Eindhoven University of Technology

MASTER

De intervalsgewijze "energy-sudden-" en "centrifugal-sudden"-benadering

Ramaekers, J.J.F.

Award date:
1979

Link to publication

Disclaimer
This document contains a student thesis (bachelor's or master's), as authored by a student at Eindhoven University of Technology. Student theses are made available in the TU/e repository upon obtaining the required degree. The grade received is not published on the document as presented in the repository. The required complexity or quality of research of student theses may vary by program, and the required minimum study period may vary in duration.

General rights
Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain

Take down policy
If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Download date: 20. Jul. 2025

Technische Hogeschool Eindhoven.
Afdeling der Technische Natuurkunde.
Vakgroep Deeltjesfysica.

DE INTERVALSGEWIJZE "ENERGY-SUDDEN"- EN "CENTRIFUGAL-SUDDEN"-BENADERING.

De intervalsgewijze "energy-sudden"- en "centrifugal-sudden"-benadering.

Verslag van het afstudeeronderzoek verricht door J.J.F.Ramaekers in de onderwerpgroep Theoretische Kernfysica.

Begeleiders: Dr.B.J.Verhaar.
Ir.W.Thijssen.

Januari 1979.

INHOUD.

SAMENVATTING.
HANDLEIDING BIJ HET LEZEN VAN HET VERSLAG.
INLEIDING. 1

I ROTATIONELE AANSLAG VAN EEN TWEEDIMENSIONALE STARRE ROTATOR. 4
Beschouwing van het systeem starre rotator + projectieldeeltje. 4
1 De gekoppelde-kanalen-methode. 6
a Het stelsel gekoppelde differentiaalvergelijking-en. 6
b De oplosmethode. 8
c Het verband tussen de verstrooiingsamplitude en de verstrooiingsmatrixelementen. 13
2 De adiabatische benadering. 15
a Het stelsel gekoppelde d.v.-en. 15
b Het lichaamsvaste assenstelsel. 20

II ROTATIONELE AANSLAG VAN EEN DRIEDIMENSIONALE STARRE ROTATOR. 22

III HET "VIJFDIMENSIONALE" HARMONISCHE-OSCILLATOR-MODEL. 25

IV DE ENERGY-SUDDEN- EN CENTRIFUGAL-SUDDEN-BENADERING. 33

V RECHTVAARDIGING VAN DE INTERVALSGEWIJZE AANPAK, IN COMBINATIE MET OPKRIKKEN, IN DE ENERGY-SUDDEN- EN CENTRIFUGAL-SUDDEN-BENADERING. 41
1 Het opkrikken. 45
2 Drie methoden van opkrikken. 48
3 Het opkrikken in de praktijk. 50

VI HET GENEREREN VAN OPLOSSINGSVECTOREN IN r_m IN DE INTERVALSGEWIJZE ENERGY-SUDDEN- EN CENTRIFUGAL-SUDDEN -BENADERING. 51

VII DE INTERACTIE-POTENTIAAL. 56

VIII PRAKTISCHE UITVOERING. 58
1 Het programma. 58
2 De integratie-methode. 58
3 De structuur van het programma. 60
4 Taakomschrijving van de afzonderlijke subroutines en functies. 60

IX RESULTATEN. 65

X CONCLUSIES. 79

XI GRAFIEKEN.

XII LITERATUURLIJST.

XIII APPENDICES. 81

SAMENVATTING.

Een van de meest gebruikte berekeningen,namelijk die met behulp van de gekoppelde-kanalen-methode,van verstrooiing van projectieldeeltjes aan atoomkernen,vergt nogal wat rekentijd. Hierbij dient namelijk een stelsel gekoppelde tweede orde differentiaalvergelijkingen van grote dimensie te worden opgelost.
Door nu enkele benaderingen toe te passen in het model,verkrijgt men slechts één ontkoppelde tweede orde differentiaalvergelijking.Men dient dan wel voor de gemaakte benaderingen te corrigeren.Zodoende is men in staat om t.o.v. de gekoppelde-kanalen-methode gelijkwaardige resultaten te verkrijgen, met een reductie van de rekentijd met een factor 3 à 4.

De toegepaste benaderingen komen tot uitdrukking in het feit dat in de Hamiltonoperator,

a de kernhamiltonoperator is vervangen door een constante (adiabatisch of "energy-sudden"),

b de operator $\vec{l}^2$ is vervangen door een constante ("centrifugal-sudden").

ad. a De adiabatische benadering ("energy-sudden") wordt geintroduceerd om de beschrijving van de botsing tussen twee systemen met interne vrijheidsgraden te vereenvoudigen,en vindt voornamelijk toepassing in verstrooiingstheorie en theorie met betrekking tot gebonden toestanden.
Klassiek gesproken kan de benadering worden gebruikt als een of meerdere van deze vrijheidsgraden langzaam variëren ten opzichte van de overige vrijheidsgraden.Quantummechanisch correspondeert dit met de aanname dat de energie-eigenwaarden van de target-hamiltonoperator die overeenkomen met de niveaus die gedurende de botsing target-projectiel significant gekoppeld zijn,onderling voldoende weinig verschillen.

ad.b Bij het toepassen van deze benadering gaat men ervan uit dat de hoekcoördinaten van het projectiel slechts langzaam variëren ten opzichte van de relatieve afstand van projectiel tot kern.
Zo'n benadering zal het beste voldoen wanneer de gedurende de botsing sterk gekoppelde kanalen onderling slechts weinig verschillen in ℓ-waarde.

Omtrent de criteria waaronder de benaderingen opgaan is men het in de literatuur niet eens.Ook het verband tussen klas-sieke en quantummechanische criteria blijkt erg onduidelijk te zijn.(Zie hoofdstuk IV)

Klassiek komt de adiabatische benadering er op neer dat men de oriëntatie van de kern gedurende de botsing vastprikt. Indien deze benadering niet realistisch is,zal men een betere beschrijving verkrijgen,indien de kern z'n oriëntatie stapsgewijs aan het naderende projectiel aanpast.

Men zou dit quantummechanisch als volgt kunnen vertalen; de radiële integratie van de golffuncties die de botsing beschrijven,wordt in intervallen uitgevoerd.In de scheidingspunten der intervallen past men een correctie toe;men krikt de adiabatisch berekende golffunctie op naar de exacte golffunctie.

Ook in de energy-sudden+centrifugal-sudden-benadering past men nu de intervalsgewijze integratie met correctie (opkrikken) in de intervalscheidingspunten toe.

Uiteindelijk vormt de vergelijking van de differentiële werkzame doorsneden,berekent met de intervalsgewijze energy-sudden+centrifugal-sudden-benadering,met die,berekent met de gekoppelde-kanalen-methode,een goede graadmeter omtrent de bruikbaarheid van de modellering.

Geconcludeerd kan worden dat de resultaten verkregen in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering met toenemend aantal intervallen convergeren naar de resultaten verkregen in de gekoppelde-kanalenberekening.

HANDLEIDING BIJ HET LEZEN VAN HET VERSLAG.

Dit verslag beschrijft een gedeelte van het totale afstudeeronderzoek,dat verricht is in de groep Theoretische Kernfysica in samenwerking met Leon Beerendonk.Het andere gedeelte van het onderzoek wordt beschreven in het afstudeerverslag van Leon Beerendonk.

Er worden enkele onderwerpen besproken,die ook in het verslag van Leon Beerendonk behandeld worden.Hierdoor is het mogelijk beide verslagen onafhankelijk van elkaar te lezen.

Verder komen in de hoofdstukken III en VII enkele onderwerpen aan de orde,die in de literatuur al behandeld zijn,maar die hier opgenomen zijn om het verslag op zich leesbaar te maken.

De hoofdstukken I,II,IV,V,VI,VIII,IX en X beschrijven in hoofdzaak het eigen werk.In hoofdstuk IV en volgende wordt het hoofdonderwerp van het afstudeeronderzoek beschreven.

In de eerste twee hoofdstukken wordt de aanslag van axiaal-symmetrische,permanent gedeformeerde kernen (starre rotatoren) besproken,in verband met het feit dat in de afgelopen jaren in de groep Theoretische Kernfysica veel gewerkt is aan α- en protonverstrooiing aan dit soort kernen.Dit is geschied mede in het kader van het promotie-onderzoek van Tom Schulte. (Zie Lit. 1)

In hoofdstuk I wordt een tweedimensionale beschouwing gegeven.Hierdoor kan men de niet essentiële impulsmomentalgebra vermijden:men heeft dan niet te maken met niet-commuterende impulsmomentcomponenten.

Vanuit de tweedimensionale adiabatische beschouwing worden in hoofdstuk II de grote lijnen van de driedimensionale adiabatische methode aangegeven.

In hoofdstuk III t/m X komt als hoofdonderwerp de intervals-gewijze energy-sudden+centrifugal-sudden-benadering ter spra-

ke,toegepast op de α- en proton-verstrooiing aan sferische kernen ^{60}Ni. resp. ^{112}Cd. Deze sferische kernen voeren opper-vlakte-vibraties om een sferische evenwichtsvorm uit.

In hoofdstuk III komt het "vijfdimensionale"-harmonische-oscillator-model ter sprake,dat het gedrag van een vibrerende kern beschrijft in termen van de zgn. collectieve coördinaten.

In hoofdstuk IV wordt de energy-sudden +centrifugal-sudden-benadering besproken.Er wordt aangegeven welke benaderingen in de hamiltonoperator toegepast zijn om het stelsel gekoppel-de differentiaalvergelijkingen te herleiden tot één ontkoppel-de differentiaalvergelijking.Tevens wordt aangegeven dat de criteria,waaronder de genoemde benaderingen opgaan,niet scherp omlijnd aan te geven zijn.

Omdat de e.s.+c.s.-benadering niet de gewenste resultaten voor de differentiële werkzame doorsneden oplevert,is getracht een correctie toe te passen op deze benadering.Deze correctie komt tot uitdrukking in het "opkrikken" in de intervalscheidingspunten van het in intervallen verdeelde radiële integratiegebied.Dit wordt behandeld in hoofdstuk V.

In hoofdstuk VI komt aan de orde hoe men door middel van een successieve vermenigvuldiging van overdrachtsmatrices behorende bij de afzonderlijke intervallen,komt tot de oplossings-matrix in het zgn. aansluitingspunt.Deze oplossingsmatrix bestaat uit kolommen van oplossingsvectoren waaruit door een line-aire combinatie,de fysische oplossing gegenereerd wordt.

Hoofdstuk VII licht de modelpotentiaal,die gebruikt wordt als interactiepotentiaal voor het systeem van het spinloze pro-jectiel en kern,toe.

In hoofdstuk VIII wordt de structuur van het programma en de taak van de afzonderlijke subroutines en functies behandeld.

In hoofdstuk IX worden o.a. de differentiële werkzame doorsneden in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering vergeleken met de differentiële werkzame doorsneden berekend met een gekoppelde-kanalen-berekening,d.w.z. een in principe exacte bere-kening.Tevens worden enkele aspecten besproken die bekeken

zijn om het programma te optimaliseren,en enkele aspecten die het programma in de toekomst mogelijkerwijs kunnen optimaliseren.

In hoofdstuk X tenslotte volgen enkele conclusies die uit de resultaten getrokken kunnen worden.

INLEIDING.

Vele experimenten in de kernfysica hebben betrekking op laagenergetische collectieve kernaanslag,zoals bijvoorbeeld a rotationele aanslag van permanent gedeformeerde kernen, b vibrationele aanslag van bolsymmetrische kernen.

Indien men de lage-energie-spectra van even-even-kernen (neutronenaantal N=even,protonenaantal Z=even) bekijkt,neemt men twee soorten laaggelegen niveaus met positieve pariteit waar.Figuur 1a toont een quasi-vibratie-spectrum,waarin het 0^+-2^+-4^+-triplet ongeveer een twee-maal zo grote energie heeft als de eerste 2^+-toestand.Dit doet ver-onderstellen dat men hierbij te maken heeft met een type harmoni-sche oscillatie waarbij de fono-nen (oscillatorquanta) elk een impulsmoment gelijk aan $2\hbar$ vertegen-woordigen.Het triplet vertegenwoor-digt dan de aanslag van twee fono-nen die gekoppeld worden tot een totaal impulsmoment 0,2 of 4.

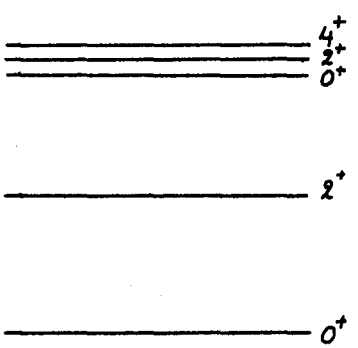


Fig.1a Typisch spectrum van een quadrupool-opper-vlakte-vibratie.

In fig.1b ziet men een typisch rotatie-spectrum,waarin de energie-en van de verscheidene niveaus bij benadering de afhankelijkheid $\mathcal{E}_I \approx I(I+1)$ volgen.Uit de molecuulfy-sica is bekend dat een symmetrische rotator energieën $E_I = I(I+1)\hbar^2/2J_R$ bezit.Het traagheidsmoment van de rotator wordt hierbij aangegeven met J_R.Experimenteel blijkt dat bol-symmetrische kernen een vibratie-spectrum ,en permanent gedeformeer-

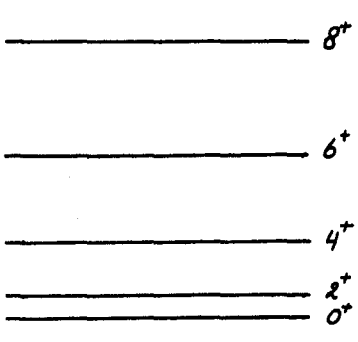


Fig.1b Typisch rotatiespectrum. I(I+1)-patroon.

de kernen een rotatie-spectrum bezitten.In de buurt van de magische getallen 2,8,20,28,50,82 enz. mag men daarom kernen verwachten die een vibratie-spectrum bezitten.
B.v. ^{60}Ni.(N=32,Z=28) en ^{112}Cd.(N=64,Z=48) vertonen zo'n vibra-tiespectrum.

In fig.2 stellen de gearceerde gebieden tussen de magische lijnen gebieden van gedeformeerde kernen voor.Experimenteel gevonden gebieden zijn wat betreft het massagetal A:19<A<28,150<A<190,A≥222.(Lit. 2).

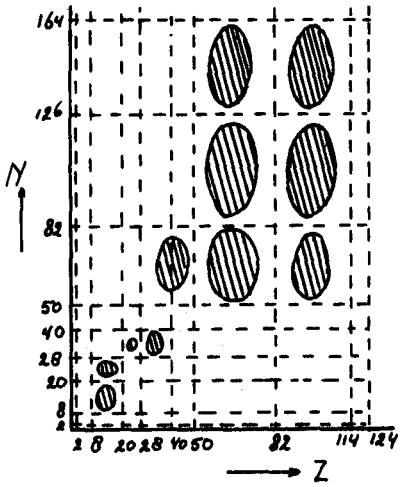


Fig.2 Gearceerd: gebieden van gedeformeerde kernen.

Om collectieve bewegingen van de kerndeeltjes,zoals rotaties en vibraties,te beschrijven,gebruikt men het collectieve kernmodel.
In termen van dit model verstaat men onder rotatie,een oriëntatieverandering van het kernoppervlak, en onder vibratie,trillingen van hetzelfde oppervlak om een evenwichtsvorm.

De vorm en oriëntatie van het kernoppervlak wordt beschreven door de functie

$$R(\theta,\phi,t)=R_0\left[1+\sum_{\lambda\mu}\alpha^*_{\lambda\mu}(t)Y_{\lambda\mu}(\theta,\phi)\right]$$

Hierin is R de afstand van het kernmassamiddelpunt tot het kern-oppervlak als functie van θ en ϕ,de laboratorium-bolhoeken gemeten vanuit het kernmassamiddelpunt.De coëfficiënten $\alpha_{\lambda\mu}(t)$ die de afwijking van de bolsymmetrie aangeven,heten collectieve coördinaten.

Beperkt men zich tot quadrupooldeformaties ($\lambda=2$) dan ziet de ontwikkeling naar bolfuncties voor de voerstraal naar het kern-oppervlak er als volgt uit;

$$R(\theta,\phi,t)=R_0\left[1+\sum_{\mu=-2}^{2}\alpha^*_{2\mu}(t)Y_{2\mu}(\theta,\phi)\right]$$

De wisselwerking tussen het projectieldeeltje en de target -kern wordt beschreven met behulp van een wisselwerkingspoten -tiaal.Er wordt verondersteld dat de equipotentiaalvlakken van deze wisselwerkingspotentiaal ruwweg dezelfde vorm hebben als het kernoppervlak,zodat de vorm en de afmetingen van de kern als parameters in deze potentiaal optreden.De wisselwerkings-potentiaal is dus niet bolsymmetrisch maar gedeformeerd.

Indien de potentiaal zuiver sferisch is,treedt er elastische verstrooiing op.

Bij een niet-sferische potentiaal kan er ook inelastische verstrooiing optreden.

In dit verslag wordt elastische en inelastische verstrooiing van protonen aan de ^{112}Cd.-kern,^{112}Cd.(p,p'),en van α-deel -tjes aan de ^{60}Ni.-kern,^{60}Ni.(α,α'),beschouwd.

I. ROTATIONELE AANSLAG VAN EEN TWEEDIMENSIONALE STARRE ROTATOR.

Beschouwing van het systeem starre rotator+projectieldeel-tje.

Daar het verstrooiingsprobleem in het algemeen bijzonder complex is,bespreken we eerst een vereenvoudigd tweedimensio-naal model.Door het beschouwen van een tweedimensionaal model,vermijdt men de niet essentiële impulsmoment-algebra. De complicatie van niet commuterende impulsmoment-componenten speelt dan geen rol.

Voor de eenvoud gebruikt men spinloze,ongeladen projectieldeeltjes.Deze veronderstellingen veranderen de essentie van het probleem niet.

Men neemt hier aan dat men te doen heeft met een permanent gedeformeerde,axiaalsymmetrische kern,die een rotatiespectrum vertoont.(Het geval van een sferische kern met een vibratiespectrum verloopt geheel analoog.)

De Hamiltonoperator die de verstrooiing van een ongeladen spinloos projectiel aan een tweedimensionale starre rotator beschrijft,ziet er als volgt uit;

$$H(r,\frac{\partial}{\partial r},\phi,\frac{\partial}{\partial\phi},\theta,\frac{\partial}{\partial\theta}) = H_R(\frac{\partial}{\partial\phi}) + H_p(r,\frac{\partial}{\partial r},\theta,\frac{\partial}{\partial\theta}) + V(r,\theta,\phi). \qquad (1)$$

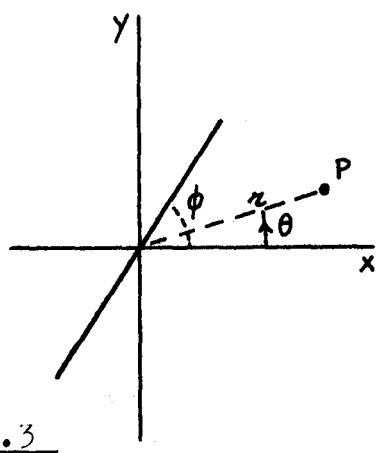


Fig.3

Hierin wordt de Hamiltonoperator van de starre rotator voorgesteld door $H_R(\partial/\partial\phi)$.Die van het projectieldeeltje wordt aangegeven met $H_p(r,\partial/\partial r,\theta,\partial/\partial\theta)$.De term $V(r,\theta,\phi)$ representeert de wisselwerkingspotentiaaloperator.De poolcoördinaten van het projectiel worden gegeven door (r,θ).De stand van de rotator (halter) wordt aangegeven met ϕ.

Een voorbeeld van een tweedimensionale starre rotator is een deeltje met massa M_R dat alleen kan bewegen langs de omtrek van een cirkel.
De klassieke Hamiltoniaan ziet er als volgt uit; $\mathcal{H}_R = \frac{P_\phi^2}{2J_R}$
Hierin is P_ϕ de gegeneraliseerde impuls bij coördinaat ϕ, en J_R het traagheidsmoment van de rotator. Zo vindt men voor de Hamiltonoperator van de rotator: $H_R = -\frac{\hbar^2}{2J_R}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$.
De genormeerde eigenfuncties van deze operator zijn $\Phi_{m_R}(\phi) = \frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}$, met als rotatie-energie-eigenwaarden: $E_{m_R} = \frac{\hbar^2 m_R^2}{2J_R}$ (m_R geheel). (Zie Lit. 3).

