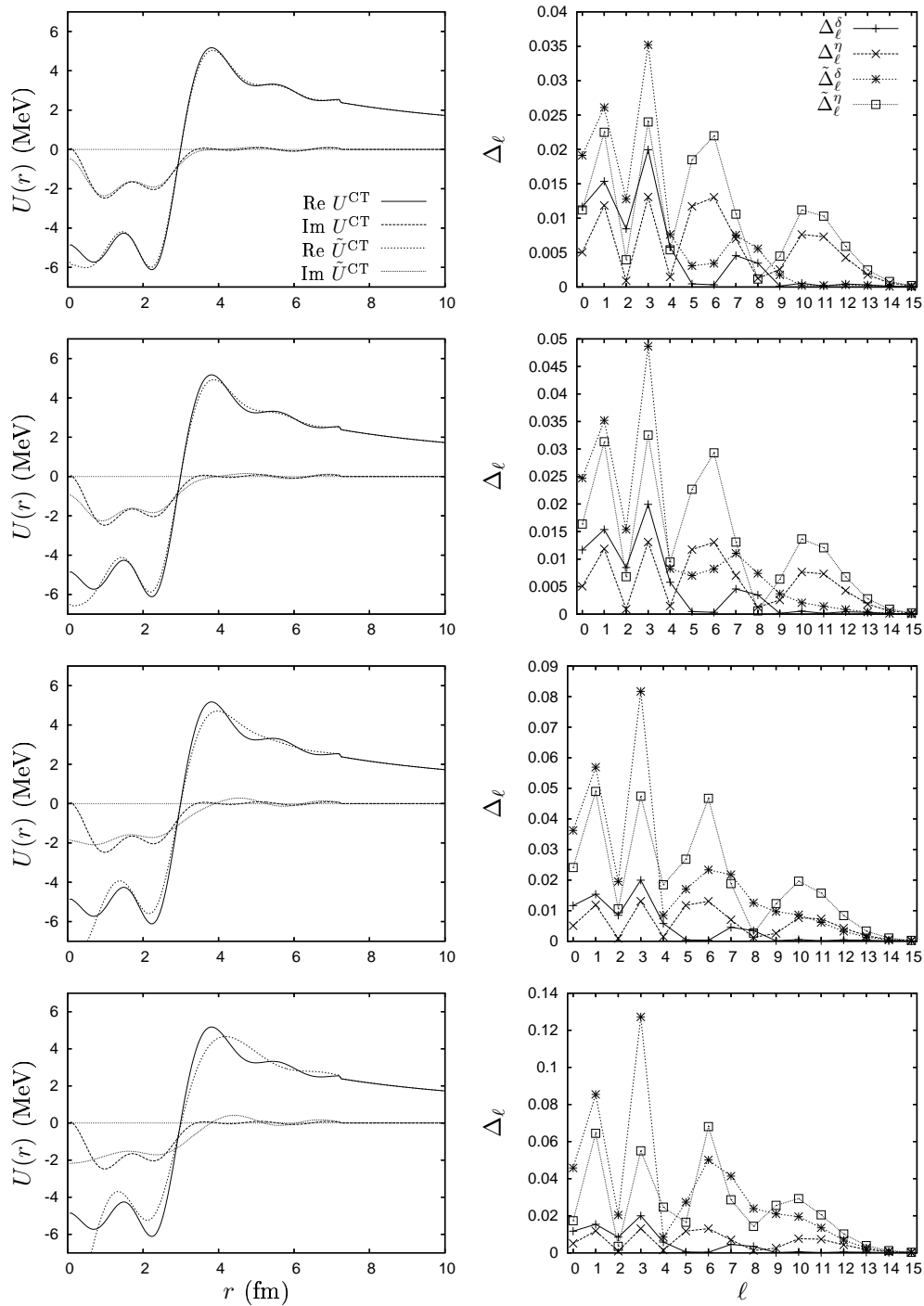
Die zwölfte rekursive Inversion führt auf ein Inversionspotential, welches bis hin zum Anpassungsradius erhebliche Abweichungen vom ursprünglichen CT-Inversionspotential aufweist. Die entsprechende Streuphasendifferenz  $\Delta_\ell$  nimmt weiter zu. Die grösste Abweichung vom Original-Phasensatz liegt hierbei in der Größenordnung  $10^{-1}$ .

Tabelle 4.5: Komplexes Kastenpotential: Daten zur wiederholten Inversion der Eingabe-Streudaten

$N_{\text{inv}}$	Re $U_0$	Im $U_0$	$\chi_U^2$	$\chi_S^2 \cdot 10^3$
2	-5.834	-0.444	0.386	0.497
3	-6.587	-0.946	0.414	0.924
4	-7.213	-1.346	0.454	1.420
5	-7.755	-1.650	0.500	1.962
6	-8.231	-1.873	0.550	2.531
7	-8.652	-2.030	0.601	3.117
8	-9.025	-2.133	0.650	3.709
9	-9.353	-2.193	0.696	4.303
10	-9.640	-2.216	0.738	4.896
11	-9.889	-2.210	0.779	5.486
12	-10.104	-2.180	0.810	6.073

Einträge von links nach rechts: Anzahl  $N_{\text{inv}}$  der Wiederholungen des Inversions-schrittes, Wert des Potentials am Ursprung Re  $U_0$ , Im  $U_0$  in MeV sowie  $\chi^2$ -Test des Eingabe- und Inversionspotentials  $\chi_U^2$  und der S-Matrix  $\chi_S^2$ .

Abbildung 4.3: Komplexes Kastenpotential: Ergebnis der Inversionsprozedur nach der 2., 3., 6. und 12. (von oben nach unten) Inversion der Eingabestreuphasen.



Links: CT-Inversionspotential ( $U^{\text{CT}}(r)$ ) und Ergebnis nach rekursiver Inversion der Eingabestreuphasen ( $\tilde{U}^{\text{CT}}(r)$ ). Rechts: Betrag der Differenz zwischen Eingabe- und CT-Streuphasen ( $\Delta_\ell^\delta / \Delta_\ell^\eta$ ) bzw. zu den durch rekursive Inversion erhaltenen Streuphasen ( $\tilde{\Delta}_\ell^\delta / \tilde{\Delta}_\ell^\eta$ ).

# Kapitel 5

## Inversion synthetischer Streudaten am Beispiel eines optischen Potentials mit Woods-Saxon-Form

Als weiteres Beispiel eines optischen Potentials sollen in diesem Kapitel Streudaten invertiert werden, die auf einem stetigen, Woods-Saxon-förmigen Modellpotential beruhen. Optische Potentiale mit Woods-Saxon-Form werden in der Kernphysik zur Modellierung von Streuprozessen verwendet und setzen sich aus dem komplexwertigen Kernpotential  $V(r) + iW(r)$  sowie dem Coulombpotential  $V_C(r)$ , das zwischen den Streuteilnehmern wirkt, in der Form

$$U(r) = V(r) + iW(r) + V_C(r) \quad (5.1)$$

zusammen. Das Coulombpotential ist hierbei das Potential zwischen einer Punktladung  $Z_1e$  und einer homogen geladenen Kugel mit der Ladung  $Z_2e$  und dem Radius  $R_C$

$$V_C(r) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2R_C} \left( 3 - \frac{r^2}{R_C^2} \right) & \text{für } r \leq R_C \\ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} & \text{für } r > R_C \end{cases} .$$

Der Realteil des Kernpotentials wird als Woods-Saxon-Potential

$$V(r) = V_0 / (1 + \exp[(r - R_V)/a_V])$$

angesetzt, wobei  $V(r)$  für den Abstand  $r = R_V$  auf den Wert  $V_0/2$  abfällt und der Parameter  $a_V$  die Randunschärfe des Potentials beschreibt. Der Imaginärteil des Kernpotentials wird hier in der Form

$$W(r) = W_0 \exp[(r - R_W)/a_W] / (1 + \exp[(r - R_W)/a_W])^2$$

Tabelle 5.1:  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: Streudaten

$\ell$	$\delta_\ell$	$\eta_\ell$	$\ell$	$\delta_\ell$	$\eta_\ell$
0	-0.4267	0.5068	9	0.0145	0.9997
1	2.0997	0.5673	10	0.0055	0.9999
2	1.7764	0.4067	11	0.0021	1.0
3	1.3818	0.3524	12	0.0008	1.0
4	0.9720	0.5179	13	0.0003	1.0
5	0.5601	0.7951	14	$0.97 \cdot 10^{-4}$	1.0
6	0.2484	0.9554	15	$0.27 \cdot 10^{-4}$	1.0
7	0.0983	0.9923	16	$0.19 \cdot 10^{-5}$	1.0
8	0.0379	0.9986	17	$-0.75 \cdot 10^{-5}$	1.0

Realteile  $\delta_\ell$  der Kernphasen und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell$  der  $\ell$ -ten Partialwelle für die  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung nach dem Modellpotential (5.1). Die begrenzte Rechengenauigkeit des Phasenrechners bewirkt  $|\delta_{\ell=17}| > |\delta_{\ell=16}|$ .

angesetzt [11], was die Beschreibung einer Absorption an der Kernoberfläche ermöglicht. Die 6 Parameter des komplexwertigen Kernpotentials sowie alle das Streusystem charakterisierenden Daten wurden im Folgenden wie in [9] gewählt, sodass eine Beschreibung des Streusystems  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$  durch das Potential (5.1) ermöglicht wird. Die Parameter lauten:

$$\begin{array}{llll}
 V_0 = -15 \text{ MeV} & W_0 = -7.5 \text{ MeV} & R_C = 3.3 \text{ fm} & E_{c.m.} = 25 \text{ MeV} \\
 R_V = 3 \text{ fm} & R_W = 2 \text{ fm} & Z_1 = 2 & A_1 = 4 \\
 a_V = 0.5 \text{ fm} & a_W = 0.303 \text{ fm} & Z_2 = 6 & A_2 = 12
 \end{array}$$

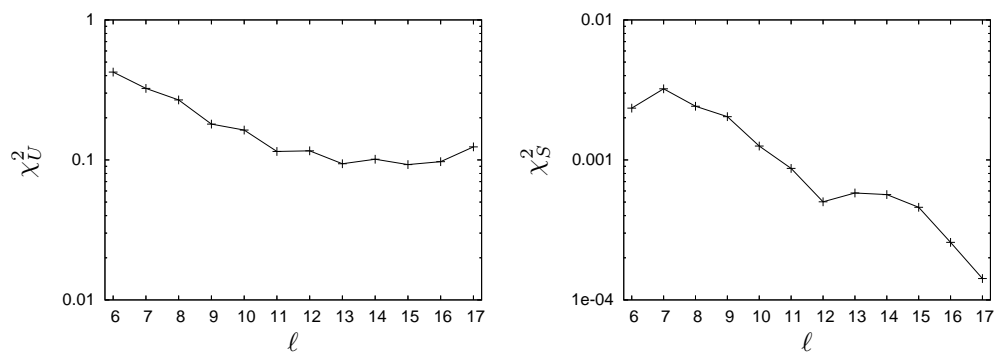
In [9] wurden NS-Inversionspotentiale der synthetischen  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Streudaten erstellt. Die Berechnung der in Tab. 5.1 angegebenen Realteile  $\delta_\ell$  der Kernphasen und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell$  erfolgte wie im vorherigen Kapitel durch numerische Integration der radialen Schrödingergleichung bei der gegebenen Schwerpunktsenergie.

## 5.1 Inversion bei festem Anpassungsradius $r_a$ und verschiedenen Werten von $\ell_{\max}$

Die Berechnung der CT-Inversionspotentiale in diesem Unterkapitel erfolgte bei unterschiedlichen Werten von  $\ell_{\max}$ , wobei der Anpassungsradius den festen Wert  $r_a = 9.5$  fm besitzt. Für  $\ell_{\max} = 6$  finden wir ein stark oszillierendes CT-Inversionspotential, was in vergleichsweise großen Werten  $\chi_U^2$  und  $\chi_S^2$  (siehe Tab. 5.1) resultiert. Mit zunehmendem  $\ell_{\max}$  fällt die kontinuierliche Verbesserung des  $\chi_S^2$ -Wertes auf. Der Wert von  $\chi_U^2$  ist hingegen bei  $\ell_{\max} = 15$  minimal und steigt für  $\ell_{\max} > 15$  sogar an. Wie aus Tab. 5.1 hervorgeht sind die Eingabephasen  $\delta_{\ell > 15}$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_{\ell > 15}$  bereits  $\approx 10^{-6}$ . Bei der Inversionsprozedur werden diese Phasen aufgrund der Rechengenauigkeit des Inversionsprogrammes nicht mehr exakt erfasst und führen zu numerischen Ungenauigkeiten. Diese numerischen Ungenauigkeiten bewirken im Bereich um den Koordinatenursprung eine stärkere Abweichung des Inversionspotentials von dem Originalpotential (siehe Abb. 5.2 für  $\ell_{\max} = 17$ ) und machen sich in dem  $\chi_U^2$ -Wert, der die mittlere quadratische Abweichung des Inversionspotentials von dem optischen Modellpotential angibt, bemerkbar. Da die Wellenfunktion für  $r \rightarrow 0$  verschwindet und das Potential für kleine Werte von  $r$  bei der numerischen Integration der radialen Schrödingergleichung weniger stark zu den Streuphasen und Absorptionskoeffizienten beiträgt, reproduzieren die aus dem Inversionspotential resultierenden Streudaten die Eingabedaten so gut, dass eine stete Verbesserung des  $\chi_S^2$ -Wertes möglich ist.

Die Lage der Oszillationen im CT-Inversionspotential hat keine eindeutige Verbindung zur verwendeten Anzahl an Streuphasen, lediglich die Amplitude der Oszillationen nimmt mit steigendem  $\ell_{\max}$  ab. Als optimaler Wert des Abschneidedrehimpulses bei der Inversion zu  $r_a = 9.5$  fm erscheint  $\ell_{\max} = 14$ .