Het projectieldeeltje is in afwezigheid van de starre rotator (V=0), een vrij bewegend deeltje, dat wordt beschreven door de tijdonafhankelijke Schrödinger-vergelijking;

$$H_p(r,\theta)\Psi(r,\theta) = -\frac{\hbar^2}{2M_p}\nabla^2\Psi(r,\theta) = -\frac{\hbar^2}{2M_p}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right]\Psi(r,\theta) = E\,\Psi(r,\theta). \qquad (2)$$

Met behulp van scheiding van variabelen $\Psi(r,\theta) = R(r)\Theta(\theta)$ vindt men;

$\Theta_{m_p}(\theta) = \frac{e^{im_p\theta}}{\sqrt{2\pi}}$; de genormeerde eigenfuncties van de operator $\vec{l}^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$.

$R(r) = J_{m_p}(kr)$; $J_{m_p}(kr)$, de cylindrische Besselfunctie.

Hierbij geldt: $E = \hbar^2 k^2 / 2M_p$.
De algemene oplossing voor het vrije projectieldeeltje luidt dan;

$$\Psi(r,\theta) = \sum_{m_p} a_{m_p} J_{m_p}(kr)\, e^{im_p\theta} \qquad (3)$$

Een bijzonder geval treedt op wanneer we te maken hebben met een vlakke projectielgolf in de x-richting, $\vec{k} = k\vec{e}_x$:

$$\Psi(r,\theta) = e^{ikx} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{m_p=0}^{\infty} \epsilon_{m_p}(i)^{m_p}\cos(m_p\theta)\, J_{m_p}(kr)$$

$$= \sum_{m_p=-\infty}^{\infty} e^{im_p\frac{\pi}{2}} e^{im_p\theta} J_{m_p}(kr) = \sum_{m_p=-\infty}^{\infty} (i)^{m_p} e^{im_p\theta} J_{m_p}(kr). \qquad (4)$$

$\epsilon_0 = 1$; $\epsilon_{m_p} = 2$ $m_p \geq 1$; (Lit. 4).
Hieruit volgt dat we de vlakke projectielgolf kunnen beschouwen als een superpositie van partiële golven elk met een eigen baanimpulsmomentquantumgetal $l = m_p$.

Opm. In het tweedimensionale geval staan de impulsmomenten $\vec{I}$ (kernspin) en $\vec{\ell}$ (baanimpulsmoment van het projectiel) beide loodrecht op het x-y-vlak. Er is dus slechts een quantumgetal m_R, resp. m_P nodig om zo'n impulsmoment vast te leggen. Er geldt $J_z = \ell_z + I_z$, indien men de z-richting loodrecht op het x-y-vlak kiest. Voor het totale impulsmomentquantumgetal M geldt; $M = m_p + m_R$. Vanwege het feit dat de operator J_z commuteert met de Hamiltonoperator is het totale impulsmoment een behouden grootheid.

I.1 De gekoppelde-kanalen-methode.

a Het stelsel gekoppelde differentiaalvergelijkingen.

Bij het gebruik van de gekoppelde-kanalen-methode wordt de golffunctie van het totale systeem geschreven als een superpositie van golffuncties, welke corresponderen met een beperkt aantal aangeslagen toestanden van de kern en een beperkt aantal partiële golven voor het projectiel. Op deze beperkingen komen we hieronder terug.
Substitutie van deze totale golffunctie-ontwikkeling in de Schrödinger-vergelijking levert een stelsel gekoppelde tweede orde differentiaalvergelijkingen (d.v.-en) van beperkte omvang op.
Een bepaalde toestand van het systeem uitgezonderd de radiele vrijheidsgraad, gekarakteriseerd door een serie quantumgetallen, wordt ook wel kanaal genoemd.

Keert men nu terug naar het systeem van rotator en projectiel. De tijdonafhankelijke Schrödinger-vergelijking ziet er als volgt uit;

$$[H_R(\phi) + H_p(r,\theta) + V(r,\theta,\phi)]\,\Psi(r,\theta,\phi) = E\,\Psi(r,\theta,\phi)$$

Het linkerlid wordt gegeven door;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2J_R}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \frac{\hbar^2}{2M_p}\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right\} + \frac{\vec{p}^2}{2M_p r^2} + V(r,\theta,\phi)\right]\Psi(r,\theta,\phi) =$$

$$\left[\frac{-\hbar}{2J_R}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \frac{\hbar^2}{2M_p}\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right\} + V(r,\theta,\phi)\right]\psi(r,\theta,\phi).$$

Ontwikkelt men nu de golffunctie $\Psi(r,\theta,\phi)$ naar de eigenfuncties $\Phi_{m_R}(\phi)$ en $\Theta_{m_p}(\theta)$ van de operatoren $H_R(\phi)$ en $\vec{l}^2$ m.a.w.

$$\Psi(r,\theta,\phi) = \sum_{m_p' m_R'} \frac{u_{m_p' m_R'}(r)}{\sqrt{r}} (i)^{m_p'} \Theta_{m_p'}(\theta)\, \Phi_{m_R'}(\phi)$$

$$= \sum_{m_p' m_R'} \frac{u_{m_p' m_R'}(r)}{\sqrt{r}} (i)^{m_p'} \frac{e^{i m_p' \theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i m_R' \phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (5)$$

en substitueert men deze uitdrukking in de Schrödinger-vergelijking, dan vindt men na vermenigvuldiging met $(-i)^{m_p''} \Phi^*_{m_R''}(\phi)\, \Theta^*_{m_p''}(\theta)$ en integratie over θ en ϕ het stelsel gekoppelde d.v.-en.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_p} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\frac{1}{4} - m_p''^2}{r^2} \right\} + V_{m_p'' m_R'' m_p'' m_R''}(r) + E_{m_R''} - E \right] u_{m_p'' m_R''}(r)$$

$$= - \sum_{m_p' m_R' \neq m_p'' m_R''} V_{m_p'' m_R'' m_p' m_R'}(r)\, u_{m_p' m_R'}(r) \qquad (6)$$

Hierin is; m_p het baanimpulsmomentquantumgetal van het projectiel,

m_R het impulsmomentquantumgetal van de rotator,

E de totale energie van het systeem,

E_{m_R} de rotatie-energie van de rotator,

en

$$V_{m_p'' m_R'' m_p' m_R'}(r) = \iint (-i)^{m_p''} \frac{e^{-i m_p'' \theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-i m_R'' \phi}}{\sqrt{2\pi}} V(r,\theta,\phi) (i)^{m_p'} \frac{e^{i m_p' \theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i m_R' \phi}}{\sqrt{2\pi}}\, d\theta\, d\phi. \qquad (7)$$

Opm. In de ontwikkeling voor $\Psi(r,\theta,\phi)$ is een factor r tot de macht (-1/2) afgesplitst om in het stelsel d.v.-en de eerste afgeleide te vermijden.
De ontwikkelingscoëfficiënt $u_{m_p' m_R'}(r)$ wordt ook wel kanaalfunctie genoemd.
De golffuncties waarnaar ontwikkeld wordt, en die een compleet orthonormaal stelsel vormen, $(i)^{m_p} \frac{e^{i m_p \theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i m_R \phi}}{\sqrt{2\pi}}$, worden ook wel kanaalgolffuncties genoemd.

I.1b De oplosmethode.

De oplossingen van de gekoppelde d.v.-en moeten voldoen aan een aantal randvoorwaarden.

1. De oplossing $u(r).r^{-1/2}$ dient eindig te zijn in de oorsprong r=0, met als gevolg voor de functiewaarde u(r)=0 voor r=0.
2. Voor $r \geqslant r_m$ (r_m heet aansluitingspunt), veronderstelt men geen wisselwerking meer tussen targetkern en projectiel. (Eindige dracht van de wisselwerkingspotentiaal.) Aangezien hierdoor het matrixelement $V_{m''_P m''_R m'_P m'_R}(r)=0$ voor $r \geqslant r_m$, is het stelsel voor deze waarden van r ontkoppeld.

Voor $r \geqslant r_m$ gaat het stelsel over in;

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\frac{1}{4} - m_P'^2}{r^2} + k^2_{m'_R}\right] u_{m'_P m'_R}(r) = 0 \qquad (8)$$

Het golfgetal $k_{m'_R}$ wordt gegeven door de relatie;

$$k^2_{m'_R} = 2M_P(E - E_{m'_R})/\hbar^2$$

Men neemt hierbij aan dat voor de mee te nemen niveaus geldt dat er voldaan is aan de relatie $E_{m'_R} < E$, zodat $k_{m'_R}$ reëel is.

De algemene oplossing van deze d.v. (8) is ;

$$u_{m'_P m'_R}(r) = A\sqrt{r}\, J_{m'_P}(k_{m'_R} r) + B\sqrt{r}\, N_{m'_P}(k_{m'_R} r) . \qquad (9)$$

Hierin zijn $J_{m_P}(k_{m_R} r)$ en $N_{m_P}(k_{m_R} r)$ de cylindrische Besselfuncties van $m_P$de m_R eerste resp. tweede soort. (Het teken van $N_{m_P}(k_{m_R} r)$ is zodanig gedefiniëerd dat deze functie nadert naar $+\infty$ voor $r \downarrow 0$).
Gebruikt men de zgn. Hankelfuncties $H^{(+)}$ en $H^{(-)}$ dan geldt;

$$u_{m'_P m'_R}(r) = a\sqrt{r}\, H^{(-)}_{m'_P}(k_{m'_R} r) + b\sqrt{r}\, H^{(+)}_{m'_P}(k_{m'_R} r) . \qquad (10)$$

Asymptotisch geldt er voor de Hankelfuncties voor $r \longrightarrow +\infty$:

$$\sqrt{r}\, H^{(-)}_{m_P}(k_{m_R} r) \sim e^{-ik_{m_R} r} e^{i[(m_P+1)\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}]} \quad ;\text{inlopende golf (I).}$$

$\sqrt{r}\, H^{(+)}_{m_P}(k_{m_R} r) \sim e^{i k_{m_R} r} e^{-i[(m_P+1)\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{4}]}$;uitlopende golf (O).

Opm. Neemt men Coulombwisselwerking mee, (geladen projectiel), dan heeft men te maken met de reguliere (F) en irreguliere (G) Coulombfunc-ties.

Men kan de randvoorwaarde voor r_m nu als volgt formuleren. (Zie Lit.5).
In het kanaal (m_P, m_R), het zgn. ingangskanaal, zijn in het oneindige zowel inlopende als uitlopende golven, corresponderend met het feit, dat er een golf in dit kanaal invalt. De amplitude van de inlopende golf is hierbij op 1 genormeerd. In alle andere kanalen, de uitgangskanalen (m'_P, m'_R), zijn in het oneindige slechts uitlopende golven aanwezig, m.a.w.

$$u_{m'_P m'_R}(r \geq r_m) = \delta_{m'_P m_P} \delta_{m'_R m_R} I_{m_P}(k_{m_R} r) - \frac{k_{m_R}^{1/2}}{k_{m'_R}^{1/2}} . S_{m'_P m'_R m_P m_R} . O_{m'_P}(k_{m'_R} r) \qquad (11)$$

Hierbij is; k_{m_R} het golfgetal van het ingangskanaal (m_P, m_R), en $k_{m'_R}$ dat van het uitgangskanaal (m'_P, m'_R).
Het gekoppelde-kanalen-S-matrix-element, oftewel de waarschijnlijkheidsamplitude, voor de overgang van het kanaal (m_P, m_R) naar een ander kanaal (m'_P, m'_R), wordt gegeven door $S_{m'_P m'_R, m_P m_R}$. Dit matrixelement wordt ook wel genoteerd als

$$S_{m_P m_R \rightarrow m'_P m'_R} .$$

Opm. Vanwege het behoud van het totale impulsmoment M dient te gelden: $m_P + m_R = M = m'_P + m'_R$.

Men geeft nu de verscheidene kanalen (m'_P, m'_R) een rangnummer $\mu = 1, 2, \ldots N$, waarbij het targetkanaal (ingangskanaal) door $\mu = 1$ wordt aangegeven. Men gaat er hierbij van uit dat

voor de beschrijving van het probleem slechts een beperkt aantal kanalen (N) in de beschouwing hoeft te worden betrok-ken. Dit kan men als volgt inzien. De eerste beperking die empirisch volgt, is dat men te maken heeft met een maximaal rotatorimpulsmoment.
Voor de verstrooiing bevindt de rotator zich namelijk in de grondtoestand $m_R=0$. Vanwege de eindige wisselwerkingsduur tussen rotator en projectiel, en het eindige koppel dat op de rotator werkt, kan tijdens die wisselwerking slechts een eindige hoeveelheid impulsmoment worden overgedragen op de rotator. Er bestaat dus een maximaal rotatorimpulsmoment $m_{R_{max}}$.

Een andere beperking is het feit dat $m_p \leq m_{P_{max}}$.
Dit kan als volgt worden ingezien.
Indien de botsingsparameter b van het projectiel een bepaalde waarde b_{max} te boven gaat, zal er door de eindige dracht van de wisselwerkingspotentiaal geen wisselwerking meer plaatsvinden met de rotator. De projectielen met een baanimpulsmomentquantumgetal $m_p > m_{P_{max}}$, dus $b > b_{max}$ zullen geen wisselwerking met de rotator ondergaan. (Het impulsmoment is gelijk aan b.p, indien p de impuls van het projectiel is.)
In fig.4 ziet men dat projectielen met een botsingsparameter b groter dan b_{max} niet meer worden afgebogen.

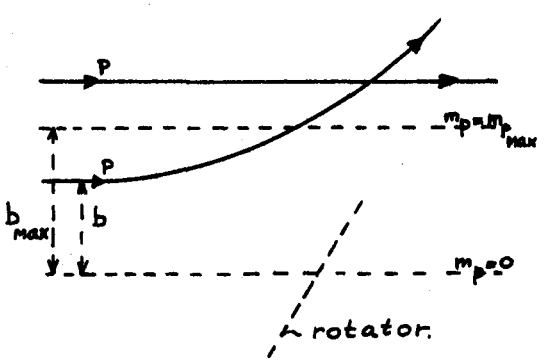


Fig.4: Maximaal baanimpulsmoment.

Opm. In werkelijkheid treedt bij de verstrooiing van een projectieldeeltje aan een permanent gedeformeerde kern met een rotatiespectrum, voor wat betreft significante koppeling, een maximaal kernimpulsmoment I_{max} op. Tevens treedt er een maximaal baanimpulsmoment van het projectiel op. Hodgson vindt voor het maximale baanimpulsmoment ℓ_{max} empirisch : $\ell_{max} \approx 2.4kR_0$. ($R_0$ is de kernstraal)

(Zie Lit.6)
Bij de verstrooiing van een projectieldeeltje aan een sferische kern met een vibratiespectrum, treedt weer een maximaal baanimpulsmoment van het projectiel op; tevens treedt hierbij een maximale energie-overdracht, en dus een maximale energie van de kern op.

Daar men met een beperkt aantal kanalen (N) te doen heeft, bevat het stelsel gekoppelde d.v.-en precies N gekoppelde tweede-orde d.v.-en. Van dit stelsel ligt, met in achtneming van de randvoorwaarden in r=0 en r_m, de oplossing volledig vast. Eerst creëert men echter N lineair onafhankelijke oplossingen door N verschillende randvoorwaarden in r=0 te kiezen voor de integratie. De reden hiervoor volgt nu.

De oplossing van een stelsel van N tweede-orde -d.v.-en wordt bepaald door 2N randvoorwaarden; in dit geval N randvoorwaarden in r=0 en N randvoorwaarden in r_m. Voor oplossing door numerieke integratie zouden echter 2N randvoorwaarden in r=0 vereist zijn. Door het feit dat je slechts over N rand-voorwaarden in r=0 beschikt, kun je nog N lineair onafhankelijke oplossingen creëren. Deze N lineair onafhankelijke oplossingen worden in r_m zodanig gecombineerd, dat ze aan de randvoorwaarden in r_m voldoen.

Aan elk van de N te creëren lineair onafhankelijke oplossingen kent men een index p toe. Elke oplossing omvat een stel functies (componenten) die met μ worden onderscheiden. Hierdoor heeft $u_\mu^p(r)$ betrekking op het μ-de kanaal van het systeem, bij gebruik van de randvoorwaarde p.

Vanwege de homogene dichtheidsverdeling in het binnengebied van de kern, verloopt de wisselwerkingspotentiaal in dit binnengebied vlak, m.a.w. is hier constant. (Zie hoofdstuk VII, en appendix B). Nemen we ook in dit tweedimensionale geval in de buurt van de oorsprong de wisselwerkingspotentiaal constant, dan gedraagt de oplossing van de d.v. zich "Besselachtig"

Vanwege dat Besselachtige karakter van de oplossingen kiest men de randvoorwaarden bij r=0 als volgt:

$$\lim_{r\to 0} \frac{u_\mu^p(r)}{r^{m_p+1/2}} = \begin{cases} \dfrac{(k_{m_R})^{m_P}}{2^{m_P}(m_p!)} & \text{voor } p=\mu \\ 0 & \text{voor } p\neq\mu \end{cases} \qquad (12)$$

m.a.w. het gedrag van de oplossingen in een kleine omgeving van de oorsprong is zodanig dat in alle kanalen,behalve één, de kanaalfuncties en hun afgeleiden nul zijn.In dat ene kanaal gedraagt de functie zich als een Besselfunctie voor klei -ne r.
Voor elke randvoorwaarde (mathematische aanzet) lost men nu het stelsel d.v.-en op en verkrijgt aldus N stelsels (mathematische) oplossingen.

I.h.a. zullen de door integratie te bepalen kanaalfuncties in het oneindige zowel in- als uitlopende golven bevatten. Slechts één lineaire combinatie van deze mathematische oplossingen (namelijk de fysische oplossing) voldoet ook aan de randvoorwaarde in $r=r_m$.
Voor het fysisch van belang zijnde geval van een inlopende golf in het ingangskanaal heeft het formuleren van de randvoorwaarde in r_m onderstaande vorm (zie appendix C):

$$\begin{aligned}
&\bar{a}_1^1 u_1^1(r_m)+\ldots+\bar{a}_N^1 u_1^N(r_m)+S_{11}O_{m_{p_1}}(k_{m_{R_1}}r_m)+ &&= I_{m_{p_1}}(k_{m_{R_1}}r_m)\\
&\bar{a}_1^1 u_\mu^1(r_m)+\ldots+\bar{a}_N^1 u_\mu^N(r_m)+\ldots+S_{\mu 1}O_{m_{p_\mu}}(k_{m_{R_\mu}}r_m)+ &&= 0 \qquad (13)\\
&\bar{a}_1^1 u_N^1(r_m)+\ldots+\bar{a}_N^1 u_N^N(r_m)+\ldots &&+S_{N1}O_{m_{p_N}}(k_{m_{R_N}}r_m)=0
\end{aligned}$$

waarin b.v. $\bar{a}_2^1 u_\mu^2(r_m)$ een verkorte notatie is.

De bovenindex van $\bar{a}$,en die van $u(r_m)$ geeft het kanaalnummer aan,waarin de inlopende golf optreedt(1),resp. het kanaal waarin de mathematische aanzet plaatsvindt.
Tesamen met een analoog stelsel,met dezelfde coëfficiënten $\bar{a}$,voor de afgeleiden van de functies verkrijgt men dan 2N vergelijkingen met de 2N coëfficiënten $\bar{a}_i^1$ en $S_{i,1}$;i=1,N. (Zie appendix C).
Op analoge manier bepaalt men de coëfficiënten voor een inlopende golf in een ander kanaal.

I.1c Het verband tussen de verstrooiingsamplitude en de verstrooiingsmatrixelementen.

De verstrooiing van een deeltjesgolf aan een targetkern wordt bepaald door de Hamiltoniaan en de begintoestand van het systeem.In de begintoestand bevindt het deeltje zich op grote afstand van de targetkern,zodat men de wisselwerking kan verwaarlozen.De toestandsfunctie van het systeem is dan het product van de toestandsfuncties van het deeltje en van de kern,immers $H=H_P+H_R$.
Vanwege de eindige dracht van de interactiepotentiaal legt men aan de oplossing van de tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking de volgende randvoorwaarde op;

$$\psi(r,\theta,\phi) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{i\vec{k}_{m_R}\cdot\vec{r}}\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} + \sum_{m'_R} f_{m'_R m_R}(\theta)\frac{e^{ik_{m'_R}r}}{\sqrt{r}}\frac{e^{im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (14)$$

zodat de verstrooiing van de vlakke golf aan de potentiaal gerepresenteerd wordt door de naar buiten lopende "bolgolf" $f_{m'_R m_R}(\theta)\, e^{ik_{m'_R}r}/\sqrt{r}$ .De grootheid $f_{m'_R m_R}(\theta)$ heet de verstrooiingsamplitude behorende bij de overgang van kanaal (m_P,m_R) naar kanaal (m'_P,m'_R).

Schrijft men de vlakke projectielgolffunctie als een superpositie van in- en uitlopende golven volgens

$$e^{i\vec{k}_{m_R}\cdot\vec{r}} = \sum_{m'_P} (i)^{m'_P} e^{im'_P\theta} J_{m'_P}(k_{m_R} r) =$$

$$\sum_{m_p' m_R'} (i)^{m_p'} \left[a^{\circ}_{m_p' m_R'} H^{(-)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) + b^{\circ}_{m_p' m_R'} H^{(+)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) \right] \frac{e^{i m_p' \theta}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (15)$$

dan geldt; $a^{\circ}_{m_p' m_R'} = -\sqrt{\frac{\pi}{2}}(i)^{-1} \delta_{m_R' m_R}$, en $b^{\circ}_{m_p' m_R'} = -a^{\circ}_{m_p' m_R'}$.

De uitlopende golf $H^{(+)}_{m_P}(k_{m_R} r)$ heeft voor $r \longrightarrow \infty$ de asymptotische waarde:

$$H^{(+)}_{m_p}(k_{m_R} r) = \frac{e^{i k_{m_R} r}}{\sqrt{\frac{\pi}{2} k_{m_R} r}} \cdot e^{i\left[(m_p+1)\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right]} \qquad (16)$$

Substitutie van (15) en (16) in (14) levert;

$$\psi(r,\theta,\phi) \underset{r\to\infty}{=} -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{m_p' m_R'} (i)^{m_p'-1} \delta_{m_R' m_R} \left[H^{(-)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) - H^{(+)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) \right] \frac{e^{i m_p' \theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i m_R' \phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$+ \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{m_R'} f^{(\theta)}_{m_R' m_R} \cdot H^{(+)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) \sqrt{k_{m_R'}} \cdot e^{i\left[(m_p'+1)\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right]} \cdot \frac{e^{i m_R' \phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (14a)$$

Voor de oplossing van de Schrödinger-vergelijking voor $r \geq r_m$ geldt;

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{m_p' m_R'} \left[a^{\circ}_{m_p' m_R'} H^{(-)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) + b_{m_p' m_R'} H^{(+)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) \right] (i)^{m_p'} \frac{e^{i m_p' \theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i m_R' \phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (17)$$

Uit de definitie van de verstrooiingsmatrix S en de totale golffunctie in (17) volgt;

$$\underline{b} = -\underline{\underline{S}}\, \underline{a}^{\circ} \qquad \text{of} \qquad b_{m_p' m_R'} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{m_p''} S_{m_p' m_R', m_p'' m_R} (i)^{-l} \qquad (18)$$

Substitutie van deze uitdrukking in (17) levert voor de golffunctie: $\psi(r,\theta,\phi) \underset{r \geq r_m}{=}$

$$-\sum_{m_p' m_R'} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (i)^{-l} \left[\delta_{m_R' m_R} H^{(-)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) - \sum_{m_p''} S_{m_p' m_R', m_p'' m_R} H^{(+)}_{m_p'}(k_{m_R'} r) \right] (i)^{m_p'} \frac{e^{i m_p' \theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i m_R' \phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (19)$$

Het verband tussen de verstrooiingsamplitude $f_{m_R' m_R}(\theta)$ en de verstrooiingsmatrixelementen wordt nu gegeven door (20). Deze uitdrukking vindt men door het gelijkstellen van de coëfficiënten der uitlopende golven in uitdrukkingen (19) en (14a).

$$f^{(\theta)}_{m_R' m_R} = \sum_{m_p'} \left[\sum_{m_p''} S_{m_p' m_R', m_p'' m_R} - \delta_{m_R' m_R} \right] \frac{e^{i(m_p'\theta - \frac{\pi}{4})}}{\sqrt{2\pi k_{m_R'}}} \qquad (20)$$

Uit relatie (20) kan men makkelijk de uitdrukking bepalen voor een experimentele grootheid,namelijk de zgn. differentiele werkzame doorsnede,die gedefiniëerd wordt als;

$$\sigma_{m'_R}(\theta) = \left| f_{m'_R m_R}(\theta) \right|^2 \qquad (21)$$

(Voor zover niet duidelijk anders vermeld,beschrijft deze grootheid steeds de aanslag naar kerntoestand m'_R ,vanuit de grondtoestand.)

I.2 De adiabatische benadering.

a Het stelsel gekoppelde d.v.-en.

Als uitgangspunt dient hier het stelsel gekoppelde d.v.-en van de gekoppelde-kanalen-methode.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_p} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\frac{1}{4} - m''^2_p}{r^2} \right\} + V_{m''_p m''_R m''_p m''_R}(r) - E + E_{m''_R} \right] u_{m''_p m''_R}(r) = - \sum_{m'_p m'_R \neq m''_p m''_R} V_{m''_p m''_R m'_p m'_R}(r)\, u_{m'_p m'_R}(r) \qquad (22)$$

In de adiabatische benadering veronderstelt men dat de energie-verschillen der diverse kerntoestanden ($\Delta E_{m''_R}$) voldoen -de klein zijn;m.a.w.er zijn gedurende de botsing slechts een beperkt aantal dichtbij elkaar gelegen rotatie-toestanden significant gekoppeld.Men kan dan $E_{m''_R}$ door een constante $\mathcal{E}$ ver -vangen.Dit komt er op neer dat men de rotatie-energie-operator door een constante $\mathcal{E}$ vervangt in de Hamiltonoperator.

Klassiek gezien dient de verblijftijd van het projectiel in het potentiaalveld van de kern klein te zijn t.o.v. de rotatie-periode van de kern.Hierdoor kan men de oriëntatie van de kern gedurende de botsing constant veronderstellen.

We zullen zien dat we in deze benadering de Schrödinger-vergelijking voor elke oriëntatie van de kern afzonderlijk kunnen oplossen.Het verstrooiingsprobleem reduceert hiermee tot deeltjesverstrooiing aan een stilstaande potentiaal.
De Schrödinger-vergelijking luidt nu;

$$[H_p(r,\theta)+V(r,\theta;\phi)]\,\psi^{ad}(r,\theta;\phi)=(E-\varepsilon)\,\psi^{ad}(r,\theta;\phi) \qquad (23)$$

Hierin treedt ϕ slechts op als parameter.

Opm. Als men nu een oplossing $\psi^{ad}(r,\theta;\phi)$ bepaald heeft, mag men deze vermenigvuldigen met een willekeurige functie $f(\phi)$ van ϕ. De productfunctie $\psi^{ad}(r,\theta;\phi)f(\phi)$ is dan ook weer een oplossing van de adiabatische Schrödinger-vergelijking. Van dit gegeven wordt hierna gebruik gemaakt. Dit wil echter niet zeggen dat deze productfunctie voor elke $f(\phi)$ een goede benadering is voor de werkelijke toestandsfunctie. De functie $f(\phi)$ zou hiervoor niet te sterk van ϕ mogen afhangen. Neem b.v. $f(\phi)=\delta(\phi-\phi_0)$. In deze delta-functie zijn alle kerngolffuncties $\exp(im_R\phi)$ vertegenwoordigt, zodat alle mogelijke rotatortoestanden in de beschouwing dienen te worden betrokken. Bij de bepaling van $\psi^{ad}(r,\theta;\phi)$ is er echter van uitgegaan dat slechts een beperkt aantal dichtbij elkaar gelegen rotatortoestand -en meespelen.

Ontwikkelt men de adiabatische golffunctie nu als volgt:

$$\psi^{ad}(r,\theta;\phi)=\sum_{m_p'}\frac{u_{m_p'}(r;\phi)}{\sqrt{r}}\,\frac{e^{im_p'\theta}}{\sqrt{2\pi}}\,(i)^{m_p'} \qquad (24)$$

Substitueert men deze ontwikkeling in de adiabatische Schrödinger-vergelijking (23), en vermenigvuldigt men de verkregen uitdrukking met $[(i)^{m_p''}\exp(im_p''\theta)/(2\pi)^{1/2}]^*$, dan vindt men na integratie over θ het stelsel gekoppelde d.v.-en in de adiabatische benadering.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_p}\left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\frac{1}{4}-m_p''^2}{r^2}\right\}+V_{m_p''m_p''}(r;\phi)-(E-\varepsilon)\right]u_{m_p''}(r;\phi)=$$

$$-\sum_{m_p'\neq m_p''}V_{m_p''m_p'}(r;\phi)\,u_{m_p'}(r;\phi) \qquad (25)$$

Hierbij geldt voor het potentiaalmatrixelement onderstaande

uitdrukking:

$$V_{m_p'' m_p'}(r;\phi) = \int (-i)^{m_p''} \frac{e^{-im_p''\theta}}{\sqrt{2\pi}} V(r,\theta;\phi) (i)^{m_p'} \frac{e^{im_p'\theta}}{\sqrt{2\pi}} d\theta. \qquad (26)$$

Het stelsel d.v.-en (25) dient voor elke ϕ afzonderlijk opgelost te worden.

Opm. De adiabatische benadering komt in dit geval op het volgende neer. De coördinaat ϕ varieert langzaam t.o.v. de coördinaten r en θ. Hierdoor vervangt men bij het berekenen van het (r,θ)-afhankelijke gedeelte van de golffunctie, dat gedeelte van de Hamiltonoperator dat $\partial/\partial\phi$ bevat, door een constante. M.a.w. $H(r,\partial/\partial r,\theta,\partial/\partial\theta,\phi,\partial/\partial\phi) \longrightarrow H(r,\partial/\partial r,\theta,\partial/\partial\theta,\phi)$. De langzaam variërende vrijheidsgraad ϕ heeft geen invloed op de snel variërende vrijheidsgraden (r,θ). Het gedrag van de snel variërende vrijheidsgraden wordt berekend voor elke waarde van de langzame coördinaat afzonderlijk.

Opm. Men ziet dat in het stelsel m_R niet meer voorkomt; wel is het stelsel afhankelijk van kernoriëntatie ϕ. Dit zijn de gevolgen van het feit dat men van de m_R-representatie voor de kern overgegaan is op de ϕ-representatie.

Keren we nu terug naar het stelsel gekoppelde d.v.-en (25). Voor $r \geq r_m$ is het stelsel ontkoppeld. De S-matrixelementen kunnen in de adiabatische benadering als volgt gedefiniëerd worden:

$$u_{m_p'}(r;\phi) = \delta_{m_p' m_p} I_{m_p'}(k_{m_R} r) - S_{m_p' m_p}(\phi;E) O_{m_p'}(k_{m_R} r) \qquad (27)$$

Voor het golfgetal geldt : $k_{m_R}^2 = 2M_p(E-\varepsilon)/\hbar^2$

Aan de oplossing van de tijdonafhankelijke Schrödinger-vergelijking legt men weer de randvoorwaarde op,

$$\psi^{ad}(r,\theta;\phi) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{i\vec{k}_{m_R}\cdot\vec{r}} + f^{ad}(\theta;\phi) \frac{e^{ik_{m_R} r}}{\sqrt{r}}. \qquad (28)$$

De verstrooiingsamplitude hangt nu parametrisch van ϕ af. Analoog aan de afleiding in paragraaf I.1c volgt dan het verband tussen de verstrooiingsamplitude $f^{ad}(\theta;\phi)$ en verstrooiingsmatrixelement $S_{m'_P m_P}(\phi;E)$, namelijk;

$$f^{ad}(\theta;\phi) = \sum_{m'_P} \left[\sum_{m''_P} S_{m'_P m''_P}(\phi;E) - 1 \right] \frac{e^{i(m'_P\theta - \frac{\pi}{4})}}{\sqrt{2\pi k_{m'_R}}} \qquad (29)$$

Nu zijn we in staat om een relatie af te leiden tussen de adiabatische en de gekoppelde-kanalen-verstrooiingsamplitude. Als $\psi^{ad}(r,\theta;\phi)$ een oplossing is van $H^{ad}\psi^{ad}=E\psi^{ad}$, dan is $\psi^{ad}(r,\theta;\phi).\exp(im_R\phi)/(2\pi)^{1/2}$ dit ook. (H^{ad} bevat geen $\partial/\partial\phi$-termen.)
Er geldt dus ook;

$$\psi^{ad}(r,\theta;\phi)\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{i\vec{k}_{m_R}\cdot\vec{r}}\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} + f^{ad}(\theta;\phi)\frac{e^{ik_{m_R}r}}{\sqrt{r}}\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}. \qquad (30)$$

overeenkomende met een projectiel met impuls $\hbar.k_{m_R}$, dat de rotator in de toestand $\exp(im_R\phi)/(2\pi)^{1/2}$ nadert.
Beschouwing van ditzelfde probleem in de gekoppelde-kanalen-formulering leverde:

$$\psi(r,\theta,\phi) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{i\vec{k}_{m_R}\cdot\vec{r}}\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} + \sum_{m'_R} f_{m'_R m_R}(\theta)\frac{e^{im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\frac{e^{ik_{m'_R}r}}{\sqrt{r}}. \qquad (31)$$

Door nu de adiabatische golffunctie $\psi^{ad}(r,\theta;\phi).\exp(im_R\phi)/\sqrt{2\pi}$ te ontwikkelen naar het volledige stelsel eigenfuncties van de targetkern kan men het verband tussen de verstrooiingsamplitude van de inelastische verstrooiing $f_{m'_R m_R}(\theta)$ en de adiabatische verstrooiingsamplitude $f^{ad}(\theta;\phi)$ afleiden.

$$\psi^{ad}(r,\theta;\phi)\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} = \sum_{m'_R}\frac{e^{im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\left\langle \frac{e^{im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} \middle| \psi^{ad}(r,\theta;\phi)\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\right\rangle$$

$$= \sum_{m'_R}\frac{e^{im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\int \frac{e^{-im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\psi^{ad}(r,\theta;\phi)\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\,d\phi. \qquad (32)$$

Asymptotisch geldt;

$$\psi^{ad}(r,\theta;\phi)\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} \xrightarrow[r\to\infty]{} =$$

$$\sum_{m'_R}\frac{e^{im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\int\frac{e^{-im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\left\{e^{i\vec{k}_{m_R}\cdot\vec{r}} + f^{ad}(\theta;\phi)\frac{e^{ik_{m_R}r}}{\sqrt{r}}\right\}\frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}}\,d\phi \qquad (33)$$

Stelt men nu (31) en (33) aan elkaar gelijk, dan vindt men,

gebruikmakend van de gelijkheid $k_{m'_R} = k_{m_R}$, die in het adiabatische geval wordt verondersteld,

$$f_{m'_R m_R}(\theta) = \int \frac{e^{-im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} f^{ad}(\theta;\phi) \frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} d\phi . \tag{34}$$

Substitutie van (29) in (34) levert;

$$f_{m'_R m_R}(\theta) = \sum_{m'_p} \left[\sum_{m''_p} \int \frac{e^{-im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} S_{m'_p m''_p}(\phi;E) \frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} d\phi - \delta_{m'_R m_R} \right] \frac{e^{i(m'_p\theta - \frac{\pi}{4})}}{\sqrt{2\pi k_{m'_R}}} \tag{35}$$

Vergelijkt men deze uitdrukking met (20), dan volgt hieruit,

$$S^{ad}_{m'_p m'_R; m''_p m''_R}(E) = \int \frac{e^{-im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} S_{m'_p m''_p}(\phi;E) \frac{e^{im''_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} d\phi . \tag{36}$$

Opm. Relatie (36) had men directer kunnen vinden door (27) rechts te vermenigvuldigen met $\exp(im''_R\phi)/(2\pi)^{1/2}$. (Zie opmerking op blz.16)
Links vermenigvuldigen met $\exp(im'_R\phi)/(2\pi)^{1/2}$ en integratie over ϕ levert dan direct relatie (36).

Formule (34) brengt tot uitdrukking dat de inelastische verstrooiingsamplitude voor de aanslag van de grondtoestand naar de n-de aangeslagen toestand, bepaald kan worden door de elastische verstrooiingsamplitude te "sandwichen" tussen de kerngolffuncties van de n-de aangeslagen toestand en de grond-toestand. In de adiabatische benadering kunnen, ondanks het feit dat men in de Hamiltonoperator de kinetische energie-operator van de kern door een constante vervangt (of verwaarloost), overgangen van de kern beschreven worden, anders dan men bij een oppervlakkige beschouwing zou kunnen concluderen.

Opm. Empirisch blijkt dat men het stelsel gekoppelde kanalen kan afkappen. Indien men veronderstelt dat de functies $f(\theta;\phi)$ en $S(\phi:E)$ slechts zwak afhankelijk zijn van ϕ dan zullen slechts dicht bij elkaar gelegen rotatietoestanden onderling sterk gekoppeld zijn. (Hoe hoger de energie van deze toestanden, hoe sterker ze van ϕ afhangen). Uitgaande van de grondtoestand doen

dan alleen de laagste rotator-toestanden mee.Uit (34) blijkt dan dat m'_R en m_R niet teveel mogen verschillen; er heeft beperkte impulsmomentoverdracht plaats.

I.2b Het lichaamsvaste assenstelsel.

Men beschouwt hier de verstrooiing van het projectiel aan de rotator in een lichaamsvast assenstelsel,omdat zal blijken dat dit voor de adiabatische benadering voordelig is,m.b.t. het stelsel gekoppelde d.v.-en.Daar de wisselwerkingspotentiaal slechts afhangt van de relatieve positie van het projectiel t.o.v. de rotator is $V(r,\theta,\phi)=V(r,\theta-\phi)$ alleen een functie van r en het verschil van θ en ϕ nl. $\theta-\phi$.Men past nu een deeltjescoördinatentransformatie toe volgens:$\phi'=\phi,\theta'=\theta-\phi$.
Nu zijn $(r',\theta')=(r,\theta-\phi)$ de deeltjescoördinaten t.o.v. een coordinatenstelsel dat met de rotator meebeweegt (lichaamsvast assenstelsel),en waarin de x'-as overeenkomt met de rotator-(symmetrie)-as.Beschouw nu de integraaluitdrukking voor het matrixelement $\langle m'_P m'_R \mid H \mid m_P m_R \rangle_{\theta\phi}$ in de nieuwe coördinaten.
Het matrixelement

$$\iint \frac{e^{-im'_P\theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-im'_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} \left[-\frac{\hbar^2}{2M_P}\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right\} - \frac{\hbar^2}{2J_R}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \frac{\hbar^2}{2M_P r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + V(r,\theta-\phi)\right] \frac{e^{im_P\theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{im_R\phi}}{\sqrt{2\pi}} d\theta\, d\phi \tag{37}$$

gaat m.b.v.

$$\phi'=\phi \qquad \text{en dus} \qquad \partial/\partial\theta = \partial/\partial\theta'$$
$$\theta'=\theta-\phi \qquad\qquad \partial/\partial\phi = \partial/\partial\phi' - \partial/\partial\theta' \quad \text{over in;}$$

$$\left[\left\{\frac{\hbar^2 m_R^2}{2J_R} - \frac{\hbar^2}{2M_P}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 m_P^2}{2M_P r^2}\right\}\delta_{m'_P m_P} + V_{m'_P m_P}\right]\delta_{m_P+m_R,\,m'_P+m'_R} \tag{38}$$

Hieruit ziet men dat er diagonaliteit optreedt in $M=m_P+m_R$, (totale impulsmomentquantumgetal bij totale impulsmoment J_z) waarin het behoud van het totale impulsmoment weer tot uit-

drukking komt.