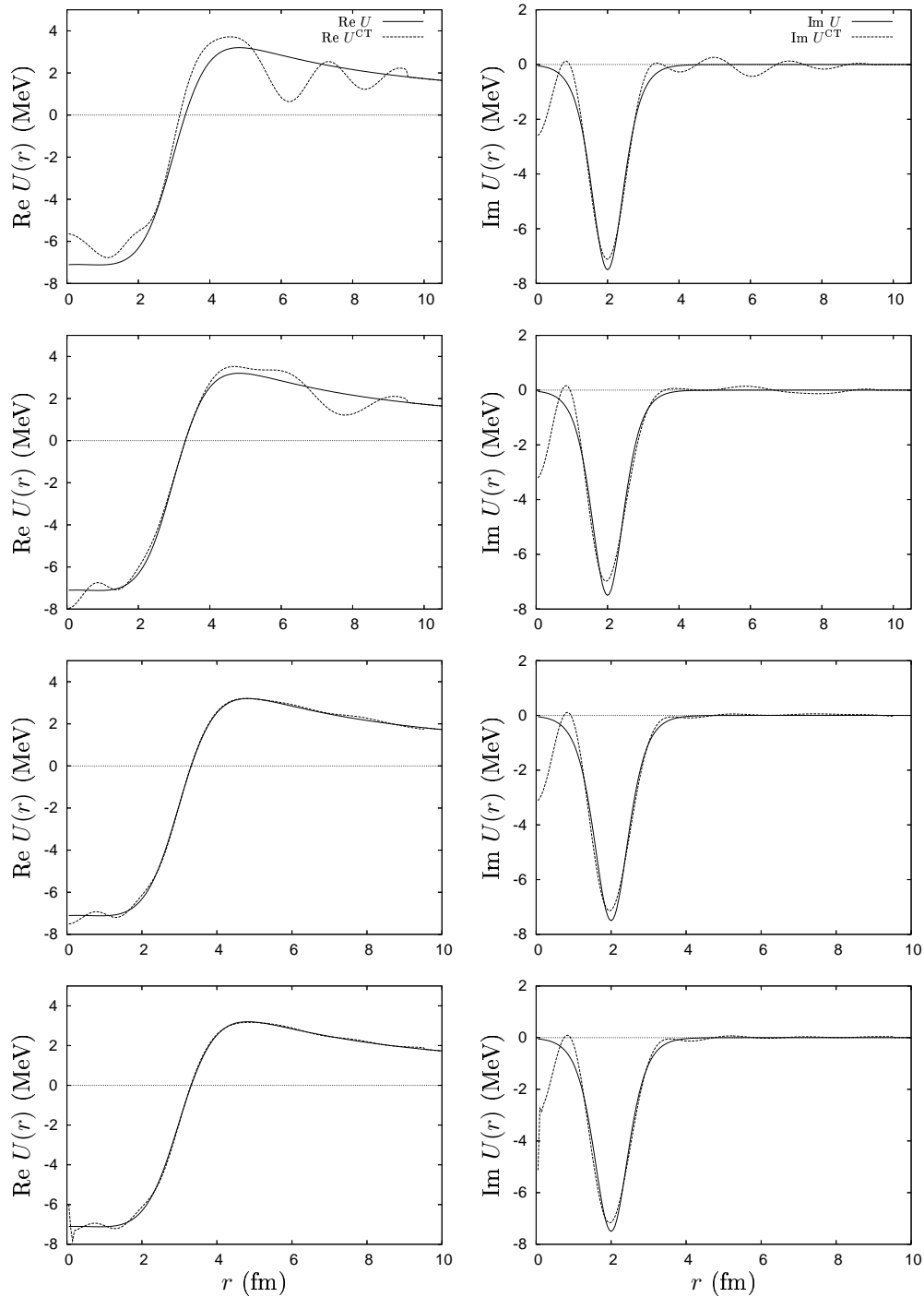
Abbildung 5.1:  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential:  $\chi_U^2$ - und  $\chi_S^2$ -Werte für die Inversion zu verschiedenen Abschneidedrehimpulsen  $\ell_{\max}$ .



Links:  $\chi_U^2$ -Wert als Maß für die mittlere quadratische Abweichung des Inversionspotentials von dem Originalpotential. Rechts:  $\chi_S^2$ -Wert als Maß für die mittlere quadratische Abweichung der CT-Streumatrix von der Eingabe-Streumatrix.

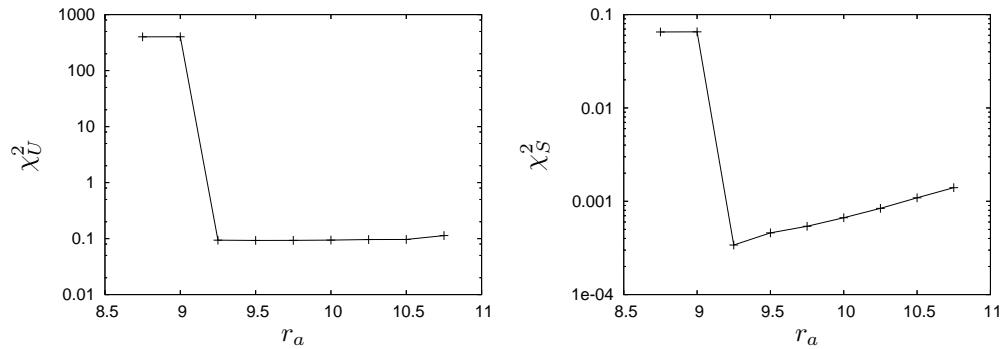


Abbildung 5.2:  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: CT-Inversionspotentiale zu verschiedenen Abschneidedrehimpulsen  $\ell_{\max}$ .



CT-Inversionspotentiale zu festem S-Matrix-Anpassungsradius  $r_a = 9.5$  fm und 4 verschiedenen Abschneidedrehimpulsen  $\ell_{\max}$ . Werte des Abschneidedrehimpulses von oben nach unten:  $\ell_{\max} = 7, 10, 14, 17$ .

Abbildung 5.3:  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential:  $\chi_U^2$ - und  $\chi_S^2$ -Werte für die Inversion zu verschiedenen Anpassungsradien  $r_a$ .

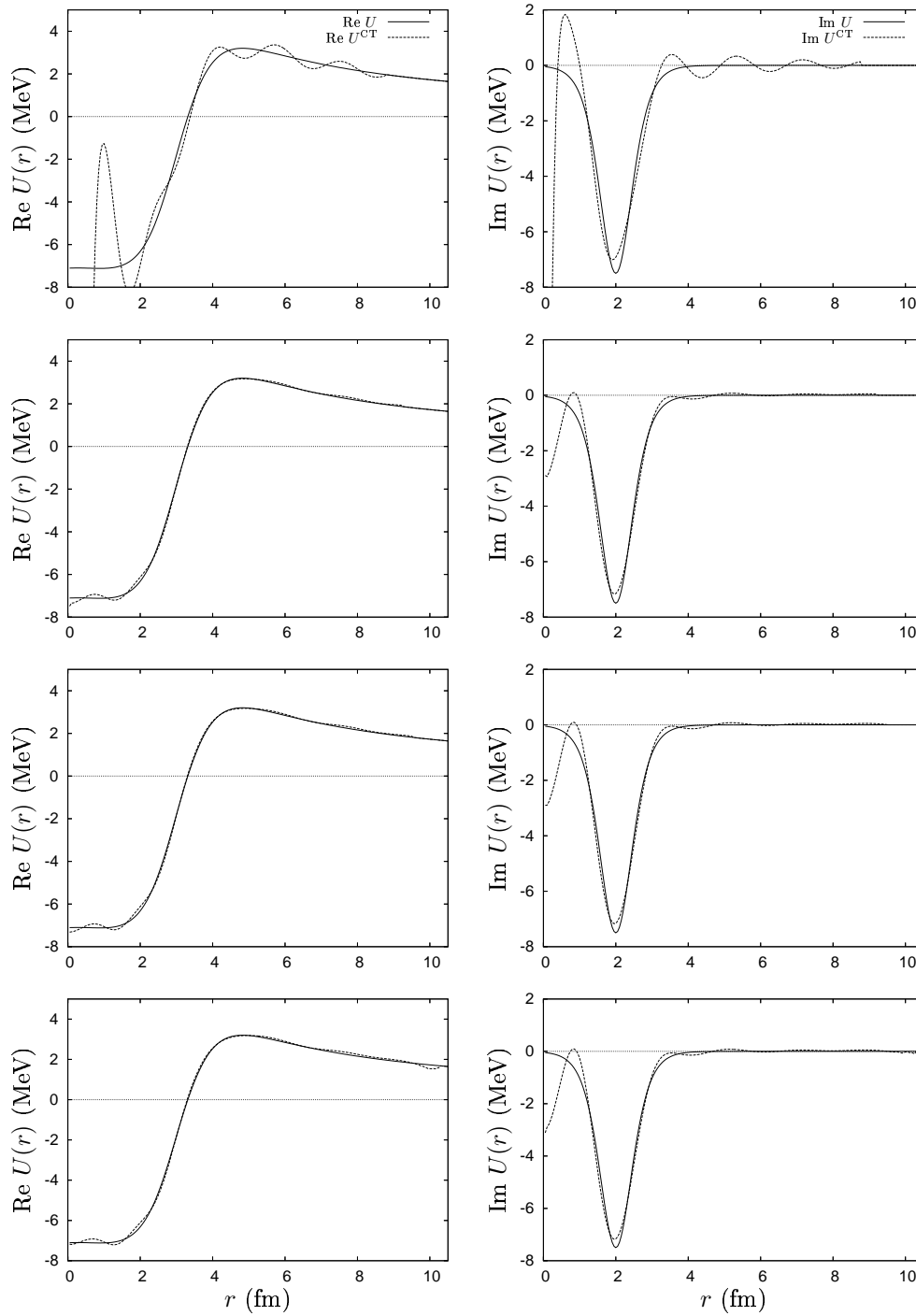


Links:  $\chi_U^2$ -Wert als Mass für die mittlere quadratische Abweichung des Inversionspotentials von dem Originalpotential. Rechts:  $\chi_S^2$ -Wert als Mass für die mittlere quadratische Abweichung der CT-Streumatrix von der Eingabe-Streumatrix.

## 5.2 Inversion bei festem Abschneidedrehimpuls $\ell_{\max}$ und verschiedenen Werten von $r_a$

Die Berechnung der CT-Inversionspotentiale in diesem Unterkapitel erfolgte bei dem festen Abschneidedrehimpuls  $\ell_{\max} = 15$  und verschiedenen Werten des Anpassungsradius  $r_a$  in dem Bereich  $8.75 \text{ fm} \leq r_a \leq 10.75 \text{ fm}$ . Der optimale Anpassungsradius für die Transformation der S-Matrix liegt in dem Bereich, in dem das Woods-Saxon-Potential  $V(r)$  aus Gleichung (5.1) näherungsweise auf Null abgefallen ist. Wie aus Abb. 5.3 ersichtlich ist, liefert die Inversion bei den Werten  $r_a = 8.75 \text{ fm}$  und  $r_a = 9.0 \text{ fm}$  nur unzureichende Ergebnisse (siehe auch Abb. 5.4 für  $r_a = 8.75 \text{ fm}$ ), gekennzeichnet durch grosse  $\chi_U^2$ - und  $\chi_S^2$ -Werte. Ab einem Anpassungsradius  $r_a = 9.25 \text{ fm}$  sind die Inversionspotentiale von guter Qualität, wobei der durch minimale  $\chi_U^2$ - und  $\chi_S^2$ -Werte gegebene optimale Anpassungsradius bei  $r_a = 9.25 \text{ fm}$  liegt.

Abbildung 5.4:  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: CT-Inversionspotentiale zu verschiedenen S-Matrix-Anpassungsradien  $r_a$ .



CT-Inversionspotentiale zu festem Abschneidedrehimpuls  $\ell_{\max} = 15$  und 4 verschiedenen Anpassungsradien  $r_a$  zur Transformation der S-Matrix. Werte von oben nach unten  $r_a = 8.75, 9.25, 9.5, 10.25$  fm.

Tabelle 5.2:  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: Inversionsdaten.

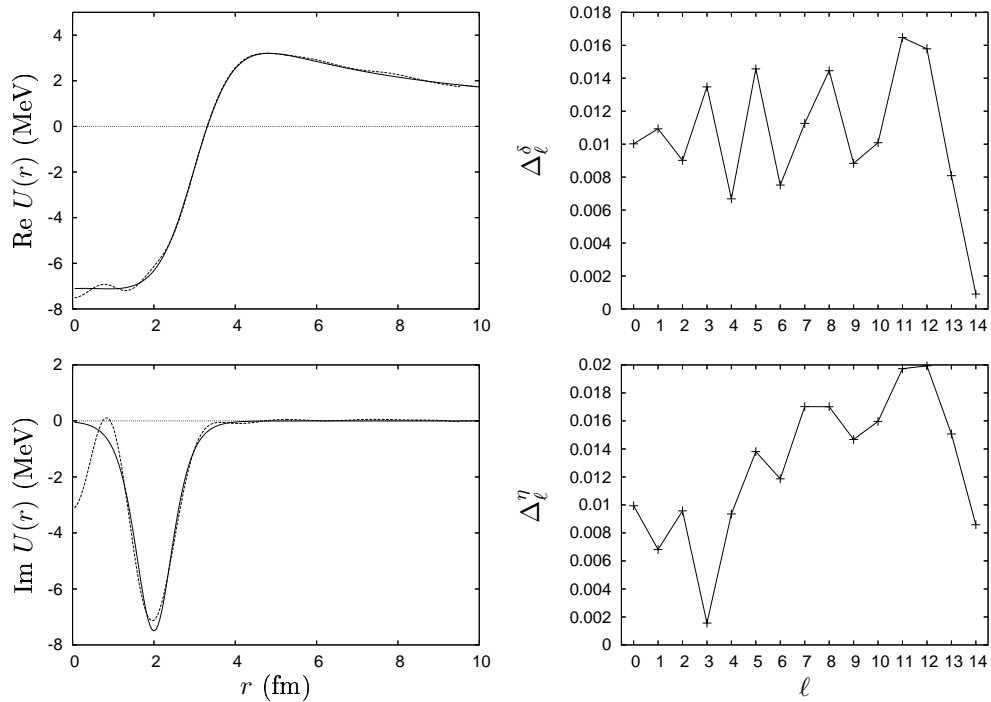
$\ell$	Re $L$	Im $L$	Re $\gamma_\ell$	Im $\gamma_\ell$	$\delta_\ell$	$\eta_\ell$	$\delta_\ell^{\text{CT}}$	$\eta_\ell^{\text{CT}}$
0	-0.4863	-0.2162	0.0980	-0.3574	-0.4267	0.5068	-0.4367	0.5168
1	0.5371	-0.1802	0.9350	-0.4698	2.0997	0.5673	2.0887	0.5742
2	1.5433	-0.2858	2.6542	-0.0603	1.7764	0.4067	1.7674	0.4163
3	2.6589	-0.3322	3.9917	2.1814	1.3818	0.3524	1.3683	0.3540
4	3.8199	-0.2092	2.5591	2.5835	0.9720	0.5179	0.9653	0.5273
5	5.0028	-0.0732	-0.2790	0.0877	0.5601	0.7951	0.5455	0.8089
6	6.1367	-0.0145	-3.0866	-1.0647	0.2484	0.9554	0.2409	0.9673
7	7.1772	-0.0025	-3.8097	-0.9347	0.0983	0.9923	0.0871	1.0
8	8.1707	-0.0004	-3.7065	-0.6895	0.0379	0.9986	0.0234	1.0
9	9.1455	-0.0001	-3.2550	-0.5491	0.0145	0.9997	0.0056	1.0
10	10.1165	0.0000	-2.8299	-0.4468	0.0055	0.9999	-0.0046	1.0
11	11.0904	0.0000	-2.3503	-0.3893	0.0021	1.0	-0.0144	1.0
12	12.0664	0.0000	-1.9641	-0.3417	0.0008	1.0	-0.0150	1.0
13	13.0445	0.0000	-1.4697	-0.3108	0.0003	1.0	-0.0078	1.0
14	14.0259	0.0000	-1.0821	-0.2879	0.0001	1.0	-0.0008	1.0

Einträge von links nach rechts: Partialwelle  $\ell$ , Real- und Imaginärteil des generalisierten Drehimpulses  $L$ , Real- und Imaginärteil der Entwicklungsfunktionen  $\gamma_\ell$  des symmetrischen Kerns aus Gleichung (3.2) sowie Eingabe-Streuphasen  $\delta_\ell$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell$  und die von dem CT-Inversionspotential hervorgerufenen Streuphasen  $\delta_\ell^{\text{CT}}$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell^{\text{CT}}$ .

### 5.3 Inversionspotential für die Parameterwahl $\ell_{\text{max}} = 14$ und $r_a = 9.25$ fm

In diesem letzten Unterkapitel über die Inversion von synthetischen Streudaten, die auf optischen Potentialen mit asymptotischem Coulombabfall beruhen, ist ein CT-Inversionspotential der Streudaten des  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotentials aus Gleichung (5.1) berechnet worden. Das Ergebnis der Inversionsprozedur mit der Parameterwahl  $\ell_{\text{max}} = 14$  und  $r_a = 9.25$  fm ist in Abb. 5.5 aufgetragen und die zugehörigen Inversionsdaten sind in Tab. 5.2 aufgelistet.

Abbildung 5.5:  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: Inversionspotential für die Parameterwahl  $\ell_{\max} = 14$  und  $r_a = 9.25$  fm.



Links: CT-Inversionspotential  $U(r)$  für das Streusystem  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$  bei der Schwerpunktsenergie  $E_{\text{c.m.}} = 25$  MeV, dem Abschneidedrehimpuls  $\ell_{\max} = 14$  und dem Anpassungsradius  $r_a = 9.5$  fm zur Transformation der S-Matrix. Rechts: Betrag  $\Delta_\ell^\delta$  der Differenz zwischen den Eingabe-Streuphasen und den von dem Inversionspotential hervorgerufenen Streuphasen und der Betrag  $\Delta_\ell^\eta$  der Differenz zwischen den Eingabe-Absorptionskoeffizienten und den von dem Inversionspotential hervorgerufenen Absorptionskoeffizienten.

# Kapitel 6

## Inversion experimentell begründeter Streudaten

Um die Leistungsfähigkeit der CT-Methode bei der Inversion experimenteller Streudaten unter Beweis zu stellen, werden zunächst CT-Inversionspotentiale präsentiert, deren Inversions-Input aus rein reellen Streuphasen  $\delta_\ell$  besteht. Diese Streuphasen gehören zur  $n$ - $\alpha$ -Streuung unterhalb der ersten inelastischen Schwellenergie. Danach werden CT-Potentiale durch Inversion komplexwertiger Streuphasen ermittelt und vorgestellt. Die entsprechenden komplexwertigen Phasen gehen aus einer  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung oberhalb der ersten inelastischen Schwellenergie hervor.

### 6.1 $n$ - $\alpha$ -Streuung im Bereich $11.92 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 18.95 \text{ MeV}$

Die in Tab. 6.1 aufgeführten Streuphasen  $\delta_\ell$  des  $n$ - $\alpha$ -Streusystems im Energiebereich  $11.92 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 18.95 \text{ MeV}$  wurden von Lun et al. [15] unter Verwendung unitärer Eigenschaften der Streufunktion ermittelt. Die gemessenen differentiellen Wirkungsquerschnitte stammten von Shamu et al. [25]. Die entsprechenden CT-Inversionspotentiale zeigt Abb. 6.1. Als Mass für die Qualität der Inversion dienen die mit dem CT-Inversionspotential berechneten Phasen  $\delta_\ell^{\text{CT}}$ . Die vorliegenden Streuphasen wurden bereits mit der NS-Methode invertiert [2], die systembedingt auf eine Singularität nahe dem Koordinatenursprung führt. Diesem Ergebnis steht der endliche Wert des CT-Inversionspotentials am Ursprung gegenüber, der in Tab. 6.2 für die 4 betrachteten Energiewerte aufgelistet ist. Die Potentialtiefe  $U_0^{\text{CT}}$  der Inversionspotentiale erweist sich als energieabhängig: Die Potentialtiefe wächst mit zunehmender Streuenergie. Dieses Verhalten kann quantitativ durch den funktionalen Zusammenhang

$$U_0^{\text{fit}}(E) = - (58.63 + 6.16 \cdot 10^{-8} E^{6.69}) \text{ MeV} \quad (6.1)$$

erfasst werden. Weiter wurden analytische Potentiale in WS- bzw. Gauss-Form

$$\begin{aligned} U^{\text{WS}}(r) &= U_0^{\text{fit}} / (1 + \exp[(r - R)/a]) \\ U^{\text{G}}(r) &= U_0^{\text{fit}} \exp[-r^2/\sigma^2] \end{aligned}$$

an die CT-Inversionspotentiale angepasst und ein  $\chi^2$ -Test gemäß

$$\chi_{\text{WS/G}}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{U^{\text{WS/G}}(r_i) - U^{\text{CT}}(r_i)}{1 \text{ MeV}} \right|^2$$

durchgeführt. Die entsprechenden Potentiale sind in Abb. 6.2, die Fit-Parameter und  $\chi^2$ -Werte in Tab. 6.2 aufgeführt. Der  $\chi^2$ -Test liefert die mittlere quadratische Abweichung des WS- bzw. Gauss-Fit-Potentials von dem CT-Inversionspotential unter Berücksichtigung von  $N = 500$  Potential-Stützstellen. Die Summation startet bei dem Wert  $r_i = 0.05 \text{ fm}$ .

Bei den drei Energiewerten  $E_{c.m.} = 11.92, 13.12$  und  $18.95 \text{ MeV}$  liefert der  $\chi^2$ -Test eine bessere Übereinstimmung zwischen WS-Fit-Potential und CT-Inversionspotential. Lediglich bei  $E_{c.m.} = 16.00 \text{ MeV}$  zeigt das Gauss-Fit-Potential eine geringfügig bessere Qualität. Wie aus Abb. 6.2 hervorgeht, gibt das Gauss-Fit-Potential zwar den Wert des CT-Inversionspotentials am Ursprung besser wieder, weist aber im Bereich bis  $r \approx 5.5 \text{ fm}$  eine prinzipiell grössere Abweichung von dem Inversionspotential als das WS-Fit-Potential auf. Hierin hat das Verhalten der  $\chi^2$ -Werte seine Ursache. Für radiale Abstände oberhalb von  $2 \text{ fm}$  stimmen die CT- und NS-Inversionspotentiale gut überein.

Die Reichweite und Form der CT-Inversionspotentiale ist vergleichbar zu den lokalen Potentialen, die im Kontext einer vielteilchentheoretischen Behandlung von N. Vinh Mau [27] erhalten wurden. Das  $n$ - $\alpha$ -Potential in [27] wurde für drei effektive Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen mit einem mikroskopischen Modell berechnet. Es wurden Serber, Brink-Boeker und Campi-Sprung Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen verwendet, um die Antisymmetrisierung des Neutrons und der Nukleonen des  $\alpha$ -Teilchens zu berücksichtigen. Die lokalen  $n$ - $\alpha$ -Potentiale, die mit der Serber und der Brink-Boeker Wechselwirkung berechnet wurden sind gaussförmig und für Werte von  $r > 4 \text{ fm}$  nahezu Null.

Insgesamt sind die CT-Inversionspotentiale sehr glatt und geben die Input-Phasen sehr gut wieder.

Tabelle 6.1:  $n$ - $\alpha$ -Streuung: Inversionsdaten.

$E_{\text{lab}}$ (MeV)	$E_{\text{c.m.}}$ (MeV)	$\ell$	$L$	$\gamma_\ell$	$\delta_\ell^{\text{orig}}$	$\delta_\ell^{\text{CT}}$	$\Delta_\ell$	$\chi_S^2 \cdot 10^3$
14.9	11.92	0	-1.616	-0.302	1.824	1.809	0.016	0.78
		1	0.455	0.586	1.180	1.169	0.011	
		2	1.888	0.619	0.286	0.300	0.014	
		3	3.002	-0.015	0.109	0.093	0.016	
		4	4.019	-0.176	0.000	0.012	0.012	
16.4	13.12	0	-1.797	-0.357	1.846	1.844	0.002	0.22
		1	0.403	0.334	1.423	1.407	0.016	
		2	1.848	0.766	0.361	0.366	0.005	
		3	3.005	-0.040	0.122	0.120	0.002	
		4	4.001	-0.009	0.034	0.033	0.001	
20.0	16.00	0	-1.712	-0.346	1.742	1.743	0.001	0.20
		1	0.434	0.464	1.356	1.342	0.014	
		2	1.876	0.666	0.315	0.321	0.007	
		3	3.019	-0.150	0.096	0.094	0.002	
		4	4.008	-0.070	0.022	0.024	0.002	
23.7	18.95	0	-1.665	-0.327	1.733	1.736	0.003	0.29
		1	0.446	0.528	1.287	1.269	0.018	
		2	1.886	0.621	0.301	0.301	0.001	
		3	3.028	-0.220	0.075	0.076	0.002	
		4	3.986	0.130	0.053	0.050	0.003	

Einträge von links nach rechts: Energie des Neutrons im lab. und c.m. System, Input-Drehimpulse  $\ell$ , Output-Drehimpulse  $L$  und Entwicklungskoeffizienten  $\gamma_\ell$  des symmetrischen Kerns, Input-Phasenverschiebungen  $\delta_\ell^{\text{orig}}$ , Output-Phasenverschiebungen  $\delta_\ell^{\text{CT}}$  und Betrag  $\Delta_\ell$  deren Differenzen sowie  $\chi^2$ -Test der Streumatrix  $\chi_S^2$ .

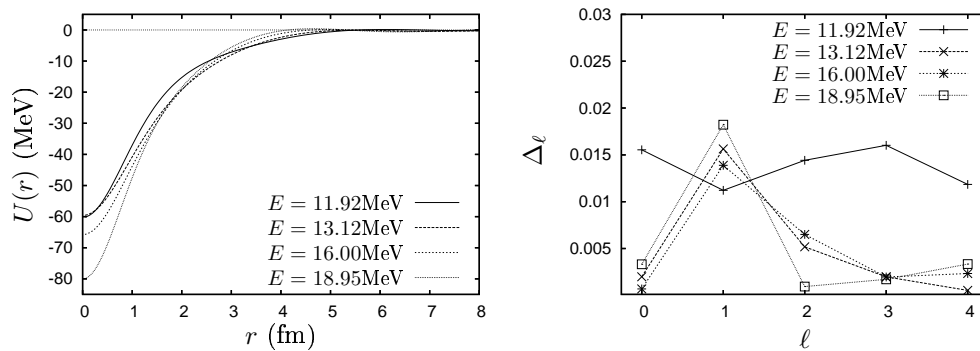
Tabelle 6.2:  $n$ - $\alpha$ -Streuung: Daten bezüglich der Anpassung analytischer Potentiale mit WS- und Gauss-Form an die  $n$ - $\alpha$ -Inversionspotentiale.