Hoe ziet het gekoppelde stelsel d.v.-en er nu uit? In het gekoppelde-kanalen-formalisme,met de ontwikkeling

$$\Psi(r'\theta'\phi') = \sum_{M,m_p} \frac{u_{M m_p}(r)}{\sqrt{r}} \frac{e^{i m_p \theta'}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i M \phi'}}{\sqrt{2\pi}} (i)^{m_p} \tag{39}$$

voor de golffunctie,volgt;

$$\left[\frac{\hbar^2 m_R^2}{2J_R} - E + \frac{\hbar^2 m_p^2}{2M_p r^2} - \frac{\hbar^2}{2M_p}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{4r^2}\right) + V_{m_p m_p}(r)\right] u_{M m_p}(r) = - \sum_{m_p' \neq m_p} V_{m_p m_p'}(r)\, u_{M m_p'}(r) . \tag{40}$$

Hieruit blijkt dat het gekoppelde stelsel d.v.-en afhankelijk is van m_P èn m_R afzonderlijk.

In de adiabatische benadering,met de ontwikkeling

$$\Psi(r;\theta') = \sum_{m_p'} \frac{u_{m_p'}(r)}{\sqrt{r}} \frac{e^{i m_p' \theta'}}{\sqrt{2\pi}} (i)^{m_p'} \tag{41}$$

voor de golffunctie,volgt;

$$\left[(\varepsilon - E) - \frac{\hbar^2}{2J_R}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\frac{1}{4} - m_p^2}{r^2}\right) + V_{m_p m_p}(r)\right] u_{m_p}(r) = - \sum_{m_p' \neq m_p} V_{m_p m_p'}(r)\, u_{m_p'}(r) \tag{42}$$

Het gekoppelde stelsel d.v.-en hangt niet meer van M,wel nog van m_P af.

Hieruit ziet men dat in de adiabatische benadering de keu -ze van het lichaamsvaste assenstelsel voordelig is;vergelijk met (26),dat voor elke ϕ afzonderlijk diende te worden opgelost.

II. ROTATIONELE AANSLAG VAN EEN DRIE-DIMENSIONALE STARRE ROTATOR.

De bedoeling van dit hoofdstuk is om naar analogie met de twee-dimensionale adiabatische beschouwing,de grote lijnen van de drie-dimensionale adiabatische methode aan te geven.

Hoe ziet nu het stelsel gekoppelde d.v.-en er uit voor de adiabatische benadering in de drie-dimensionale beschouwing? Ter oplossing van de twee-dimensionale adiabatische tijdonafhankelijke Schrödinger-vergelijking werd voor de golffunc-tie-ontwikkeling gekozen;

$$\Psi(r,\theta') = \sum_{m_p} \frac{u_{m_p}(r)}{\sqrt{r}} \frac{e^{i m_p \theta'}}{\sqrt{2\pi}} (i)^{m_p} \qquad (1)$$

waarin m_p het quantumgetal is behorende bij het baanimpulsmoment ℓ_z van het projectiel.

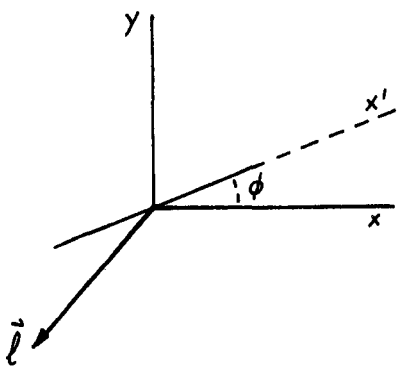


Fig.5a:Tweedimensionaal;$\vec{\ell} \perp$ x-y-vlak.

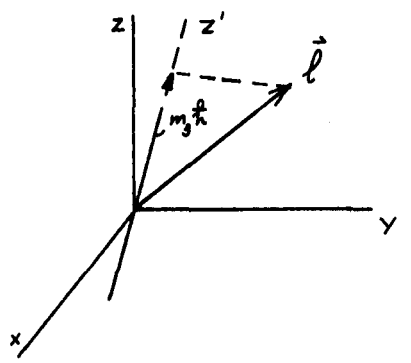


Fig.5b:Driedimensionaal;projectie van $\vec{\ell}$ op z'-as behouden.

In de drie-dimensionale beschouwing staat $\vec{\ell}$ in het algemeen niet loodrecht op de z'-as(lichaamsvaste assenstelsel wordt aangegeven met x'-y'-z'-assenstelsel;de z'-as komt overeen met de symmetrie-as van de rotator),met als gevolg dat men twee quantumgetallen nodig heeft om $\vec{\ell}$ vast te leggen.Quantumgetal

l bepaalt de grootte van $\vec{l}$, m_3 bepaalt de projectie $l_{z'}$ van $\vec{l}$ op de z'-as.(Zie fig. 5).

In het twee-dimensionale geval is het hoekafhankelijke deel van de golffunctie slechts afhankelijk van θ', de hoek tussen $\vec{r}$ en de rotator-as x'. In de drie-dimensionale beschouwing is de golffunctie afhankelijk van de twee bolhoeken θ' en ϕ' t.o.v. een x'-y'-z'-assenstelsel.

Naar analogie met de twee-dimensionale beschouwing zal in de drie-dimensionale beschouwing de volgende keus voor de golf-functie-ontwikkeling voor de hand liggen;

$$\Psi(r',\theta',\phi') = \sum_{l m_3} \frac{u_{l m_3}(r')}{r'} Y_{l m_3}(\theta',\phi') (i)^l \qquad (2)$$

(De functie $\exp(im_p\theta)$ is de eigenfunctie van de twee-dimensionale operator $\vec{l}^2 = -\hbar^2 \partial^2/\partial\theta^2$; $Y_{lm_3}(\theta,\phi)$ is de eigenfunctie van de drie-dimensionale operator

$$\vec{l}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right] \quad .)$$

Men kan echter aantonen dat $l_{z'}$ een behouden grootheid is: de adiabatische Hamiltonoperator ziet er als volgt uit;

$$H = \varepsilon - \frac{\hbar^2}{2M_p} \left\{ \frac{1}{r'} \frac{\partial^2}{\partial r'^2} r' + \frac{1}{r'^2} \left(\frac{1}{\sin^2\theta'} \frac{\partial^2}{\partial\phi'^2} + \frac{1}{\sin\theta'} \frac{\partial}{\partial\theta'} \sin\theta' \frac{\partial}{\partial\theta'} \right) \right\} + V(r',\theta') \qquad (3)$$

Deze operator commuteert met de aan $l_{z'}$ toegevoegde operator $-i\hbar\, \partial/\partial\phi'$; dit betekent dat $l_{z'}$ een behouden grootheid en m_3 dus een goed quantumgetal is.

Voor elke m_3 afzonderlijk kan men de Schrödinger-vergelijking oplossen zodat het gekoppelde stelsel d.v.-en dat men vindt ontkoppeld is naar m_3. We kiezen dus voor de golffunctie-ontwikkeling;

$$\Psi(r',\theta',\phi') = \frac{1}{r'} \sum_{l} u_{l m_3}(r') Y_{l m_3}(\theta',\phi') (i)^l \qquad (4)$$

De drie-dimensionale adiabatische tijdonafhankelijke Schrödinger-vergelijking in het lichaamsvaste assenstelsel wordt

gegeven door:

$$H^{ad}\,\Psi(r',\theta',\phi') = \left[\varepsilon - \frac{\hbar^2}{2M_p}\left\{\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\hbar^2\sin^2\theta'}\frac{\partial^2}{\partial\phi'^2} + \frac{1}{\hbar^2}\sin\theta'\frac{\partial}{\partial\theta'}\sin\theta'\frac{\partial}{\partial\theta'}\right)\right\} + V(r,\theta')\right]\Psi(r',\theta',\phi') = E\,\Psi(r'\theta'\phi') \qquad (5)$$

Substitutie van de ontwikkeling (4) in (5) en vermenigvuldiging links met $\left[(i)^{\ell} Y_{\ell m_3}(\theta',\phi')\right]^*$ levert na integratie over θ' en ϕ' het stelsel gekoppelde d.v.-en;

$$\left[(\varepsilon - E) + \frac{\hbar^2}{2M_p}\frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} - \frac{\hbar^2}{2M_p}\frac{d^2}{dr^2} + V_{\ell'm_3'\ell'm_3'}(r)\right]u_{\ell'm_3'}(r) = -\sum_{\ell+\ell'} V_{\ell'm_3'\ell m_3}(r)\,u_{\ell m_3}(r) \qquad (6)$$

waarin het potentiaalmatrixelement wordt gegeven door:

$$V_{\ell'm_3'\ell m_3}(r) = \iint d\phi' d\theta' \sin\theta' (-i)^{\ell'} Y^*_{\ell'm_3'}(\theta'\phi')\,V(r,\theta'\phi')\,Y_{\ell m_3}(\theta'\phi')(i)^{\ell} \,. \qquad (7)$$

Opm. In de adiabatische benadering is in de Hamiltonoperator de rotatie-energie-operator vervangen door een constante ε. Hierdoor kan men de Schrödinger-vergelijking voor elke kernoriëntatie afzonderlijk oplossen. De oriëntatie wordt bepaald door de Eulerhoeken $\alpha=(\theta_1,\theta_2,\theta_3)$ t.o.v. het lab-systeem. Na het oplossen van de Schrödinger-vergelijking in het lichaamsvaste assenstelsel (z'-assenstelsel) kan men m.b.v. een transformatie tussen lichaamsvast en lab-stelsel het verstrooiingsprobleem voor alle oriëntaties oplossen. (Zie Lit. 1)

III. HET "VIJFDIMENSIONALE" HARMONISCHE-OSCILLATOR-MODEL.

Dit model dient ter beschrijving van een vibrerende sferische kern.

Een niet gedeformeerde even-even-kern vertoont zoals men gezien heeft in de inleiding wat betreft de laagst gelegen energieniveaus een vibratiespectrum.Hoe beschrijft men nu het gedrag van een vibrerend kernoppervlak,dat deze trilling-en uitvoert als gevolg van de collectieve bewegingen van de nucleonen?

I.p.v. de kern te beschrijven met 3A vrijheidsgraden,(elk van de A nucleonen heeft 3 vrijheidsgraden),introduceert men nieuwe coördinaten $\alpha_{\lambda\mu}$.

Deze coördinaten $\alpha_{\lambda\mu}$ heten de zgn.collectieve coördinaten van de kern.

M.b.v. een klassiek beeld van de kern definiëert men deze variabelen.Hieruit construeert men een Hamiltoniaan.Na toepassing van de regels uit de quantummechanica verkrijgt men de gequantiseerde vorm van het klassieke beeld.

De collectieve coördinaten $\alpha_{\lambda\mu}$ die de beweging van het kern-oppervlak beschrijven,worden gedefiniëerd door de ontwikkeling van de voerstraal $R(\theta,\phi,t)$ naar het kernoppervlak,naar bolfuncties;

$$R(\theta,\phi,t) = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha^*_{\lambda\mu}(t)\, Y_{\lambda\mu}(\theta,\phi) \right] \qquad (1)$$

Klassiek zijn de sferische tensoren $\alpha_{\lambda\mu}$ tijdafhankelijk en beschrijven een trillend oppervlak.

Uit de invariantie van $R(\theta,\phi,t)$ onder rotaties,(waarbij zowel waarnemingsrichting als kernoppervlak gedraaid worden),volgt dat $\sum_{\lambda\mu} \alpha^*_{\lambda\mu}(t)\, Y_{\lambda\mu}(\theta\phi)$ een scalair moet zijn.

M.b.v. $Y_{\lambda\mu}(\theta',\phi') = \sum_{\nu} D^{[\lambda]}_{\nu\mu}(\theta_j)\, Y_{\lambda\nu}(\theta,\phi)$ volgt dan dat er geldt:

$$\alpha'_{\lambda\mu}(t) = \sum_{\nu} D^{[\lambda]}_{\nu\mu}\, \alpha_{\lambda\nu}(t) .$$

Hierin zijn (θ_j) de Eulerhoeken,die de stand van het gedraaide stelsel t.o.v. het oorspronkelijke assenstelsel aangeven.

Vanwege het feit dat $R(\theta,\phi,t)$ een reële grootheid is volgt met behulp van de eigenschap van de bolfuncties, $Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\phi) = (-1)^{\mu} Y_{\lambda,-\mu}(\theta,\phi)$ dat

$$\alpha^*_{\lambda\mu} = (-1)^{\mu} \alpha_{\lambda,-\mu} \qquad (2)$$

Opm. Men zou in uitdrukking (1) kunnen werken met reële parameters door reële combinaties van bolfuncties te kiezen.

Neemt men in de ontwikkeling (1) alleen termen mee met $\lambda=2$, m.a.w.

$$R(\theta,\phi,t) = R_0 \left[1 + \sum_{\mu} \alpha^*_{2\mu}(t)\, Y_{2\mu}(\theta,\phi)\right] \qquad (1a)$$

dan veronderstelt men dat het kernoppervlak slechts deformaties van het quadrupooltype vertoont.
Voor de beschrijving van het kernoppervlak voor wat betreft quadrupool -vibraties en/of -deformaties zijn er vijf afhankelijke complexe parameters $\alpha_{2\mu}$ ($\mu=-2,-1,0,1,2$) nodig.
Relatie (2) beperkt het aantal onafhankelijke reële parameters echter tot vijf.

I.h.a. bestaat de Lagrangiaan uit een kinetische energieterm en een potentiële energieterm volgens:

$$\mathcal{L}(\alpha,\dot{\alpha}) = T(\alpha,\dot{\alpha}) - V(\alpha) \qquad (3)$$

De Hamiltoniaan is dan van de vorm:

$$\mathcal{H}(\pi,\alpha) = T(\pi,\alpha) + V(\alpha) \qquad (4)$$

Hierin is π de kanonisch aan de coördinaat α toegevoegde impuls.
Deze vorm van de Hamiltoniaan specificeert nog geen kernmodel, doch alleen de structuur van de Hamiltoniaan in de variabelen α. Deze Hamiltoniaan kan vibraties om een bolsymmetrische evenwichtsvorm, rotaties van een permanent gedeformeerde kern, maar ook rotaties en vibraties van een permanent gedeformeerde kern beschrijven. Welk geval er speelt hangt af van de structuur van de potentiële energie $V(\alpha)$.

Het energiespectrum bij zo'n Hamiltoniaan hangt af van de traagheids- en stijfheidsparameters.

Beschouwt men nu het geval van quadrupoolvibraties van een sferische kern, dan ligt in verband met het laagenergetische energiespectrum dat deze kernen vertonen, een harmonische-oscillator-model voor de hand.

Vanwege de vijf onafhankelijke parameters (zie boven), dus een "vijfdimensionaal"-harmonische-oscillator-model.

In dit model noteert men de klassieke Lagrangiaan als volgt:

$$\mathcal{L}_{coll.} = \frac{B_2}{2} \sum_{\mu} |\dot{\alpha}_{2\mu}(t)|^2 - \frac{C_2}{2} \sum_{\mu} |\alpha_{2\mu}(t)|^2 \qquad (5)$$

De uitdrukking voor de Hamiltoniaan luidt dan:

$$\mathcal{H}_{coll.} = \frac{1}{2B_2} \sum_{\mu} |\pi_{2\mu}(t)|^2 + \frac{C_2}{2} \sum_{\mu} |\alpha_{2\mu}(t)|^2 \qquad (6)$$

De kinetische energie wordt vertegenwoordigd door de eerste term,(vergelijk 1-dimensionaal:$p_x^2/2m$),en de potentiele energie door de tweede term,(vergelijk 1-dimensionaal: $cx^2/2$).

De Hamiltoniaan (6) beschrijft vijf harmonische oscillatoren,elk met "massa" B_2 en "veerconstante" C_2 met frequentie $\omega_2^2 = C_2/B_2$.

Quantummechanisch ziet de Hamiltonoperator er nu als volgt uit:

$$H_{coll.} = \frac{1}{2B_2} \sum_{\mu} |\pi_{2\mu}|^2 + \frac{C_2}{2} \sum_{\mu} |\alpha_{2\mu}|^2 \qquad (7)$$

met $\pi_{2\mu} = (-i\hbar)\,\partial/\partial\alpha_{2\mu}$; $\alpha_{2\mu}$ en $\pi_{2\mu}$ zijn nu operatoren.
I.p.v. de operatoren $\alpha_{2\mu}$ en $\pi_{2\mu}$ introduceert men nu een stel creatie- en annihilatie-operatoren voor fononen namelijk $\beta^{\dagger}_{2\mu}$ respectievelijk $\beta_{2\mu}$,volgens:

$$\begin{aligned} \alpha_{2\mu} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2B_2\omega_2}} \cdot \left\{ \beta^{\dagger}_{2\mu} + (-1)^{\mu} \beta_{2,-\mu} \right\} \\ \pi_{2\mu} &= i \cdot \sqrt{\frac{\hbar B_2 \omega_2}{2}} \cdot \left\{ (-1)^{\mu} \beta^{\dagger}_{2,-\mu} - \beta_{2\mu} \right\} \end{aligned} \qquad (8)$$

Opm. De oscillatorquanten worden naar analogie met de collectieve roostervibraties van kristallen fononen genoemd.

In termen van deze creatie- en annihilatie-operatoren luidt de Hamiltonoperator nu :

$$H_{coll.} = \hbar\omega_2 \sum_{\mu} \left\{ \beta^{\dagger}_{2\mu} \beta_{2\mu} + \frac{1}{2} \right\} \qquad (9)$$

De operatoren $\beta^{\dagger}_{2\mu}$ en $\beta_{2\mu}$ voldoen aan de onderstaande commutatie-regels,

$$\begin{aligned} [\beta_{2\mu}, \beta^{\dagger}_{2\nu}] &= \delta_{\mu\nu} \\ [\beta^{\dagger}_{2\mu}, \beta^{\dagger}_{2\nu}] &= [\beta_{2\mu}, \beta_{2\nu}] = 0. \end{aligned} \qquad (10)$$

de zgn. commutatieregels voor een bosonveld.

Uit de transformatie-eigenschappen onder rotatie van $\alpha_{\lambda\mu}$ is af te leiden dat de fononen spin $\lambda(=2)$ met een z-component μ heb -ben.
Uit het gedrag van $\alpha_{\lambda\mu}$ onder ruimte-inversie, ($P\alpha_{\lambda\mu}P^{-1}=(-1)^{\lambda}\alpha_{\lambda\mu}$ met P de pariteitsoperator), volgt dat de fononen pariteit $(-1)^{\lambda}=(-1)^{2}=+1$ hebben.

De vacuümtoestand $|0\rangle$ wordt nu als volgt gedefiniëerd;

$$\beta_{2\mu}|0\rangle = 0. \tag{11}$$

De operatoren $\beta^{\dagger}_{2\mu}$ en $\beta_{2\mu}$ zijn creatie- resp. annihilatie-operatoren; werkend op een toestand wordt een fonon met impulsmoment 2 en een impulsmomentcomponent μ langs de z-as, gecreëerd resp. vernietigd.

De bezettingsgetaloperator $n_{\mu}=\beta^{\dagger}_{2\mu}\beta_{2\mu}$ commuteert met $H_{coll.}$ zodat men een gemeenschappelijke basis van eigenvectoren van n_{μ} en $H_{coll.}$ kan kiezen. De bij de operator n_{μ} behorende eigenwaarde N_{μ}, het bezettingsgetal, is dus een goed quantumgetal.

Uit definitie (11) volgt dat $n_{\mu}|0\rangle=0$, d.w.z. in de vacuümtoestand is er geen fonon aanwezig. De vacuümtoestand komt overeen met de grondtoestand van de kern.

Een component van een basis van N-fonon-toestanden bestaande uit N_{-2} fononen in de toestand $\mu=-2$, N_{-1} fononen met $\mu=-1$, N_0 fononen met $\mu=0$, N_1 fononen met $\mu=1$, en N_2 fononen met $\mu=2$ is van de volgende vorm;

$$\psi_{N_{-2}N_{-1}N_0N_1N_2} = \underbrace{\beta^{\dagger}_{2,-2}\cdots\beta^{\dagger}_{2,-2}}_{N_{-2}*}\underbrace{\beta^{\dagger}_{2,-1}\cdots\beta^{\dagger}_{2,-1}}_{N_{-1}*}\underbrace{\beta^{\dagger}_{2,0}\cdots\beta^{\dagger}_{2,0}}_{N_0*}\underbrace{\beta^{\dagger}_{2,1}\cdots\beta^{\dagger}_{2,1}}_{N_1*}\underbrace{\beta^{\dagger}_{2,2}\cdots\beta^{\dagger}_{2,2}}_{N_2*}|0\rangle . \tag{12}$$

met $\sum_{\mu} N_{\mu} = N$.