$E_{\text{c.m.}}$ (MeV)	$U_0^{\text{CT}}$ (MeV)	$U_0^{\text{fit}}$ (MeV)	$R$ (fm)	$a$ (fm)	$\sigma$ (fm)	$\chi_{\text{WS}}^2$	$\chi_{\text{G}}^2$
11.92	-60.22	-59.594	1.393	0.601	1.664	1.700	1.999
13.12	-59.63	-60.433	1.543	0.653	1.850	0.900	1.389
16.00	-65.78	-65.543	1.489	0.586	1.772	0.974	0.939
18.95	-80.03	-80.060	1.299	0.535	1.553	1.529	1.843

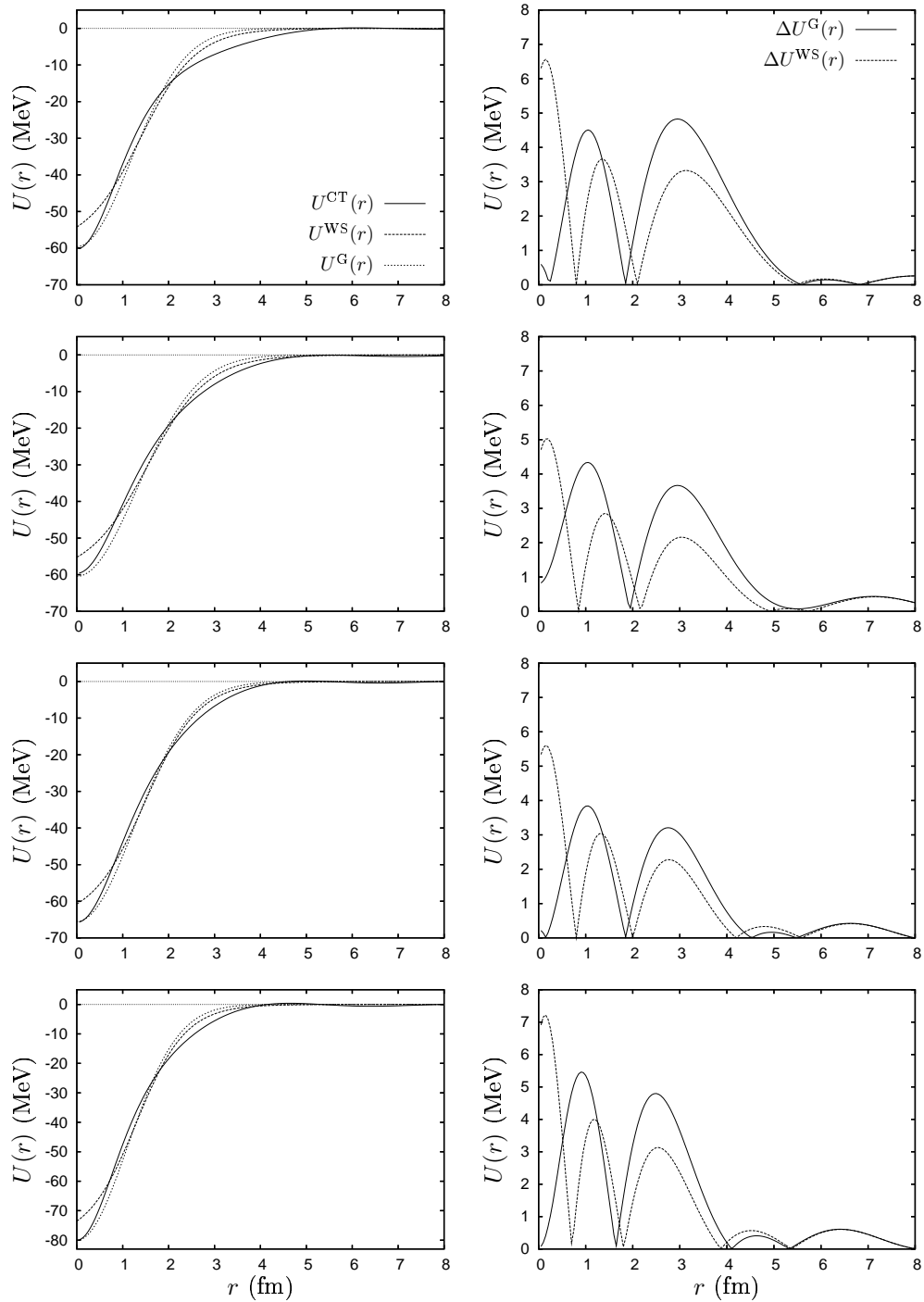
Einträge von links nach rechts: Energie des Neutrons im c.m. System, Potentialtiefen  $U_0^{\text{CT}}$ ,  $U_0^{\text{fit}}$ , Woods-Saxon-Fit-Parameter  $R$  (fm),  $a$  (fm) und Gauss-Fit-Parameter  $\sigma$  (fm) sowie der  $\chi^2$ -Wert für WS- bzw. Gauss-Fit.



Abbildung 6.1:  $n$ - $\alpha$ -Streuung: Inversionspotentiale bei 4 verschiedenen Energien im c.m. System.



Links: CT-Inversionspotentiale, rechts: Betrag der Differenz der Original- und CT-Phasen ( $\Delta_\ell$ ).

Abbildung 6.2:  $n$ - $\alpha$ -Streuung: Inversionspotentiale, WS- und Gauss-Fit der Inversionspotentiale.

Energiezuordnung von oben nach unten:  $E_{c.m.} = 11.92, 13.12, 16.00, 18.95$  MeV. Links: CT-Inversionspotentiale, WS- und Gauss-Fit-Potentiale. Rechts: Betrag der Differenz zwischen WS- und Gauss-Fit-Potential zu CT-Inversionspotential:  $\Delta U^{WS/G}(r) = |U^{WS/G}(r) - U^{CT}(r)|$ .

## 6.2 $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung im Bereich $8.22 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 11.08 \text{ MeV}$

Die experimentell bestimmten, komplexwertigen Phasen der  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung im c.m. Energiebereich  $8.22 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 11.08 \text{ MeV}$  wurden von Toronow et al. [26] durch eine Phasenanalyse der entsprechenden totalen Wirkungsquerschnitte ermittelt. Es handelt sich hierbei um die Streuung eines Spin-1/2-Teilchens an einem spinlosen Target. Ausgangspunkt der theoretischen Beschreibung eines solchen Streuprozesses ist die radiale Schrödingergleichung

$$\left\{ \hat{D}^0(\rho) - \rho^2 \left[ V_0(\rho) + \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}}{\hbar^2} V_{\text{SO}}(\rho) \right] \right\} \varphi_\ell(\rho) = \ell(\ell + 1) \varphi_\ell(\rho) \quad (6.2)$$

mit dem freien Schrödingeroperator  $\hat{D}_0(\rho)$ , dem Zentralpotential  $V_0(r)$  und dem Spin-Orbit-Potential  $V_{\text{SO}}(\rho)$ . Das Produkt  $\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}$  nimmt für den Fall von Spin-1/2-Teilchen zwei Werte für jede Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  an:

$$2 \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}}{\hbar^2} = \begin{cases} a_\ell^+ \equiv \ell & \text{für } j = \ell + 1/2 \\ a_\ell^- \equiv -(\ell + 1) & \text{für } j = \ell - 1/2 \end{cases}, \quad (6.3)$$

wobei  $j$  die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses ist. Einsetzen der Beziehung (6.3) in Gleichung (6.2) liefert für jeden  $\ell$ -Wert zwei entkoppelte Radialgleichungen. Diese können separat gelöst werden und führen zu den Phasenverschiebungen  $\delta_\ell^\pm$ , wobei sich die Indizes  $\pm$  auf den jeweiligen Gesamtdrehimpuls  $j = \ell \pm 1/2$  beziehen.

Leeb, Huber und Fiedeldey (LHF) entwickelten das in [14] vorgestellte Näherungsverfahren, welches, ausgehend von Streudaten bei fester Energie, die Berechnung von Zentral- und Spin-Orbit-Potentialen für die Streuung von Spin-1/2-Teilchen an spinlosen Targets ermöglicht. Das ISP bei fester Energie mit Berücksichtigung von Spin-Orbit-Potentialen wird auf das ISP bei fester Energie für Zentralpotentiale reduziert. Im weiteren wird die Rekonstruktion des Zentralpotentials  $V_0(\rho)$  aus den gemessenen Streuphasen verfolgt.

Die LHF-Methode basiert auf einer Entwicklung der Phasenverschiebungen, wobei der Einfluss des Spin-Orbit-Potentials durch eine Distored Wave Born Approximation berücksichtigt wird. Leeb, Huber und Fiedeldey konstruierten in diesem Zusammenhang die Hilfsphasen

$$\delta_\ell = \frac{1}{2\ell + 1} [(\ell + 1)\delta_\ell^+ + \ell\delta_\ell^-], \quad (6.4)$$

die via Inversion auf das Zentralpotential  $U(r)$  führen.

Um das Verhalten des Realteils der CT-Inversionspotentialtiefe zu studieren, wurden 21 Phasensätze verschiedener Streuenergien zu Potentialen invertiert. Eine

Auswahl von 3 CT-Inversionspotentialen zeigt Abb. 6.3; die korrespondierenden Inversionsdaten sind in Tab. 6.3 aufgeführt (Gesamtübersicht der 21 CT-Inversionspotentiale siehe Anhang A.4 ab Seite 56); die entsprechenden Potentialtiefen sind in Tab. 6.4 aufgeführt. Um das Verhalten der Potentialtiefe quantitativ zu erfassen bietet es sich an, die 2 Teilbereiche

$$\begin{aligned} 8.22 \text{ MeV} &\leq E_{c.m.}^1 \leq 9.87 \text{ MeV} \\ 10.08 \text{ MeV} &\leq E_{c.m.}^2 \leq 11.08 \text{ MeV} \end{aligned}$$

zu betrachten. Im Bereich  $E_{c.m.}^1$  nimmt der Realteil der Potentialtiefe mit zunehmender Energie ab, im Bereich  $E_{c.m.}^2$  steigt er mit zunehmender Energie an (siehe Abb. 6.4). Die Potentialtiefe des Imaginärteils bezieht sich auf das Minimum des Imaginärteils im Bereich von 5.5 bis 7 fm.

In beiden Energieintervallen wurde eine lineare Regression (Abb. 6.4) für den Realteil und den Imaginärteil der Inversionspotentialtiefen durchgeführt. Die Energieabhängigkeit der Potentialtiefen wird durch die folgenden Gleichungen gut beschrieben:

$$\begin{aligned} \text{Re } U_0^{\text{fit-1}} &= -28.43 \cdot (1 - 0.12 \cdot (E - 8.22)) \text{ MeV} & E \in E_{c.m.}^1 \\ \text{Im } U_{\text{min}}^{\text{fit-1}} &= -1.51 \cdot (1 + 0.84 \cdot (E - 8.22)) \text{ MeV} & E \in E_{c.m.}^1 \\ \text{Re } U_0^{\text{fit-2}} &= -72.36 \cdot (1 + 0.03 \cdot (E - 10.08)) \text{ MeV} & E \in E_{c.m.}^2 \\ \text{Im } U_{\text{min}}^{\text{fit-2}} &= -2.30 \cdot (1 - 0.17 \cdot (E - 10.08)) \text{ MeV} & E \in E_{c.m.}^2 \end{aligned}$$

Ein analoger funktionaler Zusammenhang zwischen Potentialtiefe und Energie wurde von Woye et al. [28] durch Anpassung optischer Modellpotentiale an die gemessenen Wirkungsquerschnitte festgestellt. Diese optischen Modellpotentiale setzten sich aus einem Woods-Saxon förmigen Zentralpotential, dessen Imaginärteil in Volumen- und Oberflächenabsorption aufgeteilt ist, sowie einem komplexwertigen Spin-Orbit-Potential zusammen.

Charakteristisch für die mit der CT-Methode erhaltenen Zentralpotentiale ist ein Maximum im Realteil im Bereich von 3 bis 5 fm und ein Minimum im Imaginärteil im Bereich 5.5 bis 7 fm.

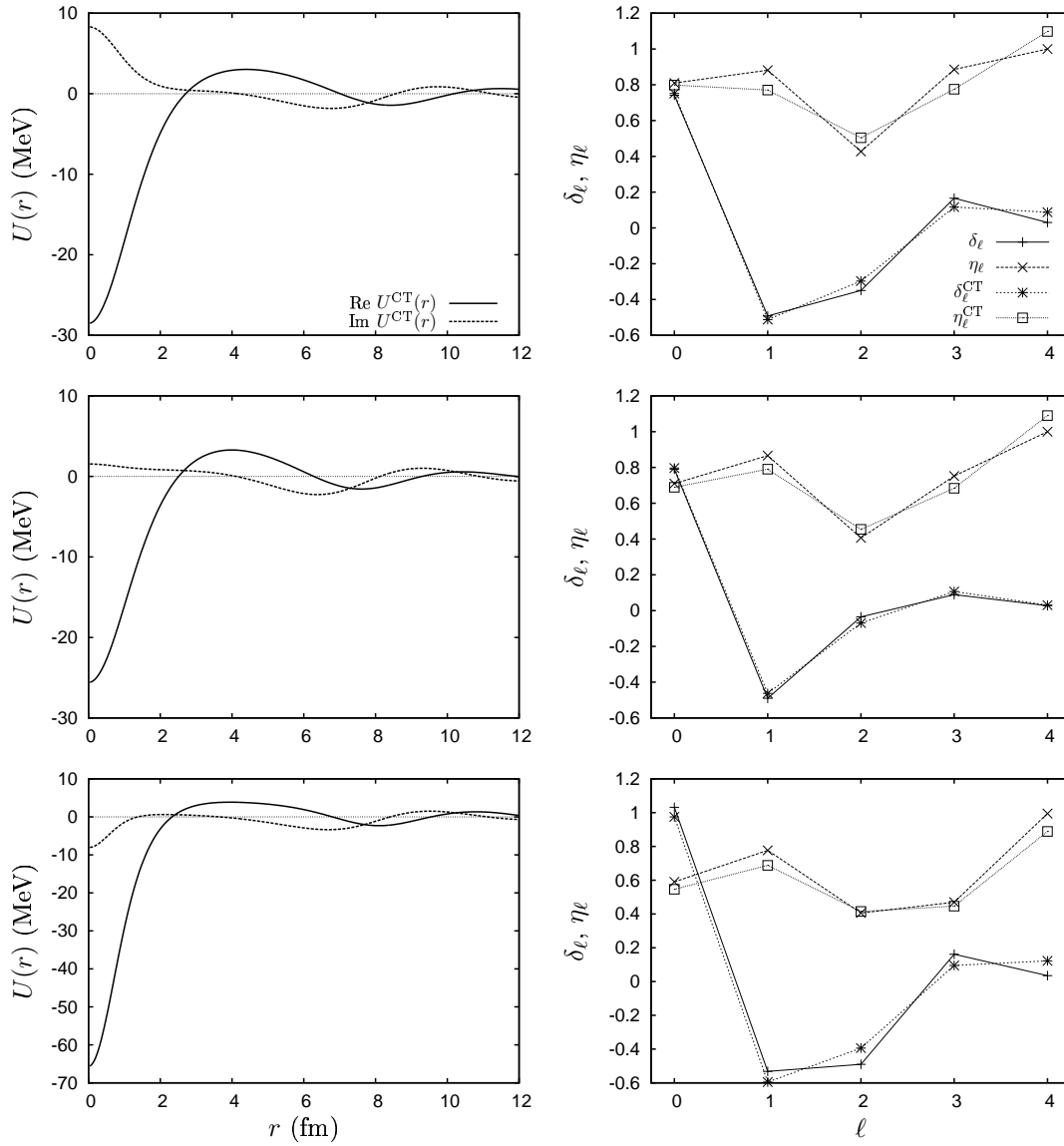
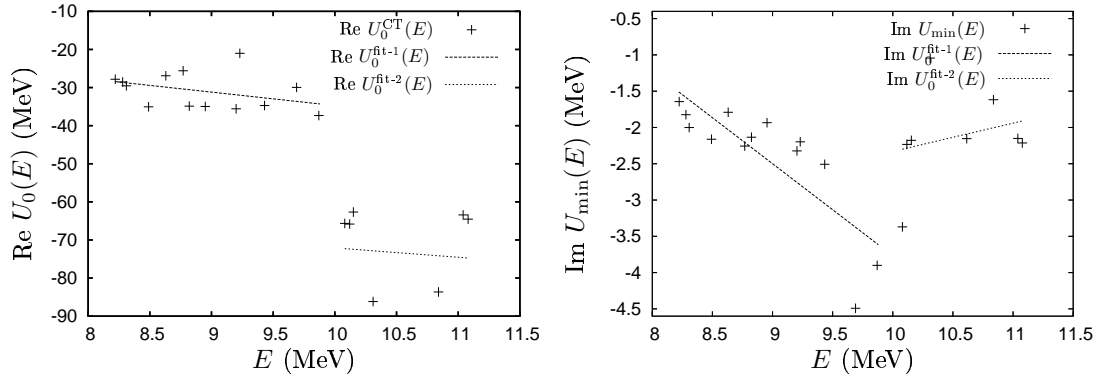
Abbildung 6.3:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: CT-Inversionspotentiale der Streudaten aus Tab. 6.3.

Abbildung 6.4:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: CT-Inversionspotentialtiefe  $U_0^{\text{CT}}(E)$  als Funktion der Energie im c.m. System.

Links: Realteil mit den linearen Regressionen der Energiebereiche  $E_{\text{c.m.}}^{1,2}$ , rechts: Imaginärteil der Inversionspotentialtiefe.

Tabelle 6.3:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionsdaten.

$E_{\text{c.m.}}$	$\ell$	$\text{Re } L$	$\text{Im } L$	$\text{Re } \gamma_\ell$	$\text{Im } \gamma_\ell$	$\delta_\ell$	$\eta_\ell$	$\delta_\ell^{\text{CT}}$	$\eta_\ell^{\text{CT}}$	$\chi_S^2 \cdot 10^2$
8.28	0	-0.5019	0.0456	0.3932	-0.0633	0.7418	0.8100	0.7515	0.7984	1.30
	1	1.1922	0.0456	-0.8542	0.0080	-0.4922	0.8813	-0.5122	0.7705	
	2	2.2567	-0.2801	-1.2244	1.5730	-0.3498	0.4272	-0.2972	0.5039	
	3	2.9021	-0.0024	0.5666	0.1627	0.1658	0.8857	0.11660	0.7751	
	4	3.9777	0.0000	0.0907	0.5612	0.0304	1.0	0.08777	1.0	
8.77	0	-0.4480	-0.0149	0.3661	-0.0856	0.7906	0.7100	0.7967	0.6894	0.50
	1	1.2448	0.0639	-1.0468	0.1541	-0.4899	0.8664	-0.4628	0.7904	
	2	2.1299	-0.3394	-0.2625	1.4488	-0.0349	0.4066	-0.0694	0.4543	
	3	2.9488	-0.0701	0.1841	0.4859	0.0895	0.7520	0.1068	0.6837	
	4	3.9559	0.0000	0.3578	0.1866	0.0273	1.0	0.0309	1.0	
10.08	0	-0.7633	-0.1171	0.2842	-0.2472	1.0315	0.5900	0.9749	0.5466	1.42
	1	1.1740	-0.0288	-0.8315	0.6254	-0.5323	0.7766	-0.5951	0.6877	
	2	2.9111	-0.5084	-2.0360	1.7598	-0.4901	0.4060	-0.3940	0.4151	
	3	2.5262	-0.0339	0.5121	1.7209	0.1616	0.4698	0.09527	0.4466	
	4	4.0060	-0.1023	-0.3635	0.7712	0.0347	0.9944	0.1224	0.8889	

Einträge von links nach rechts: Energie des Neutrons im c.m. System in MeV, Input-Drehimpulse  $\ell$ , Output-Drehimpulse  $L$  und Entwicklungskoeffizienten  $\gamma_\ell$  des symmetrischen Kerns. Input-Phasenverschiebungen  $\delta_\ell$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell$ , Output-Phasenverschiebungen  $\delta_\ell^{\text{CT}}$  und Absorptionskoeffizienten  $\eta_\ell^{\text{CT}}$  sowie  $\chi^2$ -Test der Streumatrix  $\chi_S^2$ .

Tabelle 6.4:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentialtiefen und Potentialcharakteristika.

$E_{\text{c.m.}}$	$E_{\text{lab}}$	Re $U_0$	Im $U_0$	$r_{U_{\text{max}}}$	Re $U_{\text{max}}$	$r_{U_{\text{min}}}$	Im $U_{\text{min}}$
8.22	8.91	-27.817	5.733	4.36	2.975	6.72	-1.644
8.28	8.97	-28.533	8.319	4.44	3.020	6.76	-1.824
8.31	9.00	-29.543	7.289	4.36	3.015	6.84	-2.001
8.49	9.20	-35.060	5.363	4.32	3.267	6.84	-2.163
8.63	9.35	-26.904	3.045	4.96	1.941	6.80	-1.791
8.77	9.50	-25.597	1.544	4.00	3.281	6.40	-2.256
8.82	9.56	-34.875	4.664	4.28	3.274	6.60	-2.134
8.95	9.70	-34.966	5.142	4.24	3.359	6.60	-1.935
9.20	9.96	-35.572	3.995	4.12	3.695	6.40	-2.323
9.23	10.00	-21.007	2.079	4.20	1.709	5.76	-2.198
9.43	10.22	-34.717	1.555	3.96	3.820	6.24	-2.507
9.69	10.50	-29.962	6.042	4.08	3.760	6.32	-4.491
9.87	10.69	-37.348	-0.099	4.08	3.759	6.32	-3.900
10.08	10.92	-65.664	-8.071	3.96	3.866	6.68	-3.369
10.12	10.96	-65.825	4.506	4.44	2.447	6.12	-2.233
10.15	11.00	-62.676	6.291	4.44	2.498	6.12	-2.177
10.31	11.17	-86.178	17.496	3.40	4.036	5.56	-1.044
10.62	11.50	-95.142	9.849	4.96	4.165	6.76	-2.154
10.84	11.74	-83.658	1.446	3.72	4.093	6.40	-1.618
11.04	11.96	-63.427	-2.452	4.76	3.139	6.72	-2.151
11.08	12.00	-64.543	-3.127	4.72	3.217	6.64	-2.213

Einträge von links nach rechts: Energie des Neutrons im c.m. und lab. System in MeV, CT-Inversionspotentialtiefe Re  $U_0$ , Im  $U_0$  in MeV sowie Lage und Werte des Maximums des Realteils ( $r_{U_{\text{max}}}$  (fm), Re  $U_{\text{max}}$  (MeV) ) und des Minimums im Imaginärteil ( $r_{U_{\text{min}}}$  (fm), Im  $U_{\text{min}}$  (MeV)).

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde das Verfahren von Cox und Thompson (CT) zur Lösung des Inversen Streuproblems (ISP) bei fester Energie auf den Fall eines optischen Potentials mit asymptotischem Coulombabfall erweitert. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich dabei auf elastische Streuprozesse. Die Methode basiert auf einer Integralgleichung, die eine Lösung der Schrödingergleichung zu einem bekannten Referenzpotential auf die Lösung der Schrödingergleichung zum unbekanntem Inversionspotential transformiert. Diese Integraltransformation wird durch einen Transformationskern vermittelt, der im Kontext der CT-Methode nach regulären Riccati-Bessel Funktionen entwickelt wird, die nach nicht ganzzahligen, komplexwertigen Drehimpulsen indiziert sind. Um Auskunft über diese verallgemeinerten Drehimpulse zu erhalten, muss ein gekoppeltes System nichtlinearer Gleichungen gelöst werden, welches die S-Matrix des zugrundeliegenden Streuprozesses enthält. Das gekoppelte System nichtlinearer Gleichungen geht aus asymptotischen Betrachtungen der erwähnten Integralgleichung und des Transformationskernes hervor. Das Inversionspotential wird dann durch eine einfache Differentiation aus dem Transformationskern gewonnen.

Die Vorteile der CT-Methode gegenüber der bereits erfolgreichen Newton-Sabatier-(NS)-Methode bestehen darin, dass sie für die Inversion einer endlichen Menge von Eingabestreuphasen konstruiert wurde und zu einem endlichen Wert des Potentials am Koordinatenursprung und einem nichtverschwindenden ersten Moment des Potentials führt. Damit wird der Zugang zu einer anderen Potentialfamilie als im NS-Fall ermöglicht.

Die CT-Methode wurde zunächst auf den Fall eines asymptotisch verschwindenden optischen Potentials erweitert und durch eine Transformation der S-Matrix auf den allgemeineren Fall eines asymptotischen Coulombpotentials ausgedehnt. Dabei wird zunächst ein fester Anpassungsradius  $r_a$  definiert und die S-Matrix des geladenen Streusystems unter Berücksichtigung der Stetigkeit der logarithmischen Ableitung der Wellenfunktion am Punkt  $r_a$  auf eine S-Matrix transformiert, die



für ein asymptotisch konstantes Potential gilt. Die transformierte S-Matrix kann dann unter Verwendung der CT-Methode, zu einem Potential invertiert werden, das für Radien  $r \leq r_a$  mit dem gesuchten Inversionspotential übereinstimmt und für Radien  $r \geq r_a$  ein konstantes Potential zwischen den Streupartnern liefert.

Um das Inversionsprogramm zu testen, wurde ein komplexwertiges, kastenförmiges Modellpotential mit asymptotischem Coulombabfall untersucht. Zu diesem Zweck wurde die S-Matrix des Kastenpotentials durch Integration der radialen Schrödingergleichung bestimmt und als Input für die Inversionsprozedur verwendet. Die Inversionspotentiale stimmen gut mit den ursprünglichen Kastenpotentialen überein, wobei sich die Qualität des Inversionsergebnisses durch Variation des Anpassungsradius optimieren lässt. Die Oszillationen des Inversionspotentials um das ursprüngliche Potential sind im Bereich der Unstetigkeitsstelle des Kastenpotentials am größten und erweisen sich als unabhängig vom Anpassungsradius.

Weiter wurden Streuphasen zur elastischen  $n$ - $\alpha$ -Streuung bei 4 unterschiedlichen Energien zu Potentialen invertiert, an die analytische Potentiale mit Woods-Saxon- und Gauss-Form angepasst werden konnten. Zudem gelang die Inversion von 21 Streuphasensätzen zur inelastischen  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung, bei der das Verhalten der Potentialtiefe untersucht wurde und mit bestehenden Beiträgen aus der Literatur verglichen werden konnte.

Zum Test der CT-Methode zur Berechnung optischer Potentiale mit einem asymptotischem Coulombpotential wurden in dieser Arbeit lediglich Modellpotentiale, d.h. synthetische Streudaten, herangezogen. In diesem Zusammenhang wäre die Inversion experimentell gewonnener Streudaten, z.B. Daten des symmetrischen  $^{12}\text{C}$ - $^{12}\text{C}$ -Streusystems, von Interesse. Solche Streudaten wurden bereits mit der mNS-Methode [4] behandelt. Die erfolgreiche Inversion mit der CT-Methode, die auf Inversionspotentiale einer anderen Potentialfamilie führt, steht noch aus.

# Anhang A

## A.1 Überführung der Matrixelemente $M'_{\ell L}$ in die Form der Gl. (3.16)

Die durch die Elemente

$$M'_{\ell L} = \frac{W'[u_L(\rho), v_\ell(\rho)]}{L(L+1) - \ell(\ell+1)} \quad (\text{A.1})$$

definierte einfache Ableitung der Matrix  $M$  ist mit der Ableitung der Wronski-Determinanten

$$W'[u_L(\rho), v_\ell(\rho)] = u_L(\rho)v_\ell''(\rho) - u_L''(\rho)v_\ell(\rho) \quad (\text{A.2})$$

verknüpft. Unter Verwendung der freien Schrödingergleichungen der Riccati-Bessel- und der Weber-Schläfli-Funktionen

$$\rho^2[\partial_\rho^2 + 1] u_L(\rho) = L(L+1) u_L(\rho) \quad (\text{A.3})$$

$$\rho^2[\partial_\rho^2 + 1] v_\ell(\rho) = \ell(\ell+1) v_\ell(\rho) \quad (\text{A.4})$$

kann nach kreuzweisem Multiplizieren der Gleichung (A.3) mit der Funktion  $v_\ell(\rho)$  und der Gleichung (A.4) mit der Funktion  $u_L(\rho)$  die Identität

$$v_\ell(\rho)u_L''(\rho) - u_L(\rho)v_\ell''(\rho) = \frac{L(L+1) - \ell(\ell+1)}{\rho^2} v_\ell(\rho)u_L(\rho) \quad (\text{A.5})$$

abgeleitet werden, wodurch die Matrixelemente (A.1) in die Form

$$M'_{\ell L} = - \frac{v_\ell(\rho)u_L(\rho)}{\rho^2} \quad (\text{A.6})$$

umgeschrieben werden können.