M.b.v. commutatieregels kan men inderdaad aantonen dat

$$n_{\mu}\psi_{N_{-2}N_{-1}N_0N_1N_2} = N_{\mu}\psi_{N_{-2}N_{-1}N_0N_1N_2} .$$

De laagste aangeslagen toestanden van de harmonische quadrupool-oscillator worden aangegeven door $\chi^{(N)}_{IM_I} = |N;IM_I\rangle$, waarin I het totale impulsmoment, M_I de z-projectie van het impulsmoment en N het aantal fononen weergeeft.

Opm. Voor N>3 is er een extra quantumgetal nl. "seniority" v nodig om de toestand te kunnen beschrijven;zie Lit.2.

De 1-fonon-toestand heeft impulsmoment I=2

$$|1;2M_I\rangle = \beta^{\dagger}_{2M_I}|0\rangle$$

Deze toestandsvector is genormeerd;m.a.w. $\langle 1;2M_I|1;2M_I\rangle = 1$.

De constructie van de 2-fonon-toestand geschiedt volgens het samenstellen van de impulsmomenten $I_1=2$ en $I_2=2$ met $M_{I_1}=m_1$ en $M_{I_2}=m_2$ van de fononen.
Groepentheoretisch worden de impulsmomenten I_1 en I_2 gekoppeld tot een totaalimpulsmoment I en projectie M_I volgens het uitreduceren van het directe product der beide irreducibele repre-sentaties: (zie Lit.7)

$$|2;IM_I\rangle = A_I \sum_{m_1,m_2} (2m_1 2m_2 | IM_I)\, \beta^{\dagger}_{2m_1}\beta^{\dagger}_{2m_2}|0\rangle \qquad (13)$$

A_I is een normeringsfactor.

In eerste instantie zou men concluderen dat I=0,1,2,3,4 volgens $|I_1-I_2|, |I_1-I_2|+1, \ldots, |I_1+I_2|$ mogelijk zouden zijn. Indien men echter de normering van de toestandsvector $|2;IM_I\rangle$ beschouwt,dan geldt $\langle 2;IM_I|2;IM_I\rangle = |A_I|^2\{1+(-1)^I\}$.
De 2-fonon-toestanden met I=1,3 kunnen niet genormeerd worden omdat de bijbehorende golffuncties identiek nul zijn.
Dit vindt zijn oorsprong in het feit dat de golffucties symmetrisch moeten zijn onder verwisseling van de fononen,vanwege het feit dat deze deeltjes het boson-karakter bezitten.
Verwisseling van de fononen komt in (13) neer op het verwisselen van de creatie-operatoren $\beta^{\dagger}_{2m_1}\beta^{\dagger}_{2m_2} \longrightarrow \beta^{\dagger}_{2m_2}\beta^{\dagger}_{2m_1}$ en $m_1 \leftrightarrow m_2$ in de Clebsch-Gordan-coëfficiënt.
Uit de commutatieregels voor bosonen (10) volgt dat $\beta^{\dagger}_{2m_1}\beta^{\dagger}_{2m_2}$ gelijk is aan $\beta^{\dagger}_{2m_2}\beta^{\dagger}_{2m_1}$ .Daar echter de Clebsch-Gordan-coëfficiënt voor oneven waarden van j_1+j_2-I antisymmetrisch is onder verwisseling van $(j_1 m_1)$ en $(j_2 m_2)$ volgens

$$(j_1 m_1\, j_2 m_2 | IM_I) = (-1)^{j_1+j_2-I} (j_2 m_2\, j_1 m_1 | IM_I) \quad ,\text{volgt}$$

dat voor oneven I, $|2;IM_I\rangle$ identiek nul is.
Voor I=0,2,4 geldt $A_I=(2)^{-1/2}$.

In onderstaande tabel vindt men een specificatie van de 0,1,2-fonon-toestanden.

N:	golfvector:	I:	E:
0	$\|0;00\rangle = 0$	0	$(5/2)\hbar\omega_2$
1	$\|1;2M_I\rangle = \beta^\dagger_{2M_I}\|0\rangle$	2	$(7/2)\hbar\omega_2$
2	$\|2;IM_I\rangle = (2)^{-1/2}\sum_{m_1 m_2}(2m_1\,2m_2\|IM_I)\beta^\dagger_{2m_1}\beta^\dagger_{2m_2}\|0\rangle$	0 2 4	$(9/2)\hbar\omega_2$

Opm. Men kan uiteraard het nulniveau van de energie-schaal leggen bij de energie van de vacuümtoestand (grondtoestand van de kern). De 1-fonon-toestand heeft dan een energie $\hbar\omega_2$ en de 2-fonon-toestanden een energie $2\hbar\omega_2$.

De eenvoudigste test voor de geldigheid van dit model zal bestaan uit het vergelijken van het energiespectrum met het waargenomen energiespectrum van de betreffende kern. (Zie fig.6)

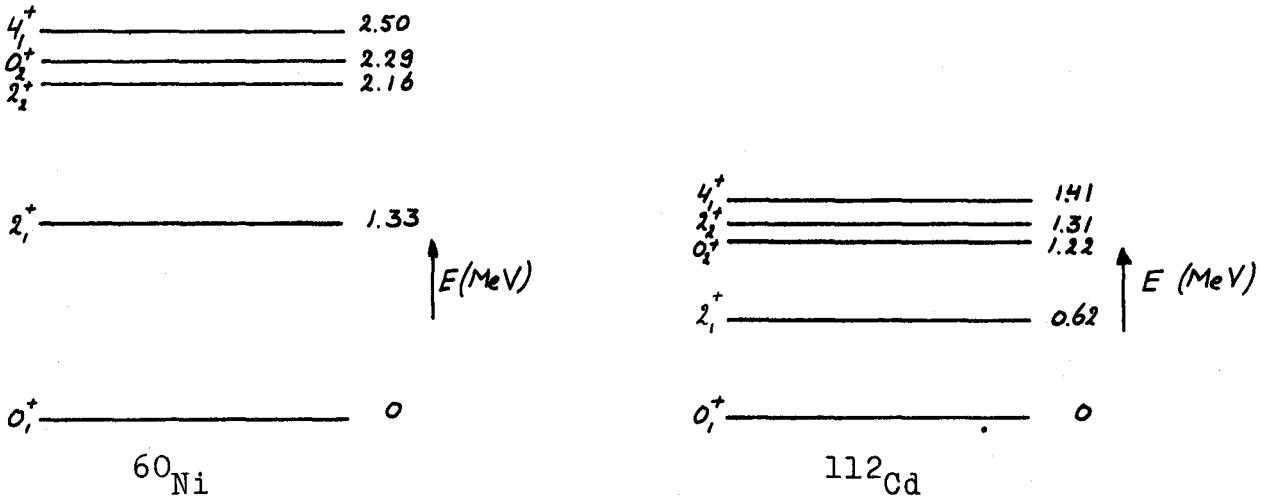


Fig.6 :Lage-energie-spectra.

Uiteraard zal de ontaarding van het 2-fonon-niveau in werkelijkheid opgeheven zijn omdat de Hamiltonoperator slechts voor kleine vibratie-amplitudes correct is. Het is slechts de eerste term in een ontwikkeling naar $\alpha_{2\mu}$.

De volgende termen geven aanleiding tot anharmoniciteit en heffen de ontaarding op.Het model is dus slechts van toepassing als de opsplitsing van de "ontaarde" niveaus klein is vergeleken met $\hbar\omega_2$.
De realistische laag-energetische spectra voor de door ons beschouwde kernen ^{60}Ni en ^{112}Cd zien we in fig. 6 .

Neemt men de anharmonische termen in de Hamiltoniaan mee dan vindt men voor de toestanden:

$$|0;00\rangle = X^0_{00} = a_{00}\chi^0_{00} + a_{02}\chi^2_{00} + \sum_{N>2} a_{0N}\chi^N_{00}$$
$$|1;2M\rangle = X^1_{2M} = a_{11}\chi^1_{2M} + a_{12}\chi^2_{2M} + \sum_{N>2} a_{1N}\chi^N_{2M} \qquad (14)$$

en b.v.
$$|2;2M\rangle = X^2_{2M} = a_{21}\chi^1_{2M} + a_{22}\chi^2_{2M} + \sum_{N>2} a_{2N}\chi^N_{2M}$$

m.a.w. er treedt bijmenging op van de andere niveaus met dezelfde I en M_I.(Zie Lit. 8)

Veronderstel dat in de interactie-potentiaal die de wisselwerking tussen een sferische kern en een projectiel beschrijft,de kernstraal R_0 als parameter optreedt;$V=V(\vec{r};R_0)$. Als de kern vibreren kan,ligt het voor de hand als potentiaal -model te hanteren dat R_0 wordt vervangen door $R_0+\delta(\theta,\phi,\alpha)$, waarin δ de verschuiving voorstelt van het kernoppervlak in de richting (θ,ϕ) namelijk $\delta(\theta,\phi,\alpha)= R_0 \sum \alpha^*_{2\mu} Y_{2\mu}(\theta,\phi)$.
Voor kleine oscillaties geldt dan;

$$V(\vec{r};R) = V(\vec{r};R_0) + \frac{\partial V}{\partial R_0}\cdot\delta R_0 + h.o.t.$$
$$= V(\vec{r};R_0) + \sqrt{\frac{\hbar}{2B_2\omega_2}}\cdot R_0\cdot\frac{\partial V}{\partial R_0}\sum_\mu \left\{\beta^+_{2\mu} + (-1)^\mu \beta_{2,-\mu}\right\} Y_{2\mu}(\theta,\phi) + h.o.t. \qquad (15)$$

Hieruit blijkt dat de interactiepotentiaaloperator de mogelijkheid biedt om een vibratie-toestand te exciteren.Twee-fonon-toestanden kunnen geëxciteerd worden door een twee-staps-proces waarin elk fonon op z'n beurt wordt gecreëerd, of door het effect van een kwadratische term,in(15) weggelaten,als 1-staps-proces.

Men ziet dat de deeltjes-fonon-interactie in eerste instantie evenredig is met $\frac{\partial V}{\partial R_0}$ oftewel met $-\frac{\partial V}{\partial r}$ als $V=V(r-R_0)$.

Uit het feit dat V in het algemeen vlak verloopt in het interne gebied van de kern en variëert in de buurt van het kernoppervlak (Saxon-Woods-potentiaal,zie appendix B),blijkt dat de term $\partial V/\partial r$ een piek vertoont nabij het kernoppervlak. De deeltjes-fonon-interactie zal voornamelijk meespelen wanneer de deeltjesgolffunctie aan het kernoppervlak significant van nul verschilt.

IV. DE ENERGY-SUDDEN- EN CENTRIFUGAL-SUDDEN-BENADERING.

Beschouwt men de relatieve beweging van de kern en het projectiel,en kiest men de assen van het assenstelsel evenwijdig aan die van het laboratorium-stelsel,dan ziet de tijd-onafhankelijke Schrödinger-vergelijking die de verstrooiing van een spinloos projectiel aan een vibrerende kern beschrijft er als volgt uit;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\vec{J}^2}{2mr^2}+H_f(\alpha,\frac{\partial}{\partial\alpha})+V(r,\theta,\phi,\alpha)\right]\Psi(r,\theta,\phi,\alpha)=E\,\Psi(r,\theta,\phi,\alpha). \qquad (1)$$

Hierin is m de gereduceerde massa van het kern-projectiel-systeem en E de energie.

Men kan aantonen dat de exacte Hamiltonoperator H commuteert met de operatoren J_x,J_y,J_z en π ,m.a.w. $[H,J_x]=[H,J_y]=[H,J_z]=[H,\pi]=0$.Hierin zijn J_x,J_y,J_z de operatoren behorende bij de x-,y-,resp. z-component van het totale impulsmoment, en π de pariteitsoperator.Daar de operatoren J_x,J_y,J_z niet onderling commuteren is het niet mogelijk een gemeenschappelijke basis van eigenvectoren te kiezen,zodat J_x,J_y en J_z niet "gelijktijdig" vastgelegd kunnen worden.
Uit bovenstaande commutatie-eigenschappen volgt dat de absolute waarde van het totale impulsmoment,de z-component van het totale impulsmoment en de pariteit behouden grootheden zijn.De corresponderende quantumgetallen J,M,en π zijn dus goede quantumgetallen.Voor elke J,M,π combinatie afzonderlijk kan de Schrödinger-vergelijking dus worden opgelost.

Opm.Het behoud van $|\vec{J}|$ en J_z is het gevolg van het feit dat het systeem kern-projectiel symmetrie vertoont onder rotaties van het systeem als geheel.

Opm.Het behoud van $|\vec{J}|$,J_z en π geldt zonder dat men een of andere benadering toepast in de Hamiltonoperator, en blijft gehandhaafd als er later wel benaderingen wor - den toegepast.

Voor het geval van een even-even-kern hebben de laaggelegen energieniveaus positieve pariteit $\pi_t=+1$. Voor het projectieldeeltje is de pariteit gelijk aan $\pi_p=(-)^{\ell}$, waarin ℓ het baanimpulsmomentquantumgetal van het deeltje is.
Hieruit volgt dat de pariteit van de ingaande partiële golf gelijk moet zijn aan de pariteit van de uitgaande partiële golf; m.a.w. $|\ell'-\ell|=2n$ met $n=0,1,2....$
In het gekoppelde-kanalen-formalisme betekent dit, dat alleen even ℓ's onderling, en alleen oneven ℓ's onderling gekoppeld zijn.

In het door ons te beschouwen model veronderstellen we nu dat de potentiaal, die een deeltje voelt in de richting (θ_p,ϕ_p), de potentiaal is voor de kern in de sferische evenwichtsvorm, verschoven over de bij die richting (θ_p,ϕ_p) behorende verschuiving δ_p van het kernoppervlak.

In de potentiaal voor de sferische kern treedt de kernstraal R_0 als parameter op; $V=V(r;R_0)$. (Zie hoofdstuk VII).

Voor de kern die quadrupoolvibraties om een sferische evenwichtsvorm uitvoert volgens;

$$R(\theta,\phi)=R_0\left[1+\sum_{\mu}\alpha^{*}_{2\mu}\,Y_{2\mu}(\theta,\phi)\right]=R_0+\delta(\theta,\phi,\alpha),$$

betekent bovengenoemde veronderstelling dat $V(r,\theta_p,\phi_p,\alpha)=V(r;R_0+\delta_p)$. Hierin is δ_p de afwijking van de kern t.o.v. de bolvorm, in de richting (θ_p,ϕ_p) van het projectieldeeltje. Dit betekent dat de kernpotentiaal V slechts via de combinatie $\delta_p=(\theta_p,\phi_p,\alpha)$ van de coördinaten (θ_p,ϕ_p) van het deeltje, en van de $\alpha_{2\mu}$-coördinaten van de kern afhangt; $V(r,\theta_p,\phi_p,\alpha)=V(r,\delta_p)$. De equipotentiaalvlakken hebben dus ruwweg dezelfde vorm als het kernoppervlak.

De eerste benadering die men nu aanbrengt is de zgn. energy-sudden-benadering. Men vervangt hierbij de targethamiltoniaan $H_t(\alpha,\partial/\partial\alpha)$ door een constante $\bar{\varepsilon}$. Met deze benadering wordt vaak het klassiek analogon geassocieerd dat $\alpha_{2\mu}$ slechts weinig verandert gedurende de botsing.

De tweede benadering,de zgn. centrifugal-sudden-benadering, die in de molecuulfysica met wisselend succes wordt toegepast, houdt in dat men de baanimpulsmomentoperator van het projectiel, $\vec{l}^2$, in de Hamiltonoperator vervangt door een constante, namelijk $+\bar{l}(\bar{l}+1).\hbar^2$. Deze benadering werd door Inopin (zie Lit.9) geintroduceerd in de kernfysica. Hij paste de benadering toe in het geval van diffractie-verstrooiing aan een sterk absorberende kern.

Over de criteria waaronder deze benaderingen opgaan is men het in de literatuur niet eens. Vooral wat betreft de centrifu-gal-sudden-benadering, die in vele recente artikelen van b.v. Inopin betreffende kernfysische,en b.v. Kouri,McGuire,Don Secrest betreffende molecuulfysische verstrooiingsproblemen,ter sprake komt,geven deze geen duidelijk beeld omtrent de juiste inhoud van de benadering.(Zie Lit.10).

Opm. Voor zover bekend zijn de hier behandelde berekeningen de eerste numerieke toepassing van deze centrifugal-sudden-benadering in de kernfysica.(Zie Lit.13).

Door het toepassen van de beide benaderingen wordt de radiele beweging van target-projectiel losgekoppeld van de hoekbeweging. Voor elke (θ,ϕ,α)-combinatie oftewel voor elke δ afzonderlijk,kan men de Schrödinger-vergelijking oplossen. M.a.w. δ treedt nog slechts als parameter op.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\bar{l}(\bar{l}+1)}{2mr^2} + \bar{\varepsilon} - E + V(r;\delta)\right] R_{\bar{l},\bar{\varepsilon}}(r;\delta) = 0. \qquad (2)$$

Er rest ons nu in tegenstelling tot het volledig gekoppelde -kanalen-formalisme slechts <u>een</u> ontkoppelde tweede-orde-d.v. . Deze dient evenwel voor een <u>in principe</u> oneindig aantal δ-waarden opgelost te worden.

Men ziet uit de vorm van vergelijking (2) dat indien men een $R_{\bar{l},\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ als oplossing bepaald heeft,men deze mag vermenigvuldigen met een willekeurige functie van δ oftewel (θ,ϕ,α). De productfunctie is dan ook een oplossing van vergelijking (2).

Met welke functie men vermenigvuldigt hangt af van de keuze van de formulering van de randvoorwaarden.

Kies b.v. voor de randvoorwaarden op r_m de volgende vorm: (Voor het gemak, ongeladen deeltjes)

$$R_{\bar{l},\bar{\varepsilon}}(r;\delta) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-i(kr-\bar{l}\frac{\pi}{2})} - S_{\bar{l},\bar{\varepsilon}}(\delta)\, e^{i(kr-\bar{l}\frac{\pi}{2})} . \tag{3}$$

Vermenigvuldigt men nu met de golffunctie overeenkomend met de begintoestand(zie opm. op volgende blz.) nl. $(i)^{l}(Y_l \otimes \chi_I^{(N)})_{JM}$ dan geldt ook;

$$R_{\bar{l},\bar{\varepsilon}}(r;\delta)(i)^{l}(Y_l\otimes\chi_I^{(N)})_{JM} \underset{r\to\infty}{\sim}$$

$$e^{-i(kr-\bar{l}\frac{\pi}{2})}(i)^{l}(Y_l\otimes\chi_I^{(N)})_{JM} - S_{\bar{l},\bar{\varepsilon}}(\delta)\,(i)^{l}(Y_l\otimes\chi_I^{(N)})_{JM}\, e^{i(kr-\bar{l}\frac{\pi}{2})}$$

Vermenigvuldigt men met $[(i)^{l'}(Y_{l'}\otimes\chi_{I'}^{(N')})_{JM}]^{*}$ en integreert men over θ, ϕ, en α dan vindt men;

$$\bar{R}^{(r)}_{\bar{l},\bar{\varepsilon};l'N'I',lNI} = \{(i)^{l'}(Y_{l'}\otimes\chi_{I'}^{(N')})_{JM} \,|\, R_{\bar{l},\bar{\varepsilon}}(r;\delta) \,|\, (i)^{l}(Y_l\otimes\chi_I^{(N)})_{JM}\} \underset{r\to\infty}{\sim}$$

$$e^{-i(kr-\bar{l}\frac{\pi}{2})}\delta_{l'l}\delta_{N'N}\delta_{I'I} - S_{\bar{l}\bar{\varepsilon};l'N'I',lNI}\, e^{i(kr-\bar{l}\frac{\pi}{2})} \tag{4}$$

met $$S_{\bar{l}\bar{\varepsilon};l'N'I',lNI} = \{(i)^{l'}(Y_{l'}\otimes\chi_{I'}^{(N')})_{JM} \,|\, S_{\bar{l}\bar{\varepsilon}}(\delta) \,|\, (i)^{l}(Y_l\otimes\chi_I^{(N)})_{JM}\} .$$

Dit is volledig analoog aan de gekoppelde-kanalen-formulering van de randvoorwaarde op r_m; een inlopende golf in het fysisch ingangskanaal en uitlopende golven in alle kanalen.(form. I.11). $\bar{R}^{(r)}_{\bar{l}\bar{\varepsilon};l'N'I',lNI}$ is een benadering voor de gekoppelde-kanalen-radiële golffunctie $R^{(r)}_{l'N'I'}$.