## A.2 Das erste Moment und die Potentialtiefe des Inversionspotentials

Genau wie im Falle reellwertiger verallgemeinerter Drehimpulse  $L$  [8] erhält man das erste Moment des Inversionspotentials auch für den Fall komplexwertiger  $L$ -Werte aus der Beziehung

$$Q_1 = \int_0^\infty r U^{\text{CT}}(r) dr = \sum_{L \in T} b_L \quad , \quad (\text{A.7})$$

wobei die Größen  $b_L$  durch

$$b_L = \frac{\prod_{\ell \in S} (L - \ell)}{\prod_{\substack{L' \in T \\ L' \neq L}} (L - L')} \quad (\text{A.8})$$

gegeben sind.

Weiter erhält man den Wert des Inversionspotentials am Koordinatenursprung ebenso wie im Falle reellwertiger  $L$ -Werte nach einer Entwicklung der Besselfunktionen aus den Gleichungen (3.1) und (3.5) bis zur vierten Ordnung in der dimensionslosen Koordinaten  $\rho$  und Verwendung der Beziehung (2.9) zur Berechnung des Inversionspotentials [3] als

$$U_0^{\text{CT}} = \left[ Q - 2(1 - Q) \sum_{L \in T, \ell \in S} (G^{-1})_{L\ell} / (1 - 2\ell) \right] \cdot E_{\text{c.m.}} \quad , \quad (\text{A.9})$$

wobei  $G^{-1}$  die Inverse der aus den Elementen

$$G_{\ell L} = (\ell - L)^{-1} \quad (\text{A.10})$$

gebildeten Matrix  $G$  darstellt und

$$Q = \sum_{L \in T} b_L / (L + 3/2) \quad (\text{A.11})$$

gilt [8].

### A.3 Numerische Umsetzung

Zur Berechnung des Inversionspotentials verwendet die CT-Methode den in Kapitel 3.1 vorgestellten verallgemeinerten Drehimpuls  $L$ , dessen Wertevorrat  $T$  durch Lösung des gekoppelten Systems nichtlinearer Gleichungen (3.25) ermittelt wird. Für die technische Umsetzung ist es von Vorteil, die Gleichungen (3.25) in die Vektorgleichung

$$\mathbf{f}(\mathbf{L}) = \mathbf{S} - \mathbf{K}(\mathbf{L})$$

umzuformen. Die Dimension des Vektors  $\mathbf{f}(\mathbf{L})$  wird durch die Anzahl der Streuphasen festgelegt, die als Inversions-Input dienen. Bei einer Anzahl von  $n$  Eingabestreuphasen hat dieser Vektor gerade die Dimension  $\dim(\mathbf{f}) = n$ . Die Lösung des gekoppelten Systems nichtlinearer Gleichungen bedeutet dann, einen Lösungsvektor  $\mathbf{L}$  zu finden, so dass der Forderung

$$\mathbf{f}(\mathbf{L}) = \mathbf{0} \tag{A.12}$$

genüge getan wird. Die Komponenten

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{L}) \cdot \mathbf{e}_1 &= S_0 - \frac{1 + i\mathcal{K}_0^+}{1 - i\mathcal{K}_0^-} \\ \mathbf{f}(\mathbf{L}) \cdot \mathbf{e}_2 &= S_1 - \frac{1 + i\mathcal{K}_1^+}{1 - i\mathcal{K}_1^-} \\ &\dots \\ \mathbf{f}(\mathbf{L}) \cdot \mathbf{e}_n &= S_{n-1} - \frac{1 + i\mathcal{K}_{n-1}^+}{1 - i\mathcal{K}_{n-1}^-} \end{aligned}$$

des Vektors  $\mathbf{f}(\mathbf{L})$  sind dabei die einzelnen Gleichungen, die es simultan zu erfüllen gilt, und die  $\mathbf{e}_k$ ,  $k \in (1, \dots, n)$  stellen die Einheitsvektoren der entsprechenden Komponenten dar. Bevor eine Lösung der Gleichung (A.12) erreicht werden kann, muss zunächst eine Analyse des Gleichungssystems (3.25) vorgenommen werden, um einen geeigneten Ansatz für den Lösungsvektor  $\mathbf{L}$  zu finden. Dies ist notwendig, da der Erfolg der Lösung des gekoppelten Systems nichtlinearer Gleichungen stark von der Qualität der  $L$ -Startwerte abhängt. Praktisch ist eine Analyse des Gleichungssystems für den Fall  $n = 1$ , wenn lediglich ein Drehimpuls signifikant zur Streuung beiträgt, wie es zum Beispiel bei der  $s$ -Wellen-Streuung niederenergetischer Streuprozesse der Fall ist. Für nur ein Element in  $S$  reduziert sich das gekoppelte System nichtlinearer Gleichungen auf den Ausdruck

$$S_\ell = \frac{1 + i \tan((\ell - L)\pi/2)}{1 - i \tan((\ell - L)\pi/2)} \quad ,$$

der den Wert des verallgemeinerten Drehimpulses zu

$$L = \ell - (2/\pi)\delta_\ell$$

festlegt. Als Startwert können damit die Komponenten des Vektors  $\mathbf{L}$  als  $L = \ell - \delta_\ell 2/\pi$  initialisiert werden. Um, ausgehend von dem  $\mathbf{L}$ -Startwert, die Forderung (A.12) zu erfüllen, wurden unterschiedliche Methoden zur Lösung eines gekoppelten Systems nichtlinearer Gleichungen getestet. So wurden ein Simplex-Verfahren nach Nelder und Mead und eine Direction-Set-Methode nach Powell getestet. Als sehr zuverlässig hat sich eine Kombination aus Simulated Annealing und multidimensionalem Newton-Raphson-Rootfinding erwiesen, die in dieser Arbeit zur Bestimmung der Menge  $T$  verwendet wurde. Die vier hier genannten Methoden sind in Referenz [24] erläutert.

### A.3.1 Globale Minimierung via Simulated Annealing

Ausgehend von Gleichung (A.12) kann die Funktion

$$f(\mathbf{L}) = \mathbf{f}(\mathbf{L})\mathbf{f}^*(\mathbf{L}) \quad (\text{A.13})$$

definiert werde. Jeder Lösungsvektor  $\mathbf{L}$  zu Gleichung (A.12) minimiert auch die Funktion (A.13). Umgekehrt erfüllt nur der Lösungsvektor zu einem globalen Minimum der Funktion (A.13) auch die Beziehung (A.12). Die Aufgabe der Funktionsminimierung durch Simulated Annealing liegt nun darin, das globale Minimum der reelwertigen Funktion  $f(\mathbf{L})$  in Anwesenheit lokaler Minima zu finden, wobei  $\mathbf{L}$  ein  $n$ -dimensionaler Vektor ist. Das Prinzip kann vereinfacht wie folgt wiedergegeben werden: Zunächst wird unter Verwendung des  $L$ -Startwertes ein Simplex definiert, der aus den  $n + 1$  Punkten

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{L} + \lambda \cdot \mathbf{e}_i, \quad \mathbf{e}_0 = 0 \quad (\text{A.14})$$

besteht. Der Wert  $\lambda$  tritt dabei als technischer Parameter auf, der die Ausdehnung des Simplex bestimmt. Zu jedem Punkt des Simplex wird der Funktionswert  $f(\mathbf{L})$  ermittelt und der ungünstigste unter diesen ausgewählt. Ausgehend von diesem schlechten Punkt wird unter Verwendung von Zufallszahlen und einem weiteren technischen Parameter, der sogenannten Temperatur  $T$ , ein neuer Punkt extrapoliert, der zu einem günstigeren Funktionswert führt. Der Parameter  $T$  wird nach einer fest vorgegebenen Anzahl an Funktionswertberechnungen verringert, wovon der Name *Annealing* kommt. Durch diese Abkühlung wird die Reichweite der Extrapolation eingeschränkt, und der Simplex schrumpft in dem Bereich des Trägerraumes mit dem geringsten Funktionswert zusammen. Wenn auf diese Weise das idealerweise globale Minimum gefunden ist, welches durch den Lösungsvektor

$\mathbf{L}_{\text{sa}}$  gegeben ist, dann wird das mehrdimensionale Newton-Raphson-Rootfinding verwendet, um die gesuchte Nullstelle der Gleichung (A.12) tatsächlich zu identifizieren.

### A.3.2 Das multidimensionale Newton-Raphson-Rootfinding

Aufgabe des mehrdimensionalen Newton-Raphson-Rootfindings ist es, die Nullstelle einer  $n$ -dimensionalen und von  $n$  Parametern abhängigen Funktion  $\mathbf{f}(\mathbf{L})$  zu finden. Dazu wird ausgenutzt, dass die Funktion  $\mathbf{f}(\mathbf{L})$  in der Nähe eines Punktes  $\mathbf{L}$  in die Taylorreihe

$$\mathbf{f}(\mathbf{L} + d\mathbf{L}) = \mathbf{f}(\mathbf{L}) + \hat{\mathbf{J}} d\mathbf{L} + O(dx^2) \quad (\text{A.15})$$

entwickelt werden kann, wobei  $\hat{\mathbf{J}}$  die Jacobimatrix am Punkt  $\mathbf{L}$  darstellt. Ziel ist, ausgehend von dem Startpunkt  $\mathbf{f}(\mathbf{L}_{\text{sa}})$ , nach einer Reihe sogenannter Newton-Schritte  $d\mathbf{L}$  zu dem Ergebnis

$$\mathbf{f}(\mathbf{L}_f) = \mathbf{f}(\mathbf{L} + d\mathbf{L}) = 0 \quad (\text{A.16})$$

zu gelangen. Dabei werden die Newton-Schritte so klein gewählt, dass die Terme ab Ordnung  $O(d\mathbf{L}^2)$  vernachlässigt werden können. Unter Verwendung der Taylorreihe (A.15) können die zur Erfüllung von Gleichung (A.16) notwendigen Newton-Schritte mit dem linearisierten Gleichungssystem

$$d\mathbf{L} = -\hat{\mathbf{J}}^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{L})$$

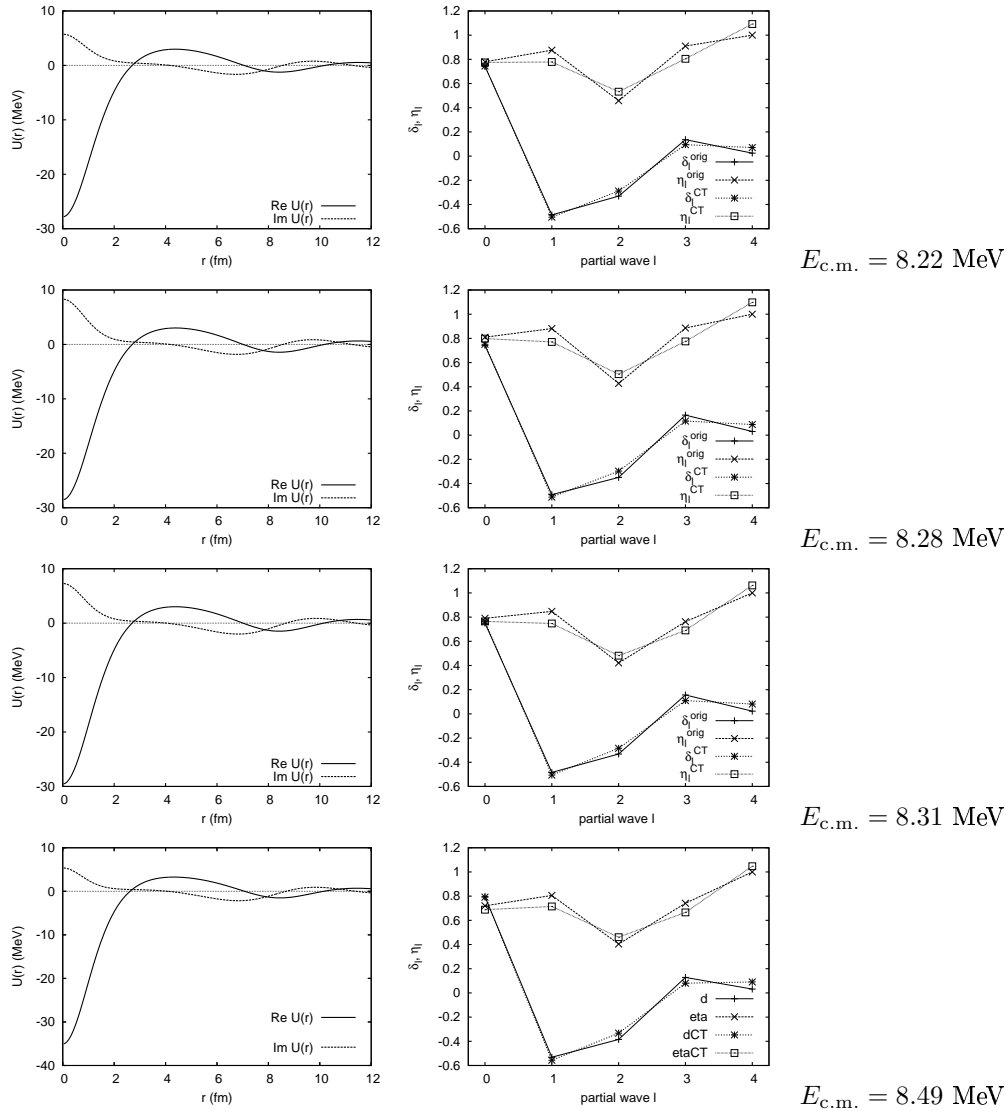
ermittelt werden. Ein solcher Newton-Schritt verringert tatsächlich den durch  $f = \mathbf{f} \mathbf{f}^*$  definierten Funktionswert, was durch

$$\nabla f d\mathbf{L} = (\mathbf{f} \hat{\mathbf{J}})(-\hat{\mathbf{J}}^{-1} \mathbf{f}) = -\mathbf{f} \mathbf{f}^* < 0$$

verdeutlicht werden kann.

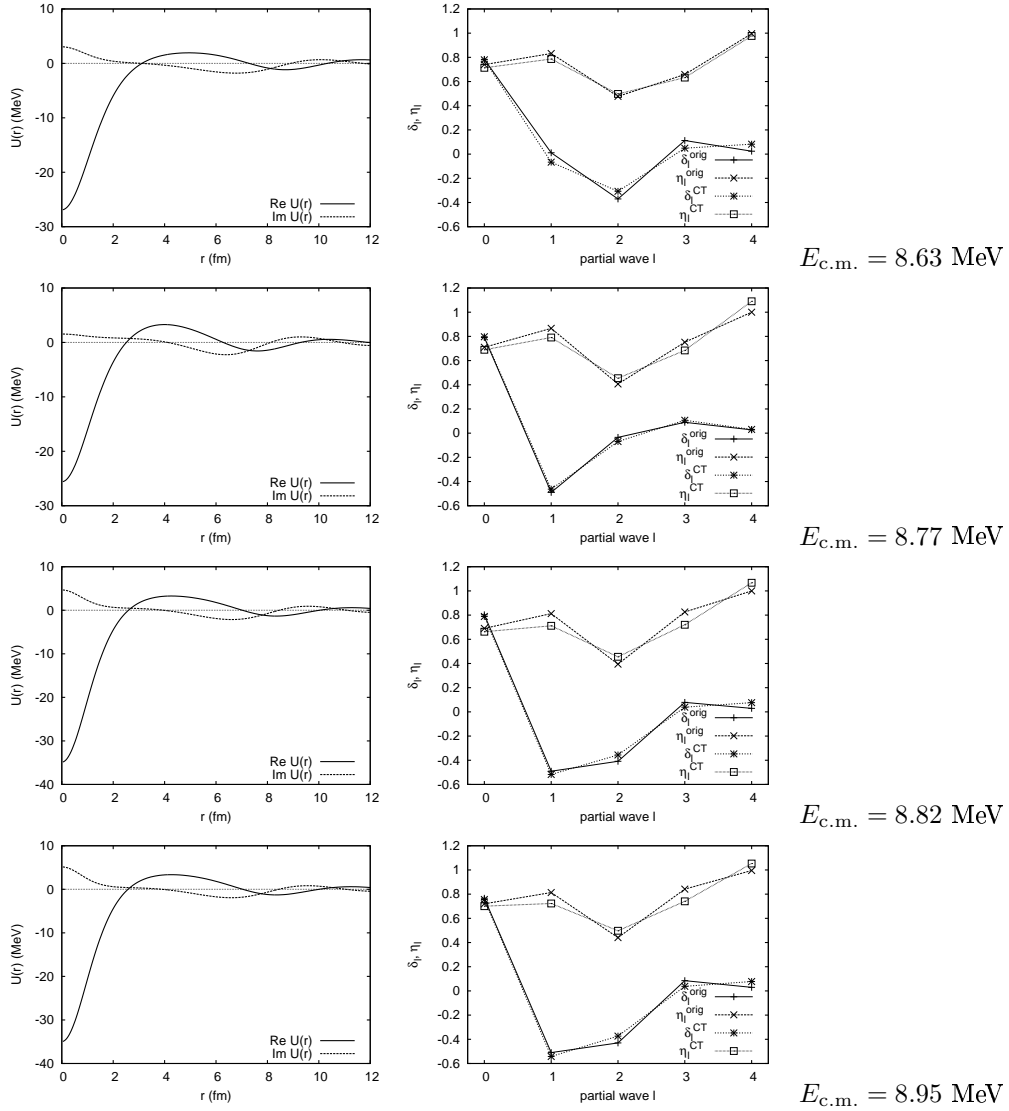
## A.4 $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale

Abbildung A.1:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $8.22 \text{ MeV} \leq E_{c.m.} \leq 8.49 \text{ MeV}$ .



Links: CT-Inversionspotential, rechts: Input- und Output-Streuphasen und Absorptionskoeffizienten.

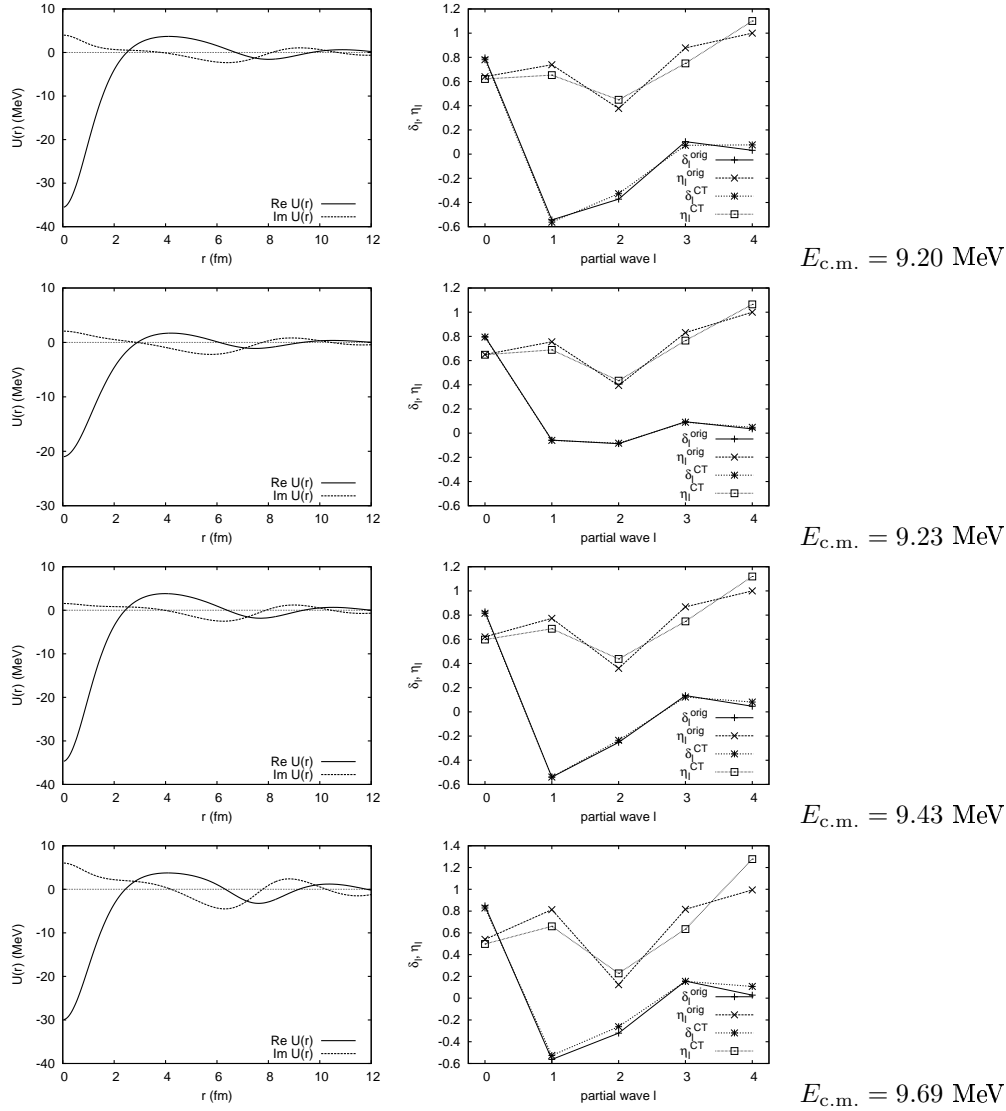
Abbildung A.2:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $8.63 \text{ MeV} \leq E_{c.m.} \leq 8.95 \text{ MeV}$ .



Links: CT-Inversionspotential, rechts: Input- und Output-Streuphasen und Absorptionskoeffizienten.

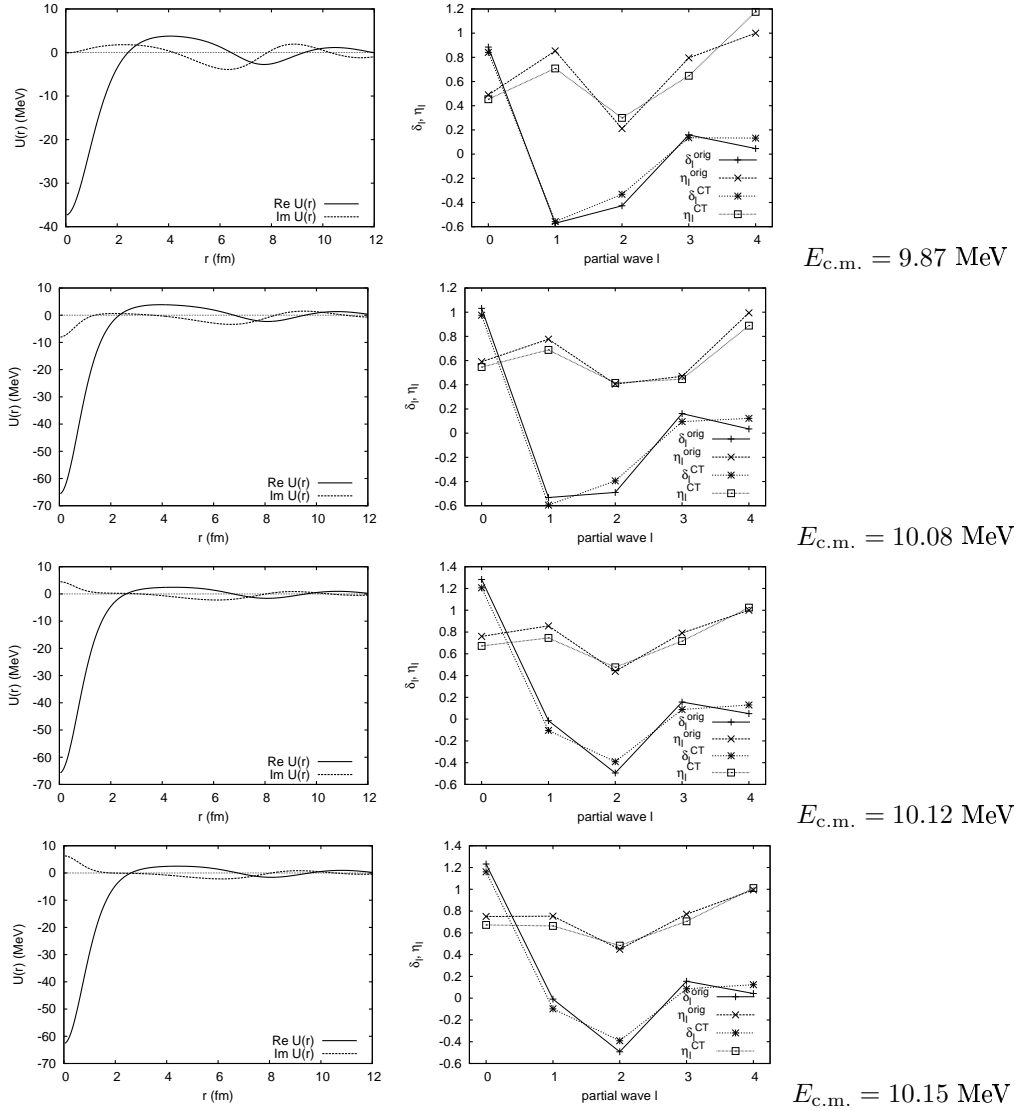


Abbildung A.3:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $9.2 \text{ MeV} \leq E_{c.m.} \leq 9.69 \text{ MeV}$ .



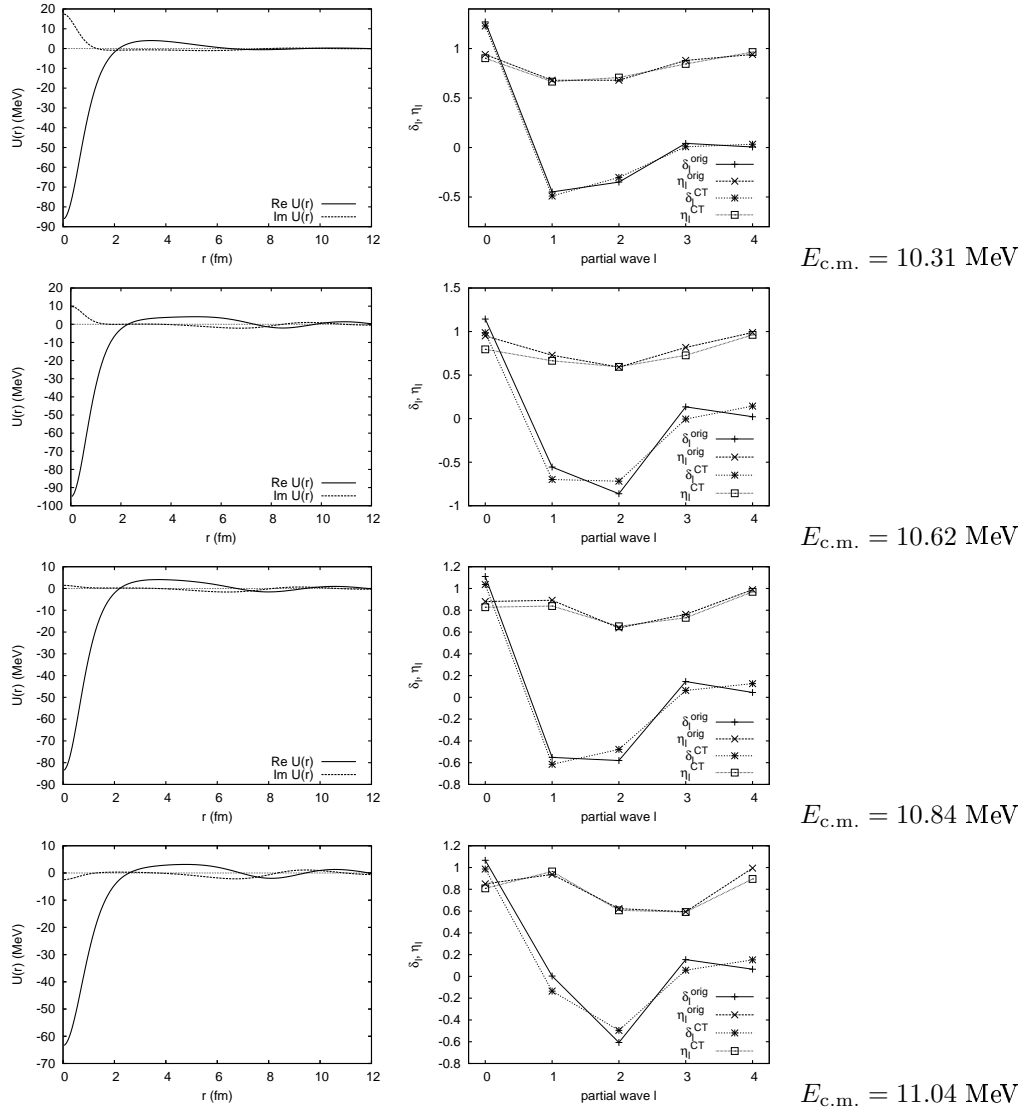
Links: CT-Inversionspotential, rechts: Input- und Output-Streuphasen und Absorptionskoeffizienten.