In (4) is $S_{\bar{l}\bar{\varepsilon};l'N'I',lNI}$ het matrixelement van $S_{\bar{l}\bar{\varepsilon}}(\delta)$ tussen de toestanden $(i)^{l'}(Y_{l'}\otimes\chi_{I'}^{(N')})_{JM}$ overeenkomende met het uitgangskanaal en $(i)^{l}(Y_l\otimes\chi_I^{(N)})_{JM}$ overeenkomende met het ingangskanaal, en is een benadering voor het gekoppelde-kanalen-S-matrixelement $S_{l'N'I';lNI}$.

$$R^{(r)}_{l'N'I'} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-i(kr-l'\frac{\pi}{2})}\delta_{l'l}\delta_{N'N}\delta_{I'I} - S_{l'N'I',lNI}\sqrt{\frac{k}{k'}}\, e^{i(kr-l'\frac{\pi}{2})} \tag{5}$$

I.h.a. wordt de benaderde gekoppelde-kanalen radiële functie

$\bar{R}_{\bar{l}\bar{\varepsilon}}(r)$ verkregen door $R_{\bar{l}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ te sandwichen tussen de golfvectoren overeenkomende met het kanaal waarin je kijkt, resp. het kanaal waarin je een mathematische aanzet dan wel een inlopende golf laat optreden.

Opm. Beschouwen we d.v. (1), dan zien we dat er in het buitengebied $r>r_m$ volledige ontkoppeling optreedt van d.v.(1) indien we oplossing Ψ ontwikkelen naar gemeenschappelijke eigenfuncties van de $\vec{l}^2$ - resp. de kernhamiltonoperator $H_t(\alpha, \partial/\partial\alpha)$. De eigenfuncties van de operator $\vec{l}^2$ zijn de sferische harmonischen Y_{lm}, die van de kernhamiltonoperator zijn de kerngolffuncties $\chi^{(N)}_{IM_I}$. Schrijft men de golffunctie Ψ ook nog als eigenfuntie van $\vec{J}^2$ en J_z dan vindt in het binnengebied ook gedeeltelijke ontkoppeling plaats. Op groepentheoretishe gronden kan men de directe productruimte reduceren tot een deelruimte met zekere J en M. De golffunctie Ψ kan geschreven worden als:

$$\Psi(r,\theta,\phi,\alpha) = \sum_{lNI}\sum_{m_l M_I} \frac{R_{lNI}(r)}{r} (l m_l I M_I | JM)(i)^l Y_{lm_l} \chi^{(N)}_{IM_I}$$
$$= \sum_{lNI} \frac{R_{lNI}(r)}{r} (i)^l (Y_l \otimes \chi^{(N)}_I)_{JM}.$$

Keren we nu terug naar de d.v. (2). Indien men $R_{\bar{l}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ voor een aantal δ-waarden bepaald heeft, kan men door deze waarden een polynoom van lage graad leggen, b.v.

$$R_{\bar{l}\bar{\varepsilon}}(r;\delta) = c_0(r) + c_1(r)\delta + c_2(r)\delta^2 =$$
$$c_0(r) + c_1(r) R_0 \sum_\mu \alpha^*_{2\mu} Y_{2\mu} + c_2(r) R_0^2 \sum_{\mu\nu} \alpha^*_{2\mu}\alpha^*_{2\nu} Y_{2\mu} Y_{2\nu} \qquad (6)$$

Hierbij neemt men aan dat de golffunctie slechts zwak afhankelijk is van δ, dus ook van α, zodat alleen de laagste termen hoeven te worden meegenomen.

Deze aanname hangt zeer nauw samen met het feit, dat uit gekoppelde-kanalen-berekeningen volgt dat slechts een beperkt aantal niveaus gedurende de botsing significant gekoppeld zijn. Dus het projectieldeeltje exciteert alleen de laagste fononniveaus. We zullen dadelijk zien dat dit consistent is met de veronderstelling dat in (6) alleen de laagste termen voorkomen.

Zodoende komt het sandwichen van $R_{\ell\bar{\ell}}(r;\delta)$ neer op het bepalen van de matrixelementen van δ en δ^2.

In Diracnotatie geldt;

$$\bar{R}^{(r)}_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon};\ell''N''I'',\ell'N'I'} = \left\{(i)^{\ell''}\left(Y_{\ell''}\otimes\chi^{(N'')}_{I''}\right)_{JM} \middle| R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta) \middle| (i)^{\ell'}\left(Y_{\ell'}\otimes\chi^{(N')}_{I'}\right)_{JM}\right\}$$

$$= c_0(r)\,\delta_{\ell''\ell'}\delta_{N''N'}\delta_{I''I'} + c_1(r)\langle\ell''N''I''|\delta|\ell'N'I'\rangle + c_2(r)\langle\ell''N''I''|\delta^2|\ell'N'I'\rangle. \tag{7}$$

In de integraalvorm luidt deze relatie als volgt;

$$\bar{R}^{(r)}_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon};\ell''N''I'',\ell'N'I'} =$$

$$\iiint d\theta\, d\phi\, d\alpha\, \sin\theta \left[(i)^{\ell''}\left(Y_{\ell''}\otimes\chi^{(N'')}_{I''}\right)_{JM}\right]^{*} R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)\,(i)^{\ell'}\left(Y_{\ell'}\otimes\chi^{(N')}_{I'}\right)_{JM}. \tag{8}$$

In de e.s.+c.s.-benadering gaat men ervan uit dat de radiele golffunctie $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ slechts zwak afhangt van δ dus van (θ,ϕ,α). Dus alleen matrixelementen van $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ tussen toestanden die dicht bijelkaar liggen, zullen significant van nul verschillen. (Iets dergelijks hebben we gezien in I.2a).

In de polynoomontwikkeling neem je een paar termen mee. Uit gekoppelde-kanalen-berekeningen blijkt dat je de aanslag naar de drie-fonon-toestanden vanuit de grondtoestand niet hoeft mee te nemen; hieruit volgt dat de $(\alpha)^3$-term geen bijdrage levert. Ook de andere derde-graads-termen overeenkomende met meerstaps-processen zoals tweemaal creëren en eenmaal annihileren leveren geen significante bijdragen.

De zwakke afhankelijkheid van $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ van δ betekent dat men $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ slechts voor een beperkt aantal δ-waarden hoeft op te lossen om de coëfficiënten $c_0(r)$, $c_1(r)$, en $c_2(r)$ te bepalen.

Om het reeds eerder genoemde sandwich-proces wat eenvoudiger te kunnen beschrijven kan men $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ beter schrijven als een multipoolontwikkeling volgens;

$$R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta) = \sum_{t\lambda} c^{(t)}_{\lambda}(r)\left(A^{(t)}_{\lambda}\cdot Y_{\lambda}\right) = \sum_{t\lambda\eta} c^{(t)}_{\lambda}(r)\, A^{(t)*}_{\lambda\eta}\, Y_{\lambda\eta} \tag{9}$$

Hierin onderscheidt t de termen van verschillend karakter (orde), maar dezelfde tensorrang λ.

$A^{(t)}_{\lambda}$ is een operator die slechts werkt op de interne coördinaten van de targetkern. $A_{\lambda\eta}$ zijn de componenten van een irreducibele tensoroperator van rang λ en transformeren als de

(2λ+1)-dimensionale representatie van de draaigroep m.a.w.

$$A'_{\lambda\eta} = \sum_{\nu} D^{[\lambda]}_{\nu\eta}(\theta_1,\theta_2,\theta_3)\, A_{\lambda\nu}$$

$A'_{\lambda\eta}$ zijn de componenten van de tensor in het gedraaide assenstelsel, en $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ zijn de Eulerhoeken die de draaiing van het assenstelsel vastleggen.

De bolfuncties transformeren volgens;

$$Y_{\lambda\eta}(\theta',\phi') = \sum_{\nu} D^{[\lambda]}_{\nu\eta}(\theta_1,\theta_2,\theta_3)\, Y_{\lambda\nu}(\theta,\phi)$$

De multipoolontwikkeling (9) drukt $R_{\ell\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ dus uit in een som van componenten, met de eigenschappen wat betreft rotatie van sferische tensoren.

In appendix A ziet men dat men met behulp van het bovenstaand "gereedschap" uitdrukking (7) kan uitwerken tot de vorm:

$$\bar{R}_{\ell\bar{\varepsilon};\ell''N''I'',\ell'N'I'}(r) =$$

$$\sum_{t\lambda} C^{(t)}_{\lambda}(r)(-1)^{J}(i)^{\ell'-\ell''}\sqrt{\frac{(2\ell'+1)(2\ell''+1)}{4\pi}}(\ell'0\ell''0|\lambda 0)\begin{Bmatrix}\ell' I' J\\ I''\ell''\lambda\end{Bmatrix}\langle N'';I''\|A^{(t)}_{\lambda}\|N';I'\rangle \qquad (10)$$

Voor de overgangen die voor ons van belang zijn luiden de uitdrukkingen voor de gereduceerde matrixelementen (zie app.A) $\langle N";I"\|A^{(t)}_{\lambda}\|N';I'\rangle$ als volgt;

$$\langle 0;0\|A^{(2)}_{\lambda}\|0;0\rangle = \frac{\beta^2}{\sqrt{4\pi}}\delta_{\lambda,0} \qquad \langle 0;0\|A^{(0)}_{0}\|0;0\rangle = \sqrt{4\pi}.$$

$$\langle 0;0\|A^{(1)}_{2}\|1;2\rangle = \langle 1;2\|A^{(1)}_{2}\|0;0\rangle = \beta$$

$$\langle 0;0\|A^{(2)}_{\lambda}\|2;I\rangle = \langle 2;I\|A^{(2)}_{\lambda}\|0;0\rangle = \frac{\beta^2}{\sqrt{2\pi}}(2020|I0)\,\delta_{I,\lambda}$$

$$\langle 1;2\|A^{(2)}_{\lambda}\|1;2\rangle = \frac{\beta^2}{\sqrt{4\pi}}(2020|\lambda 0)\{2+5\delta_{\lambda,0}\} \qquad (11)$$

$$\langle 1;2\|A^{(1)}_{2}\|2;I\rangle = \langle 2;I\|A^{(1)}_{2}\|1;2\rangle = \beta\sqrt{\frac{2(2I+1)}{5}}$$

$$\langle 2;I\|A^{(2)}_{\lambda}\|2;I'\rangle = \langle 2;I'\|A^{(2)}_{\lambda}\|2;I\rangle =$$
$$\frac{\beta^2}{\sqrt{4\pi}}(2020|\lambda 0)\{\sqrt{5}\sqrt{2I+1}\,\delta_{\lambda,0}\delta_{I,I'} + 4\sqrt{2\lambda+1}\sqrt{2I+1}\sqrt{2I'+1}\,W(2I2I';J\lambda)\}$$

Hierin is β^2 de verwachtingswaarde van de operator $\sum_\mu \alpha^*_{2\mu}\alpha_{2\mu}$ in de grondtoestand; $\beta^2 = \langle 0 | \sum_\mu \alpha^*_{2\mu}\alpha_{2\mu} | 0 \rangle = \frac{5\hbar}{2B_2\omega_2}$. (12)
M.a.w. β is een maat voor de vibratie-amplitude. M.b.v. de gereduceerde matrixelementen kan men nu voor elke combinatie $\ell''N''I'', \ell'N'I'$ de radiële golffunctie $\bar{R}^{(r)}_{\ell\xi;\ell''N''I'';\ell'N'I'}$ uitdrukken in de grootheden $c_0(r), c_1(r), c_2(r), R_0, \beta, \ell'', \ell', N''$, N', I'', I' met N'' en $N' \leq 2$. In principe kan men deze procedure in een willekeurig aantal punten binnen het interval $0 < r < r_m$ toepassen.

V. RECHTVAARDIGING VAN DE INTERVALSGEWIJZE AANPAK, IN COMBINATIE MET OPKRIKKEN, IN DE ENERGY-SUDDEN- EN CENTRIFUGAL-SUDDEN-BENADERING.

Ter rechtvaardiging van de intervalsgewijze aanpak van de e.s.+c.s.-benadering, beschouwt men de oplossingen van de Schrö-dinger-vergelijking in de gekoppelde-kanalen-methode en in de e.s.+c.s.-benadering, en bekijkt het gedrag in het binnen- en buitengebied.

Voor de oplossing $\Psi(r,\theta,\phi,\alpha)$ van de tijdonafhankelijke Schrödinger-vergelijking

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\vec{l}^2}{2mr^2}+H_t(\alpha,\frac{\partial}{\partial\alpha})+V(r\theta\phi\alpha)\right]\Psi(r\theta\phi\alpha)=E\Psi(r\theta\phi\alpha) \quad (1)$$

zal men in het gekoppelde-kanalen-formalisme, waarbij geen benadering aangebracht wordt in de Hamiltonoperator, i.h.a. de ontwikkeling kiezen volgens;

$$\Psi^{JM}(r\theta\phi\alpha)=\sum_{l'N'I'}\frac{R^{(r)}_{l'N'I'}}{r}(i)^{l'}\left(Y_{l'}\otimes\chi^{(N')}_{I'}\right)_{JM} \quad (2)$$

Men vindt dan op de gebruikelijke manier het stelsel gekoppelde d.v.-en;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V^{(r)}_{lNI,lNI}-E+\varepsilon^{(N)}_I\right]R^{(r)}_{lNI}=-\sum_{l'N'I'\neq lNI}V^{(r)}_{lNI,l'N'I'}R^{(r)}_{l'N'I'} \quad (3)$$

Indien men de combinatie quantumgetallen voor het gemak aangeeft met c in het geval van (lNI), en met c' voor $(l'N'I')$, dan kan men het gekoppelde stelsel ook schrijven als volgt:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\omega^{(r)}_{cc}\right]R_c(r)=-\sum_{c'\neq c}\omega^{(r)}_{cc'}R_{c'}(r) \quad (4)$$

Hierin is $\omega_{cc}(r)=-\frac{2m}{\hbar^2}V^{(r)}_{cc}-\frac{l_c(l_c+1)}{r^2}+\frac{2m(E-\varepsilon_c)}{\hbar^2}$ de diagonaalterm en $\omega_{cc'}(r)=-\frac{2m}{\hbar^2}V^{(r)}_{cc'}$ de niet-diagonaalterm van de matrix $\underline{\underline{\omega}}$.

In IV.2 hebben we reeds gezien dat in het geval dat men de e.s.+c.s.-benadering toepast, het probleem reduceert tot een ontkoppelde d.v. in $R_{l\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ volgens;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2\bar{\ell}(\bar{\ell}+1)}{2mr^2}+\bar{\varepsilon}-E+V(r,\delta)\right]R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r,\delta)=0 \qquad (5)$$

Gebruikt men voor de radiële ontwikkelingscoëfficiënten $\bar{R}_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}\cdot\ell' NI,\ell NI}(r)$ (form. IV.4) de notatie $\bar{R}_{c'}(r)$, dan blijkt (5) bij gebruik van de juiste randvoorwaarden equivalent te zijn met

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\bar{\omega}_{cc}(r)\right]\bar{R}_c(r)=-\sum_{c'\neq c}\omega_{cc'}(r)\bar{R}_{c'}(r) \qquad (6)$$

Hierin is

$$\bar{\omega}_{cc}(r)=-\frac{2m}{\hbar^2}V_{cc}(r)-\frac{\bar{\ell}(\bar{\ell}+1)}{r^2}+\frac{2m(E-\bar{\varepsilon})}{\hbar^2}=\omega_{cc}(r)+\frac{\ell_c(\ell_c+1)-\bar{\ell}(\bar{\ell}+1)}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_c-\bar{\varepsilon})$$

Aldus vindt men de stelsels gekoppelde d.v.-en voor het "exacte" geval(gekoppelde-kanalen-geval),resp. voor het benader-de geval (e.s.+c.s.-benadering);

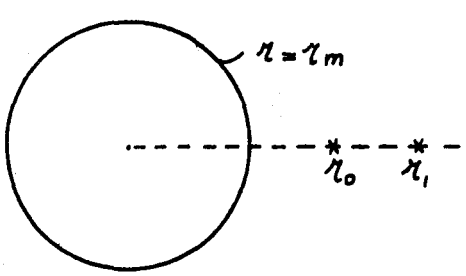
$$R_c''(r)+\omega_{cc}(r)R_c(r)=-\sum_{c'\neq c}\omega_{cc'}(r)R_{c'}(r) \qquad (7a)$$

$$\bar{R}_c''(r)+\bar{\omega}_{cc}(r)\bar{R}_c(r)=-\sum_{c'\neq c}\omega_{cc'}(r)\bar{R}_{c'}(r) \qquad (7b)$$

Beschouwen we nu het buitengebied $r>r_m$. Hier geldt dat de niet-diagonaaltermen $\omega_{cc'}$ gelijk nul zijn, dus hier geldt:

$$R_c''(r)+\omega_{cc}(r)R_c(r)=0 \qquad (8a)$$

$$\bar{R}_c''(r)+\bar{\omega}_{cc}(r)\bar{R}_c(r)=0 \qquad (8b)$$



Stel dat $i_c(r)$ en $o_c(r)$, resp. $I_c(r)$ en $O_c(r)$, twee lineair onafhankelijke oplossingen zijn van vergelijking (8b) resp. (8a). Men kiest deze oplossingen zodanig dat in een punt r_0 geldt;

$$I_c(r_0)=i_c(r_0) \quad \text{en} \quad I_c'(r_0)=i_c'(r_0)$$
$$O_c(r_0)=o_c(r_0) \qquad O_c'(r_0)=o_c'(r_0)$$

Voor de oplossingen $R_c(r)$ en $\bar{R}_c(r)$ in het buitengebied kan men dan schrijven;

$$R_c(r)=A_cI_c(r)+B_cO_c(r) \qquad R_c'(r)=A_cI_c'(r)+B_cO_c'(r)$$
$$\bar{R}_c(r)=a_ci_c(r)+b_co_c(r) \qquad \bar{R}_c'(r)=a_ci_c'(r)+b_co_c'(r)$$

Gaat men er van uit dat in het punt r_0 tevens de functiewaar-den en afgeleiden gelijk zijn,m.a.w. $\bar{R}_c(r_0)=R_c(r_0)$ en $\bar{R}'_c(r_0)=R'_c(r_0)$,dan betekent dit,dat de coëfficiënten aan elkaar gelijk zijn:$a_c=A_c$ en $b_c=B_c$.
Daar de coëfficiënten onafhankelijk zijn van de plaats ($r>r_m$), geldt in elk punt in het buitengebied dat de coëfficiënten der exacte en benaderde oplossingen in dit punt r_1 gelijk zijn. De lineair onafhankelijke oplossingen voor het benaderde geval lijken echter niet op die van het exacte geval.Beschouwt men b.v. alleen de energy-sudden-benadering,dan zijn de golfgetal-len in alle kanalen gelijk,in tegenstelling tot het exacte geval.Hierdoor kunnen er willekeurig grote faseverschillen ontstaan tussen de exacte en de benaderde oplossing.Van de benaderde oplossing zijn de coëfficiënten in het buitengebied exact maar de onafhankelijke oplossingen $i_c(r)$ en $o_c(r)$ niet. Zou men voor willekeurige $r>r_m$ in de ontwikkeling van $\bar{R}_c(r)$, $i_c(r)$ en $o_c(r)$ vervangen door $I_c(r)$ en $O_c(r)$,en $i'_c(r)$ en $o'_c(r)$ door $I'_c(r)$ en $O'_c(r)$,dan zou men de benaderde oplossing "opgekrikt" hebben tot de exacte oplossing.

$$\tilde{R}_c(r)=a_cI_c(r)+b_cO_c(r)=A_cI_c(r)+B_cO_c(r)=R_c(r)$$
$$\tilde{R}'_c(r)=a_cI'_c(r)+b_cO'_c(r)=A_cI'_c(r)+B_cO'_c(r)=R'_c(r)$$

De vraag die nu rijst is,of we deze procedure ook in het binnengebied kunnen volgen ?
Hiertoe ontwikkelen we de oplossingen $R_c(r)$ resp. $\bar{R}_c(r)$ in het binnengebied (oplossing van (7a) resp. (7b)),naar twee lineair onafhankelijke oplossingen $I_c(r)$ en $O_c(r)$ resp. $i_c(r)$ en $o_c(r)$ van vergelijking (8a) resp. (8b) volgens;

$$R_c(r)=A_c(r)I_c(r)+B_c(r)O_c(r) \qquad (9a)$$
$$R'_c(r)=A_c(r)I'_c(r)+B_c(r)O'_c(r) \qquad (10a)$$

$$\bar{R}_c(r)=a_c(r)i_c(r)+b_c(r)o_c(r) \qquad (9b)$$
$$\bar{R}'_c(r)=a_c(r)i'_c(r)+b_c(r)o'_c(r) \qquad (10b)$$

De "bewegingsvergelijking" van de coëfficiënten verkrijgt men als volgt. Differentiëert men vergelijking (9a) en vergelijkt men de verkregen uitdrukking met (10a), dan blijkt,

$$A'_c(r)I_c(r)+B'_c(r)O_c(r)=0 \qquad (11a)$$

evenzo vindt men,

$$a'_c(r)i_c(r)+b'_c(r)o_c(r)=0 \qquad (11b)$$

Differentiëert men nu verglijking (10a) en substitueert de ver-kregen uitdrukking samen met (9a) in (7a), dan verkrijgt men een uitdrukking, waaruit men samen met relatie (11a), de afgelei-de van de ontwikkelingscoëfficiënten $A_c(r)$ en $B_c(r)$ kan aflei-den. Er blijkt dat geldt;

$$A'_c(r)=\frac{1}{W(I_c(r),O_c(r))}\sum_{c'\neq c} O_c(r)\omega_{cc'}(r)\{A_{c'}(r)I_{c'}(r)+B_{c'}(r)O_{c'}(r)\}$$

$$B'_c(r)=\frac{-1}{W(I_c(r),O_c(r))}\sum_{c'\neq c} I_c(r)\omega_{cc'}(r)\{A_{c'}(r)I_{c'}(r)+B_{c'}(r)O_{c'}(r)\} \qquad (12a)$$

Hierin is $W(I_c(r),O_c(r))=I_c(r)O'_c(r)-I'_c(r)O_c(r)$ de zgn. Wronski-aan van $I_c(r)$ en $O_c(r)$.