Abbildung A.4:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $9.87 \text{ MeV} \leq E_{c.m.} \leq 10.15 \text{ MeV}$ .

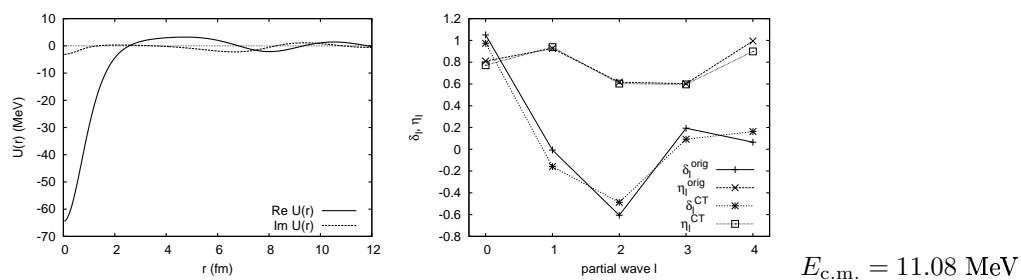


Links: CT-Inversionspotential, rechts: Input- und Output-Streuphasen und Absorptionskoeffizienten.

Abbildung A.5:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $10.31 \text{ MeV} \leq E_{c.m.} \leq 11.04 \text{ MeV}$ .



Links: CT-Inversionspotential, rechts: Input- und Output-Streuphasen und Absorptionskoeffizienten.

Abbildung A.6:  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $E_{\text{c.m.}} = 11.08$  MeV.

Links: CT-Inversionspotential, rechts: Input- und Output-Streuphasen und Absorptionskoeffizienten.

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Direkter und inverser Zugang zur Streuproblematik . . . . .	2
4.1	Komplexes Kastenpotential: Inversion bei den Anpassungsradien $r_a = 5.25, 7.25, 8.25, 9.25$ fm (von oben nach unten) und festem Abschneidedrehimpuls $\ell_{\max} = 15$ . . . . .	24
4.2	Komplexes Kastenpotential: Inversion bei festem Anpassungsradius $r_a = 7.25$ fm und Abschneidedrehimpulsen $\ell_{\max} = 3, 10, 17, 19$ (von oben nach unten). . . . .	27
4.3	Komplexes Kastenpotential: Ergebniss der Inversionsprozedur nach der 2., 3., 6. und 12. (von oben nach unten) Inversion der Eingabestreuphasen. . . . .	30
5.1	$\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: $\chi_{\text{U}}^2$ - und $\chi_{\text{S}}^2$ -Werte für die Inversion zu verschiedenen Abschneidedrehimpulsen $\ell_{\max}$ . . . . .	34
5.2	$\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: CT-Inversionspotentiale zu verschiedenen Abschneidedrehimpulsen $\ell_{\max}$ . . . . .	35
5.3	$\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: $\chi_{\text{U}}^2$ - und $\chi_{\text{U}}^2$ -Werte für die Inversion zu verschiedenen Anpassungsradien $r_a$ . . . . .	36
5.4	$\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: CT-Inversionspotentiale zu verschiedenen S-Matrix-Anpassungsradien $r_a$ . . . . .	37
5.5	$\alpha$ - $^{12}\text{C}$ -Modellpotential: Inversionspotential für die Parameterwahl $\ell_{\max} = 14$ und $r_a = 9.25$ fm. . . . .	39
6.1	$n$ - $\alpha$ -Streuung: Inversionspotentiale bei 4 verschiedenen Energien im c.m. System. . . . .	43
6.2	$n$ - $\alpha$ -Streuung: Inversionspotentiale, WS- und Gauss-Fit der Inversionspotentiale. . . . .	44
6.3	$n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: CT-Inversionspotentiale der Streudaten aus Tab. 6.3. . . . .	47
6.4	$n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: CT-Inversionspotentialtiefe $U_0^{\text{CT}}(E)$ als Funktion der Energie im c.m. System. . . . .	48

- A.1  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $8.22 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 8.49 \text{ MeV}$ .  
57
- A.2  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $8.63 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 8.95 \text{ MeV}$ .  
58
- A.3  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $9.2 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 9.69 \text{ MeV}$ .  
59
- A.4  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $9.87 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 10.15 \text{ MeV}$ .  
60
- A.5  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $10.31 \text{ MeV} \leq E_{\text{c.m.}} \leq 11.04 \text{ MeV}$ .  
61
- A.6  $n$ - $^{12}\text{C}$ -Streuung: Inversionspotentiale für  $E_{\text{c.m.}} = 11.08 \text{ MeV}$ . . . . 62

# Tabellenverzeichnis

4.1	Komplexes Kastenpotential: Streudaten . . . . .	21
4.2	Komplexes Kastenpotential: Daten zur Inversion bei festem Abschneidedrehimpuls . . . . .	23
4.3	Komplexes Kastenpotential: Streudaten für das komplexwertige Kastenpotential nach Transformation der S-Matrix . . . . .	26
4.4	Komplexes Kastenpotential: Daten zur Inversion bei festem Anpassungsradius . . . . .	26
4.5	Komplexes Kastenpotential: Daten zur wiederholten Inversion der Eingabe-Streudaten . . . . .	29
5.1	$\alpha$ - <sup>12</sup> C-Modellpotential: Streudaten . . . . .	32
5.2	$\alpha$ - <sup>12</sup> C-Modellpotential: Inversionsdaten. . . . .	38
6.1	$n$ - $\alpha$ -Streuung: Inversionsdaten. . . . .	42
6.2	$n$ - $\alpha$ -Streuung: Daten bezüglich der Anpassung analytischer Potentiale mit WS- und Gauss-Form an die $n$ - $\alpha$ -Inversionspotentiale. . .	42
6.3	$n$ - <sup>12</sup> C-Streuung: Inversionsdaten. . . . .	48
6.4	$n$ - <sup>12</sup> C-Streuung: Inversionspotentialtiefen und Potentialcharakteristika. . . . .	49

# Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, New York, 1972.
- [2] N. Alexander, K. Amos, B. Apagyi, and D. R. Lun. Nucleon- $\alpha$ -particle interactions from inversion of scattering phase shifts. *Phys. Rev. C*, 53:88, 1996.
- [3] B. Apagyi, Z. Harman, and W. Scheid. Solution of the Cox-Thompson inverse scattering problem using finite set of phase shifts. *J. Phys. A*, 36:4815, 2003.
- [4] B. Apagyi, A. Ostrowski, W. Scheid, and H. Voit. Phase shift analysis and inversion to a potential for  $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$  elastic scattering at  $E_{\text{cm}} = 9.50$  and  $11.38$  Mev. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.*, 18:145, 1992.
- [5] J. Bowcock and H. Burkhardt. Principles and problems of phase shift analysis. *Rep. Prog. Phys.*, 38:1099, 1975.
- [6] K. Chadan and P. C. Sabatier. *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*. Springer-Verlag, New York, 1977.
- [7] J. Cox and K. Thompson. Note on the Uniqueness of the Solution of an Equation of Interest in the Inverse Scattering Problem. *J. Math. Phys.*, 11:805, 1970.
- [8] J. Cox and K. Thompson. On the Inverse Scattering Problem at Fixed Energy for Potentials Having Nonvanishing First Moments. *J. Math. Phys.*, 11:805, 1970.
- [9] M. Eberspächer, K. Amos, and B. Apagyi. Solution of the inverse scattering problem at fixed energy with nonphysical S matrix elements. *Phys. Rev. C*, 61:064605, 2000.
- [10] H. Friedrich. *Theoretical Atomic Physics*. Springer-Verlag, 1991.
- [11] W. Greiner, J. Y. Park, and W. Scheid. *Nuclear Molecules*. World Scientific Publishing, 1995.



- [12] Z. Harman. Private Mitteilung. 2005.
- [13] K. Königsberger. *Analysis 1*. Springer-Verlag, 2001.
- [14] H. Leeb, H. Huber, and H. Fiedeldey. Extraction of spin-orbit potentials from scattering data via inversion. *Phys. Lett. B*, 344:18, 1995.
- [15] D. R. Lun, L. J. Allen, and K. Amos. Determination of scattering amplitudes from differential cross-section data by using unitary conditions. *Phys. Rev. A* 50, 5:4000, 1994.
- [16] W. Magnus, F. Oberhettinger, and R. P. Soni. *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*. Springer-Verlag, 1966.
- [17] K. E. May. *Das Modifizierte Newton-Verfahren für das Inverse Streuproblem mit geladenen Teilchen und seine Anwendung auf experimentell gemessene Phasenverschiebungen*. Diplomarbeit, Gießen, 1984.
- [18] A. Messiah. *Quantenmechanik, Band 1*. de Gruyter.
- [19] M. Münchow. Diplomarbeit, Gießen, 1979.
- [20] M. Münchow and W. Scheid. Modification of the Newton Method for the Inverse-Scattering Problem at Fixed Energy. *Phys. Rev. Lett.*, 44:1299, 1980.
- [21] R. G. Newton. Construction of Potentials from the Phase Shifts at Fixed Energy. *J. Math. Phys.*, 3:75, 1962.
- [22] R. G. Newton. Construction of Potentials from the Phase Shifts at Fixed Energy. *J. Math. Phys.*, 3:75, 1962.
- [23] R. G. Newton. Connection between Complex Angular Momenta and the Inverse Scattering Problem at Fixed Energy. *J. Math. Phys.*, 8:1566, 1967.
- [24] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77*. Cambridge University Press, 1992.
- [25] R. E. Shamu and J. G. Jenkin. Neutron-Alpha Scattering in the 20-Mev Range. *Phys. Rev.*, 135:99, 1964.
- [26] W. Toronow, R. L. Walter, and R. C. Byrd. Phase-shift-analysis approach to elastic neutron scattering from  $^{12}\text{C}$  between 9 and 12 Mev. *J. Phys. G: Nucl. Phys.*, 11:379, 1985.
- [27] N. VinhMau. *Microscopic Optical Potentials*. H. V. von Geramb ed, Lecture Notes in Physics, Vol. 89, Springer-Verlag, New York, 1978.

- [28] E. Woye, W. Tornow, and G. Mack. The analyzing power  $A_y(\theta)$  for  $^{12}\text{C}(n,n_{0,1})^{12}\text{C}$  between 8.9 and 14.9 MeV Neutron energy. *Nucl. Phys. A*, 394:139, 1983.
- [29] B. N. Zakhariev and A. A. Suzko. *Direct and Inverse Problems - Potentials in Quantum Scattering*. Springer-Verlag, 1990.

# Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Scheid ganz herzlich dafür bedanken, dass er mich am Institut für Theoretische Physik aufnahm, das Thema dieser Arbeit motiviert und mich stetig unterstützt hat. Weiter gab er mir die Möglichkeit den Inhalt in Seminarbeiträgen zu thematisieren und die ersten Erfolge auf der 69. Frühjahrstagung der DPG im Februar 2005 zu präsentieren. Außerdem hat er mir den zweimaligen Besuch an der TU Budapest eröffnet, was neben meinem akademischen auch mein privates Leben sehr bereichert hat. In diesem Zusammenhang möchte ich mich ebenfalls ganz herzlich bei Herrn Prof. Dr. Apagyi bedanken, dessen zuvorkommende Gastfreundschaft mir zunächst im Dezember 2004 und zuletzt im Mai 2005 zu Teil wurde und zwei in akademischer Hinsicht unersetzbare Aufenthalte an der TU Budapest garantierte.

Ein besonderes Wort des Dankes möchte ich auch Herrn Dipl.-Phys. Jan Scholz aussprechen, der stets ein offenes Ohr für Rechnerprobleme besaß, bei rechen-technischen Realisierungen mit viel Ideenreichtum aufwartete und das Korrekturlesen der kompletten Arbeit übernahm. Den ehemaligen Kollegen Herrn Dr. Zoltán Harman und Herrn Dr. Stephan Balliel Zakowicz für das stete Interesse am Fortschreiten der Arbeit und zahlreiche Hilfestellungen wie auch Teekränzchen. Weiter gilt mein Dank Frau Susanne Gretschel, Frau Elke Jung, Frau Dipl.-Phys. Adriana Gagy-Pállfy, Herrn Dr. Zoltán Gagy-Pállfy und Frau Dipl.-Phys. Xiao-Tao He, die zu dem wunderbaren Arbeitsklima im Institut beigetragen haben.

Schließlich gilt mein Dank meinen Eltern, durch deren Unterstützung mir das Studium erst möglich wurde.



Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst habe, ohne andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet zu haben.

Gießen, den 29.10.2005

Oliver Melchert