Op analoge wijze volgt;

$$a'_c(r)=\frac{1}{W(i_c(r),o_c(r))}\sum_{c'\neq c} o_c(r)\omega_{cc'}(r)\{a_{c'}(r)i_{c'}(r)+b_{c'}(r)o_{c'}(r)\}$$

$$b'_c(r)=\frac{-1}{W(i_c(r),o_c(r))}\sum_{c'\neq c} i_c(r)\omega_{cc'}(r)\{a_{c'}(r)i_{c'}(r)+b_{c'}(r)o_{c'}(r)\} \qquad (12b)$$

Wil het opkrikken in het binnengebied nu echter succes hebben, dan dient men ervoor te zorgen, dat $a_c(r)\approx A_c(r)$ en $b_c(r)\approx B_c(r)$. Uit de relaties (12a) en (12b) voor de afgeleiden van de coëffi-ciënten volgt dat hiervoor aan twee voorwaarden voldaan moet zijn, namelijk:

1. $a_c(0)\simeq A_c(0)$ en $b_c(0)\simeq B_c(0)$
2. $i_c(r)\simeq I_c(r)$ en $o_c(r)\simeq O_c(r)$, in het koppelingsgebied.

I.h.a. is aan deze voorwaarden niet voldaan.
Dit komt tot uitdrukking in het feit dat de resultaten van de e.s.+c.s.-benadering,zonder correctie (een interval),niet be-vredigend zijn.(Zie Lit.13).
Hierdoor komt de wens naar voren,om correcties te kunnen toepassen.Geinspireerd door het klassieke beeld,correcties toe te passen op de adiabatische benadering,door de botsingsduur op te splitsen in tijds-intervallen,gedurende welke men de kern-oriëntatie (en/of -vorm) vasthoudt,en op het eind waarvan men de oriëntatie (vorm) aanpast,kwam men tot de volgende quantummechanische aanpak.
Verdeel het radiële integratie-gebied in intervallen.In elk intervalscheidingspunt past men op de benaderd berekende oplossing een correctie toe;het opkrikken.
Hierdoor bereikt men dat er per interval tenminste in een punt r_0 geldt:$a_c(r_0)=A_c(r_0)$,$b_c(r_0)=B_c(r_0)$,$i_c(r_0)=I_c(r_0)$,$o_c(r_0)=O_c(r_0)$, $i'_c(r_0)=I'_c(r_0)$ en $o'_c(r_0)=O'_c(r_0)$.

V.1 Het opkrikken.

Kiest men in een bepaald punt r_0 in het binnengebied de waarde en de afgeleide van de twee lineair onafhankelijke oplossingen van de d.v. (8) voor het benaderde geval gelijk aan die in het exacte geval,m.a.w.

(I) $\begin{matrix} i_c(r_0)=I_c(r_0), o_c(r_0)=O_c(r_0) \\ i'_c(r_0)=I'_c(r_0), o'_c(r_0)=O'_c(r_0) \end{matrix}$,dan geldt,indien men er van uitgaat,dat functiewaarde en afgeleide in r_0 van de benaderde en de exacte oplossing glijk zijn,$\overline{R}_c(r_0)=R_c(r_0)$ en $\overline{R'_c}(r_0)=R'_c(r_0)$,dat $a_c(r_0)=A_c(r_0)$ en $b_c(r_0)=B_c(r_0)$.
Tevens kan men dan aantonen dat de eerste en tweede afgeleiden van de coëfficiënten in het benaderde geval in r_0 gelijk zijn aan die in het exacte geval;

$a'_c(r_0)=A'_c(r_0)$,$b'_c(r_0)=B'_c(r_0)$,en $a''_c(r_0)=A''_c(r_0)$,$b''_c(r_0)=B''_c(r_0)$.
Uitgaande van de exacte oplossing,$\overline{R}_c(r_0)=R_c(r_0)$ en $\overline{R'_c}(r_0)=R'_c(r_0)$,integreert men de d.v. radiëel in de e.s.+c.s.-benade-

ring en bepaald zodoende de benaderde functie in r_1;

$$\bar{R}_c(r_1)=a_c(r_1)i_c(r_1)+b_c(r_1)o_c(r_1)$$
$$\bar{R}'_c(r_1)=a_c(r_1)i'_c(r_1)+b_c(r_1)o'_c(r_1). \qquad (13)$$

Door het opkrikken vervangt men nu $i_c(r_1)$ resp. $o_c(r_1)$ door $I_c(r_1)$ resp. $O_c(r_1)$ en vindt zodoende de opgekrikte oplossing;

$$\tilde{R}_c(r_1)=a_c(r_1)I_c(r_1)+b_c(r_1)O_c(r_1)$$
$$\tilde{R}'_c(r_1)=a_c(r_1)I'_c(r_1)+b_c(r_1)O'_c(r_1), \qquad (14)$$

terwijl de exacte oplossing zou luiden;

$$R_c(r_1)=A_c(r_1)I_c(r_1)+B_c(r_1)O_c(r_1)$$
$$R'_c(r_1)=A_c(r_1)I'_c(r_1)+B_c(r_1)O'_c(r_1). \qquad (15)$$

Zonder koppelingspotentiaal leidt deze opkrikprocedure tot de exacte oplossing,zoals in de vorige paragraaf al is aangetoond, voor het buitengebied.
Uitgaande van de veronderstelling (I) op de vorige blz.,kan men aantonen dat er geldt;

$$\tilde{R}^{(1)}_c(r_0)=R^{(1)}_c(r_0)=\bar{R}^{(1)}_c(r_0) \qquad \tilde{R}^{(1)}_c(r_0)=R^{(1)}_c(r_0)$$
$$\tilde{R}^{(2)}_c(r_0)=R^{(2)}_c(r_0)\neq\bar{R}^{(2)}_c(r_0) \qquad \tilde{R}^{(1)}_c(r_0)=R^{(1)}_c(r_0)=R^{(2)}_c(r_0)$$
$$\tilde{R}^{(3)}_c(r_0)=R^{(3)}_c(r_0)\neq\bar{R}^{(3)}_c(r_0) \qquad \tilde{R}^{(2)}_c(r_0)=R^{(2)}_c(r_0)=R^{(3)}_c(r_0) \qquad (16)$$

Hieruit volgt dat de opgekrikte oplossing in r_1 eerst in de vierde orde in $\Delta r(=r_1-r_0=$intervallengte) van de exacte oplossing afwijkt;

$$\tilde{R}_c(r_1)-R_c(r_1)=-\frac{(\Delta r)^4}{24}\left\{\tilde{R}^{(4)}_c(r_0)-R^{(4)}_c(r_0)\right\}+\frac{(\Delta r)^5}{120}\left\{\tilde{R}^{(5)}_c(r_0)-R^{(5)}_c(r_0)\right\}+..$$

Hierin is $\tilde{R}^{(4)}_c(r_0)-R^{(4)}_c(r_0)=\sum_{c'\neq c}\omega_{cc'}(r_0)R_{c'}(r_0)\left\{4\bar{\omega}_{c'c'}(r_0)-\omega_{c'c'}(r_0)-3\omega_{cc}(r_0)\right\}$. (17)

De opgekrikte afgeleide wijkt van de exacte afgeleide af in

de derde orde in Δr;

$$\tilde{R}_c^{(\omega)}(r_1)-R_c^{(\omega)}(r_1)=\frac{(\Delta r)^3}{6}\left\{\tilde{R}_c^{(\omega)}(r_0)-R_c^{(\omega)}(r_0)\right\}+\frac{(\Delta r)^4}{24}\left\{\tilde{R}_c^{(\omega)}(r_0)-R_c^{(\omega)}(r_0)\right\}+\ldots$$

$$\text{met } \tilde{R}_c^{(\omega)}(r_0)-R_c^{(\omega)}(r_0)=\sum_{c'\neq c}\omega_{cc'}(r_0)R_{c'}(r_0)\left\{2\bar{\omega}_{cc'}(r_0)-\omega_{c'c'}(r_0)-\omega_{cc}(r_0)\right\} \tag{18}$$

Hieruit blijkt dat de mate waarin de opgekrikte functie van de exacte functie gaat afwijken wordt bepaald door de term $4\bar{\omega}_{c'c'}(r_0)-\omega_{c'c'}(r_0)-3\omega_{cc}(r_0)$, en des te groter wordt naarmate de intervallengte Δr toeneemt. In gebieden waar geen koppeling optreedt, $\omega_{cc'}=0$, treedt er geen afwijking van de opgekrikte oplossing t.o.v. de exacte oplossing.
Men kan nu drie gevallen onderscheiden;

1 Er treedt koppeling op ($\omega_{cc'}\neq 0$),
Er treedt geen afwijking op t.o.v. de e.s.+c.s.-ben. ($\omega_{cc}=\bar{\omega}_{cc}$)

2 Er treedt geen koppeling op ($\omega_{cc'}=0$),
Er is een afwijking t.o.v. de e.s.+c.s.-ben. ($\omega_{cc}\neq\bar{\omega}_{cc}$).

3 Er treedt koppeling op ($\omega_{cc'}\neq 0$),
Er is een afwijking t.o.v. de e.s.+c.s.-ben. ($\omega_{cc}\neq\bar{\omega}_{cc}$).

In de gevallen 1 en 2 is de opgekrikte functie gelijk aan de exacte functie. Geval 3 wordt door het opkrikken niet geheel exact behandeld. Uit (17) en (18) kan geconcludeerd worden dat in dit geval echter de exacte functie beter benaderd kan worden naarmate men vaker opkrikt, d.w.z. de intervallengte kleiner maakt.

Opm. Men hoeft bij het opkrikken niet de speciale keuze (I) te maken. I.h.a. geldt de transformatiematrix $\underline{\underline{X}}_c$;

$$\begin{pmatrix}A_c(r)\\B_c(r)\end{pmatrix}=\underline{\underline{X}}_c\begin{pmatrix}a_c(r)\\b_c(r)\end{pmatrix}=\frac{1}{W(O_c,I_c)}\begin{pmatrix}W(O_c,i_c) & W(O_c,o_c)\\W(i_c,I_c) & W(o_c,I_c)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_c(r)\\b_c(r)\end{pmatrix}$$

V.2 Drie methoden van opkrikken.

Methode 1: Opkrikken in het eindpunt van het interval.

Dit geval is feitelijk behandeld inde vorige paragraaf. We beschouwen het interval $r_0 \leq r \leq r_1$. Kies $i_c(r_0)=I_c(r_0)$, $o_c(r_0)=O_c(r_0)$, en $i'_c(r_0)=I'_c(r_0)$, $o'_c(r_0)=O'_c(r_0)$. (Keuze I).

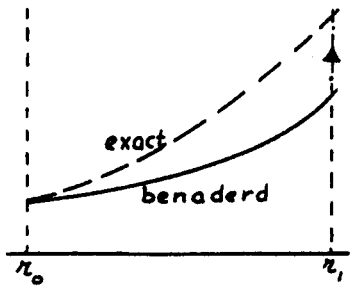


Fig.7: Opkrikken in het eindpunt.

Gaat men er nu van uit dat de benaderde functiewaarde en afgeleide in r_0 gelijk zijn aan de exacte, dan geldt: $\overline{R}_c(r_0)=R_c(r_0)$, en $\overline{R}'_c(r_0)=R'_c(r_0)$. De taak die men zich stelt, is ervoor te zorgen dat men na integratie van r_0 tot r_1, in r_1 de juiste transformatie kan toepassen om de exacte functiewaarde en afgeleide goed te benaderen.

Opkrikken zorgt ervoor dat men ondanks "verkeerde" integratie goed genoeg transformeert van r_0 naar r_1.
Men gaat er hierbij vanuit dat de transformatie-matrices $\underline{\underline{T}}_c$ $\begin{pmatrix} A_c(r_1) \\ B_c(r_1) \end{pmatrix} = \underline{\underline{T}}_c \begin{pmatrix} A_c(r_0) \\ B_c(r_0) \end{pmatrix}$ in het exacte geval, en $\begin{pmatrix} a_c(r_1) \\ b_c(r_1) \end{pmatrix} = \underline{\underline{T}}_c \begin{pmatrix} a_c(r_0) \\ b_c(r_0) \end{pmatrix}$ in het benaderde geval gelijk zijn.
Met (I) volgt hieruit dat $\underline{\underline{X}}_c$ (zie vorige blz.), gelijk is aan de eenheidsmatrix $\underline{\underline{I}}$, en constant in het interval. Bij willekeurige keuze van de i's en o's komt dit neer op het feit dat men de transformatiematrix $\underline{\underline{X}}_c$ onafhankelijk van de plaats kiest. In het buitengebied is hieraan exact voldaan. Bij de keuze (I) is $\underline{\underline{X}}_c = \underline{\underline{I}}$ in r_0 dus ook in r_1. M.a.w. ook in r_1 geldt, $a_c(r_1)=A_c(r_1)$ en $b_c(r_1)=B_c(r_1)$. Men integreert $\overline{R}_c$ vanuit r_0 tot r_1 en vervangt $i_c(r_1)$ door $I_c(r_1)$, $o_c(r_1)$ door $O_c(r_1)$, $i'_c(r_1)$ door $I'_c(r_1)$, en $o'_c(r_1)$ door $O'_c(r_1)$. M.a.w. men past een lineaire transformatie toe op $\begin{pmatrix} \overline{R}_c(r_1) \\ \overline{R}'_c(r_1) \end{pmatrix}$ volgens; $\begin{pmatrix} \tilde{\overline{R}}_c(r_1) \\ \tilde{\overline{R}}'_c(r_1) \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}_c \begin{pmatrix} \overline{R}_c(r_1) \\ \overline{R}'_c(r_1) \end{pmatrix}$
$\underline{\underline{M}}_c$ heet de opkrikmatrix. Met de opgekrikte functie,

$\tilde{R}_c(r_1)=a_c(r_1)I_c(r_1)+b_c(r_1)O_c(r_1)$,
$\tilde{R}'_c(r_1)=a_c(r_1)I'_c(r_1)+b_c(r_1)O'_c(r_1)$, integreert men tot het volgende intervalscheidingspunt om daar weer op te krikken, enz. We hebben reeds gezien dat de opgekrikte functiewaarde in de vierde orde in de intervallengte van de exacte functie-waarde afwijkt.

Methode 2: Opkrikken in het beginpunt van het interval.

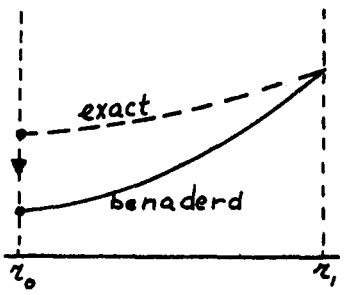
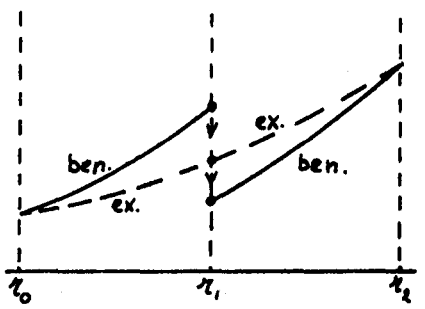


Fig.8: Opkrikken in het beginpunt.

Kies nu in r_1 ;
$i_c(r_1)=I_c(r_1)$ $\quad o_c(r_1)=O_c(r_1)$
$i'_c(r_1)=I'_c(r_1)$ $\quad o'_c(r_1)=O'_c(r_1)$.
Er geldt nu in r_1 ; $\underline{\underline{X}}_c=\underline{\underline{I}}$.
Op de plaats r_0 nemen we nu de transformatiematrix over van de plaats r_1 ; in r_0 geldt ook, dat $\underline{\underline{X}}_c=\underline{\underline{I}}$. Het opkrikken in r_0 betekent, dat we in r_0, $I_c(r_0)$ door $i_c(r_0)$, $O_c(r_0)$ door $o_c(r_0)$, $I'_c(r_0)$ door $i'_c(r_0)$, en $O'_c(r_0)$ door $o'_c(r_0)$ vervangen. De formulering is verder volledig analoog aan die bij methode 1. Onafhankelijk van het feit dat men in het beginpunt dan wel in het eindpunt opkrikt, kan men aantonen dat de opgekrikte functiewaarde in de vierde orde in Δr begint af te wijken van de exacte oplossing.

Methode 3: Een combinatie van de opkrikmethoden 1 en 2.

Fig.9: "tweemaal" opkrikken.



Bij deze opkrikmethode plakt men als het ware twee opeenvolgende intervallen aan elkaar en krikt in het eerste interval in het eindpunt en in het tweede interval in het be-ginpunt op. In r_1 vindt dan een gecompliceerdere opkrikprocedure voor twee intervallen tegelijk plaats.

V3 Het opkrikken in de praktijk.

Hoe vindt het opkrikken in werkelijkheid plaats?
Eigenlijk zou men zodanig dienen op te krikken, dat het punt r waarin men de keuze maakt, volgens $i_c(r)=I_c(r)$, $o_c(r)=O_c(r)$, $i'_c(r)=I'_c(r)$, en $o'_c(r)=O'_c(r)$, overeenkomt met het punt in het interval waarin $|\omega_{cc'}|$ een maximumwaarde bereikt. Immers in een r waar geldt, $\omega_{cc'} \approx 0$, mogen $i_c(r)$ en $I_c(r)$ resp. $o_c(r)$ en $O_c(r)$ wel belangrijk verschillen, zonder dat dit veel invloed heeft op het gedrag van b.v. $a_c(r)$ en $A_c(r)$, zie formule (12).
Dit zou echter betekenen dat men bij de radiële integratie van 0 tot r_m verschillende methoden van opkrikken zou dienen te combineren, b.v. opkrikken in het beginpunt van het interval waar $|\omega_{cc'}(r)|$ stijgt, en opkrikken in het eindpunt van het interval waar $|\omega_{cc'}(r)|$ daalt voor toenemende r.

Als eerste stap is echter getracht de opkrikprocedure (en dus het computerprogramma) zo eenvoudig mogelijk te houden. Hiertoe is gekozen voor het opkrikken in het beginpunt van het interval. Tevens wordt de speciale keuze voor de waarden van $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})$ gemaakt: men kiest voor de waarden van $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})$, die (ℓ,ε) waarden van het aanzetkanaal. Deze twee gegevens leiden ertoe, dat opkrikken in dit geval in feite triviaal is(zie blz.53). Deze aanpak vormt een eerste stap in de richting van een gecompliceerdere aanpak van het opkrikproces, waarin men meerdere mogelijkheden heeft om het proces te optimaliseren.

VI : HET GENEREREN VAN OPLOSSINGSVECTOREN IN r_m IN DE INTERVALSGEWIJZE ENERGY-SUDDEN EN CENTRIGUGAL-SUDDEN-BENADERING.

In hoofdstuk V heeft men reeds kunnen zien dat de oplossing van het verstrooiingsprobleem in het exacte geval (gekoppelde-kanalen-methode met een beperkt aantal vergelijkingen), neerkomt op het oplossen van het onderstaande stelsel gekoppelde tweede-orde-d.v.-en.

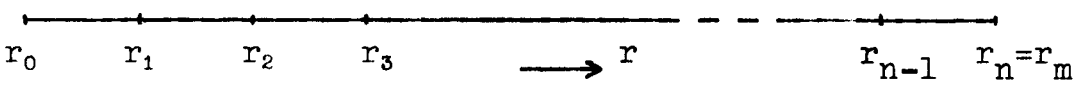
$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_{c,c}(r) - \frac{\ell_c(\ell_c+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-\varepsilon_c)\right] R_c(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{c' \neq c} V_{cc'}(r) R_{c'}(r) \qquad (1)$$

In de e.s.+c.s.-benadering bleek het stelsel gekoppelde d.v.-en gevonden te worden door in (1) de vervanging $(\ell_c, \varepsilon_c) \longrightarrow (\bar{\ell}, \bar{\varepsilon})$ toe te passen.
Dit laatste stelsel kon echter eenvoudig worden opgelost door de ontkoppelde d.v. (2) voor enkele δ-waarden op te lossen.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r;\delta) - \frac{\bar{\ell}(\bar{\ell}+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-\bar{\varepsilon})\right] R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta) = 0 \qquad (2)$$

$\bar{R}_c(r)$ kan dan via het "sandwichen" uit $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ bepaald worden.

In de intervalsgewijze benadering verdeelt men het radiele gebied $0=r_0 \leq r \leq r_m$ in een aantal (n) intervallen:



Interval 1: $r_0=0 \leq r \leq r_1$
Interval 2: $r_1 < r < r_2$
Interval i: $r_{i-1} \leq r \leq r_i$
Interval n: $r_{n-1} \leq r \leq r_n=r_m$

Beschouwt men nu het eerste interval, dan kan men bij een bepaalde combinatie van $(\bar{\ell}, \bar{\varepsilon})$, de radiële golffunctie $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r_1;\delta)$ door numerieke integratie vanuit $r_0=0$ bepalen.
Vanwege het feit dat $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ in $r=r_0=0$ regulier moet zijn,

dient men in het eerste interval een reguliere aanzet te geven.Daar dit voor de andere intervallen i.h.a. niet geldt, m.a.w. in de intervalscheidingspunten r_1, r_2, enz., mogen de functiewaarden $\neq 0$ zijn, dient men in de andere intervallen twee onafhankelijke aanzetten, namelijk functiewaarde-aanzet, resp. afgeleide-aanzet te beschouwen. Hieruit kan men dan door lineair combineren de oplossing bepalen bij een willekeurige randvoorwaarde in het beginpunt van het interval.

Voor de afgeleide-eenheidsaanzet in kanaal (ℓ,ε) bepaalt men voor enkele waarden van δ, $R_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r_1;\delta)$ en $R'_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon}}(r_1;\delta)$ onder de voorwaarde: $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})=(\ell,\varepsilon)$.
Kiest men voor de δ-waarden b.v. $\delta_1=-\Delta, \delta_2=0$, en $\delta_3=+\Delta$, dan volgen de coëfficiënten $c_0(r_1), c_1(r_1)$ en $c_2(r_1)$ uit de onderstaande vergelijkingen;

$$R(r_1;\delta_1) = c_0(r_1) - c_1(r_1)\Delta + c_2(r_1)\Delta^2$$
$$R(r_1;\delta_2) = c_0(r_1)$$
$$R(r_1;\delta_3) = c_0(r_1) + c_1(r_1)\Delta + c_2(r_1)\Delta^2 .$$

De coëfficiënten behorende bij $R'(r_1;\delta)$ bepaalt men op analoge manier. M.b.v. deze coëfficiënten kan men nu de oplossingsvector in r_1 bepalen, die bestaat uit 2N componenten, namelijk de functiewaarde en afgeleide in r_1 in elk van de N kanalen. Daar echter in het fysische geval in alle kanalen in $r_0=0$ een reguliere start van de functie optreedt, zal men ook in alle kanalen een reguliere aanzet dienen te geven, en de bijbehorende oplossingsvector in r_1 te bepalen. Voor iedere aanzet vindt men dus <u>een</u> oplossingsvector met 2N componenten. De N oplossingsvectoren vormen tesamen de oplossingsmatrix $\underline{\underline{B}}_1$ met 2N rijen en N kolommen.

$$\underline{\underline{B}}_1 = \begin{array}{c} \\ \text{kan.1} \\ \downarrow \\ \text{kan.N} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 1 & \xrightarrow{\text{aanzetkanaal}} & N \end{array} \\ \begin{pmatrix} \text{functiew.} & & \\ \text{afgeleide} & & \\ \cdot & & \\ \cdot & & \\ \text{functiew.} & & \\ \text{afgeleide} & & \end{pmatrix} \end{array}$$

Hoe vindt het opkrikken nu plaats?
Kiest men voor het opkrikken in het beginpunt van het interval,dan is dit in verband met de speciale keuze voor $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})=(\ell,\varepsilon)_{\text{aanzetkanaal}}$ bijzonder voordelig.
Bij een aanzet in kanaal k kiest men $\bar{\ell}=\ell_k$ en $\bar{\varepsilon}=\varepsilon_k$;voor dit kanaal geldt dan dat $i_k(r)=I_k(r)$ en $o_k(r)=O_k(r)$, $i_k'(r)=I_k'(r)$ en $o_k'(r)=O_k'(r)$ voor iedere r,immers $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})=(\ell_k,\varepsilon_k)$,m.a.w. voor dit kanaal zijn de exacte waarden voor $\bar{\ell}$ en $\bar{\varepsilon}$ gebruikt.
In dit kanaal hoeft men niet op te krikken,$\underline{\underline{M}}_k=\underline{\underline{I}}$.
Voor de andere kanalen k geldt $i_k(r)\neq I_k(r)$ en $o_k(r)\neq O_k(r)$ resp. $i_k'(r)\neq I_k'(r)$ en $o_k'(r)\neq O_k'(r)$;immers $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})=(\ell_k,\varepsilon_k)\neq(\ell_k,\varepsilon_k)$.
Maar in deze kanalen heeft opkrikken in de beginpunten van het interval geen effect omdat de functiewaarden en afgeleiden in de beginpunten nul zijn en dus ook de coëfficiënten a_k en b_k nul zijn.De speciale keuze van $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})=(\ell,\varepsilon)_{\text{aanzetkanaal}}$ maakt het opkrikken in het beginpunt van het interval triviaal.

Nadat de oplossingsmatrix $\underline{\underline{B}}_1$ voor het eerste interval bepaald is,doet men dit op analoge manier voor de andere intervallen. Nu verkrijgt men echter steeds 2Nx2N-overdrachtsmatrices $\underline{\underline{C}}_i$ vanwege het feit dat men nu steeds 2 aanzetten (functiewaarde- resp. afgeleide-aanzet) in r_i geeft.

Opm.Men begint in elk interval steeds met de eenheidsaanzet, i.p.v. met de werkelijke functiewaarde resp. afgeleide die ter plaatse van het intervalscheidingspunt heerst de integratie te starten.Zodoende kan men de coëfficiënten bepaald bij een bepaalde combinatie $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})$,die in verschil-lende J-stelsels voorkomt, ook in die verschillende J-stelsels gebruiken.

Om nu de N oplossingsvectoren met elk 2N componenten in r_m te bepalen,bij de N aanzetten (N kanalen) in r_0,dient men de overdrachtsmatrices met elkaar te vermenigvuldigen volgens;

$$\underline{\underline{C}}_n \times \underline{\underline{C}}_{n-1} \times \quad \underline{\underline{C}}_3 \times \underline{\underline{C}}_2 \times \underline{\underline{B}}_1 = \underline{\underline{D}}$$

De $\underline{\underline{C}}$-matrices zijn 2Nx2N-matrices; $\underline{\underline{B}}_1$ en $\underline{\underline{D}}$ zijn 2NxN-matrices.

Oplossingsmatrix $\underline{\underline{D}}$ bevat nu de N oplossingsvectoren (kolomvectoren) behorende bij de aanzetten in de N kanalen in r_0. Elk van deze oplossingsvectoren bevat N functiewaarden en N afgeleiden in de N kanalen ter plaatse r_m. Elk van deze N oplossingsvectoren voldoet aan de randvoorwaarde in r_0.

Opm. In feite voert men bovenstaande vermenigvuldiging staps-gewijs uit; na 2 intervallen voert men de vermenigvuldiging $\underline{\underline{C}}_2 \times \underline{\underline{B}}_1 = \underline{\underline{D}}$ uit, na 3 intervallen de vermenigvuldiging $\underline{\underline{C}}_3 \times \underline{\underline{D}}$. Numeriek is deze procedure voordelig, i.v.m. het feit dat men zodoende slechts opslagruimte voor een 2Nx2N-matrix, en twee 2NxN-matrices hoeft te reserveren. Bij elke vermenigvuldiging wordt steeds een "halve" (2NxN-) matrix vermenigvuldigd met een "hele" (2Nx2N-) matrix.

Van de N onafhankelijke oplossingsvectoren uit $\underline{\underline{D}}$ vormt men die lineaire combinatie, die in r_m aan de randvoorwaarde voor een fysische oplossing voldoet. Hieruit volgt de S-matrix. Op deze wijze bepaalt men de S-matrix voor elke J-waarde van 0 tot en met J_{max}, zodat men de differentiële werkzame doorsneden kan bepalen. (J-waarden groter dan J_{max} dragen niet significant bij tot de differentiële werkzame doorsneden.)

Ter illustratie van de afmetingen van de bovengenoemde matrices volgt nu een korte beschouwing omtrent het aantal kanalen waarmee men bij een bepaalde J-waarde te maken heeft indien we de reeds eerder genoemde $0_1^+-2_1^+-0_2^+-2_2^+-4_1^+$-koppeling in rekening brengen.

Voor het geval $I_{max} \leq J \leq J_{max}-I_{max}$, dus voor $4 \leq J \leq J_{max}-4$ heeft men te maken met een stelsel dat volledig is: N=13.

Voor $J < 4$ en $J > J_{max}-4$ heeft men een stelsel met een kleinere N:

J=0 N=5
J=1 N=8
J=2 N=11
J=3 N=12

$4 \leq J \leq J_{max}-4$ N=13.

Als voorbeelden voor de mogelijke (ℓ,N_{fonon},I) -combinaties bij een bepaalde J-waarde kunnen dienen,J=0,J=10,en J=20, zie onderstaande tabel.

J=0	N	ℓ	I	N_{fonon}
	1	0	0	0
	2	2	2	1
	3	0	0	2
	4	2	2	2
	5	4	4	2

J=10

N	ℓ	I	N_{fonon}
1	10	0	0
2	12	2	1
3	10	2	1
4	8	2	1
5	10	0	2
6	12	2	2
7	10	2	2
8	8	2	2
9	14	4	2
10	12	4	2
11	10	4	2
12	8	4	2
13	6	4	2

J=20

N	ℓ	I	N_{fonon}
1	20	0	0
2	22	2	1
3	20	2	1
4	18	2	1
5	20	0	2
6	22	2	2
7	20	2	2
8	18	2	2
9	24	4	2
10	22	4	2
11	20	4	2
12	18	4	2
13	16	4	2

VII : DE INTERACTIE-POTENTIAAL.

In ons model gaan we ervan uit dat de wisselwerking die het invallende projectiel van de sferische kern ondervindt, beschreven kan worden door een model-potentiaal V(r),die in het algemeen complex is.Later zal blijken ,waarom V(r) een imaginair gedeelte bevat.(Zie appendix B)
In het geval van geladen projectielen omvat de potentiaal ook de Coulomb-wisselwerkingsterm $V_C(r)$.
Expliciet ziet de potentiaal die we in onze berekeningen ge-bruiken er als volgt uit;

$$V(r)=V_C(r)-V_0 f(r,R_0,a_0)-i\left[W_V f(r,R_i,a_i)-4a_i W_D \frac{d}{dr} f(r,R_i,a_i)\right] \qquad (1)$$

In deze uitdrukking is de spin-baan-koppeling achterwege gelaten.V_0, W_V, W_D zijn parameters die de sterkte van de afzonderlijke kernpotentiaaltermen bepalen.(Zie Lit. 11).

Voor de radiële vormfactoren wordt meestal de Saxon-Woods-vorm genomen,die als volgt gedefiniëerd is;

$$f(r,R,a)=1/(1+\exp(r-R/a)) \qquad (2)$$

Een gedetailleerde beschrijving van de wisselwerkingspotentiaal vindt men in appendix B.

Indien nu de sferische kern quadrupoolvibraties uitvoert om de evenwichtsbolvorm dan vervangt men R_0 resp. R_i in de uitdrukking voor de potentiaal door $R_0+\delta$ resp. $R_i+\delta$.(Zie appendix B).

Voor de Coulombpotentiaal is de procedure minder eenvoudig,vanwege het feit dat deze potentiaal een lange dracht heeft.In de sferische evenwichtsvorm stelt men de lading homogeen verdeeld over een bol met straal R_C,de zgn.Coulomb-straal.Voor de ladingsdichtheid $\rho(r)$ geldt er dus:

$$\begin{aligned} \rho(r)&=\rho_0=3ZZ'e^2/4\pi R_C^3 && \text{voor } r<R_C \\ \rho(r)&=0 && \text{voor } r>R_C \end{aligned} \qquad (3)$$

Hieruit volgt voor de Coulombpotentiaal bij de sferische homogene ladingsverdeling;

$$V_C(r)=\frac{ZZ'e^2}{4\pi\varepsilon_0 2R_C}\left[3-(r^2/R_C^2)\right] \qquad \text{voor } r<R_C,$$
$$\text{en } V_C(r)=\frac{ZZ'e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad \text{voor } r>R_C. \tag{4}$$

Indien men nu de Coulombpotentiaal berekent voor de homogene ladingsverdeling die op dezelfde wijze gedeformeerd wordt als de kern,m.a.w. een homogene ladingsverdeling binnen $R_C+\delta(\theta,\phi)$,dan blijkt in eerste orde in δ dat voor $r<R_C$ een term evenredig met r^2 en voor $r>R_C$ een term evenredig met $1/r^3$ toegevoegd te worden,namelijk;

$$V_C(r)=\frac{ZZ'e^2}{4\pi\varepsilon_0 2R_C}\left[3-(r^2/R_C^2)\right]+\frac{3ZZ'e^2 r^2}{20\pi\varepsilon_0 R_C^3 R_0}\cdot\delta \qquad \text{voor } r<R_C,$$
$$\text{en } V_C(r)=\frac{ZZ'e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{3ZZ'e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^3 R_0}\cdot R_C^2\cdot\delta \qquad \text{voor } r>R_C. \tag{5}$$

Zie Lit.11.

VIII. PRAKTISCHE UITVOERING.

1Het programma.

Bij het schrijven van een computerprogramma,ter berekening van de differentiële werkzame doorsnede in de e.s.+c.s.-benadering,komen de raakpunten die deze methode heeft met de gekop-pelde-kanalen-methode,naar voren.Hierdoor is het mogelijk enkele standaardroutines uit het Jupitor-programma (Fortran) te gebruiken.
Dit programma werd geschreven door T.Tamura voor de berekening van differentiële werkzame doorsneden in het gekoppelde-kanalen-formalisme. (Zie Lit.12).
Van dit programma zijn een aantal subroutines,zoals FLGLCH, CPLEV,SMATRX,SIMLEQ aan onze rekenmethode aangepast.
Een aantal subroutines,RAC7,CLEB,XSEC en de functies CDLGAM en W3JS zijn onveranderd gebruikt.

De hoofdbrok van het e.s.+c.s.-programma,bestaande uit de subroutines RADINT,SIGMA,AMAT,MLTCAM,enPOT zijn in samenwerking met Leon Beerendonk geschreven.(Zie Lit. 13)

2De integratie-methode.

Voordat we met de beschouwing van de structuur van het programma en de taak van de afzonderlijke subroutines en functies beginnen,nemen we de methode van integratie onder de loep.
De integratiemethode die we gebruiken heeft tot gevolg dat we op enkele punten in de praktische uitvoering,afwijken van de theoretische behandeling.

Voor de radiële integratie is gebruik gemaakt van de Numerov-methode.Het gebruik van de Numerov-methode is voordelig i.v.m. de opkrikprocedure.(Men heeft steeds te maken met twee randvoorwaarden;bij de Numerov-methode is alle informatie opgeslagen in twee punten.)
Als nadeel kan aangevoerd worden,dat men geen beschikking heeft

over de afgeleide.Binnen het kader van onze berekeningen speelt dit feit echter geen rol van betekenis.

De Numerov-methode berekent de functiewaarde in r+h,uit twee functiewaarden ter plaatse r-h resp. r (h=integratiestap). Gaat men uit van de tweede-orde-d.v. $f''(r)=V(r).f(r)$ dan kan men m.b.v. de definitie van de aan f(r) aangepaste functie $\xi(r)$ volgens $\xi(r)=f(r)-(h^2/12).f''(r)$ aantonen dat ;

$$\xi(r+h)=2\xi(r)-\xi(r-h)+h^2.V(r)\left[1+(h^2/12).V(r)\right]\xi(r)+O(h^6)$$

Door deze definitie van de aangepaste functie verkrijgt men een drie-punts-integratie-methode.Uit de aangepaste functie $\xi(r)$ kan men f(r) terugvinden volgens;

$$f(r)=\xi(r)+(h^2/12).V(r).\left[1+(h^2/12).V(r)\right]\xi(r) \quad .$$

In de Numerov-representatie werkt men met aangepaste functies $\xi(r)$.Hierdoor geschiedt het aansluiten in r_m in de praktijk met aangepaste Coulombfuncties $\mathcal{F}$ en $\mathcal{G}$ die als volgt gedefinieerd worden;

$\mathcal{F}(r)=F(r)-(h^2/12).F''(r)$ resp. $\mathcal{G}(r)=G(r)-(h^2/12).G''(r)$.

Indien men de definitie van de S-matrix (appendix C) bekijkt, dan blijkt dat de S-matrix-elementen bij aansluiten met gewone functies f(r),F(r),G(r),identiek zijn aan die,bij aansluiten met de aangepaste functies $\xi(r),\mathcal{F}(r),\mathcal{G}(r)$.

I.p.v. te werken met functiewaarde- en afgeleide- aanzet in r_{i-1} werkt men met twee functiewaarde-aanzetten in r_{i-1} en $r_{i-1}+h$. Hierdoor bevat de overdrachtsmatrix $\underline{\underline{C}}_i$ van het i-de interval 2N oplossingsvectoren (2 per aanzetkanaal) in r_i. Elk van de 2N oplossingsvectoren bevat 2N componenten; N functiewaarden in r_i en N functiewaarden in r_i+h.
Als gevolg hiervan geschiedt het aansluiten op r_m met aangepaste functiewaarden in r_m en r_m+h, i.p.v. met functiewaarde en afgeleide in r_m.

Opm. Tevens wordt bij het aansluiten gewerkt met de C-matrix, die in feite de afwijking van de S-matrix t.o.v. de eenheids-matrix weergeeft,i.p.v. met de S-matrix (appendix C),omdat dit het mogelijk maakt de subroutine (XSEC) over te nemen uit het Jupitor-programma,ter bepaling van de differentiële doorsneden.

3 De structuur van het programma.

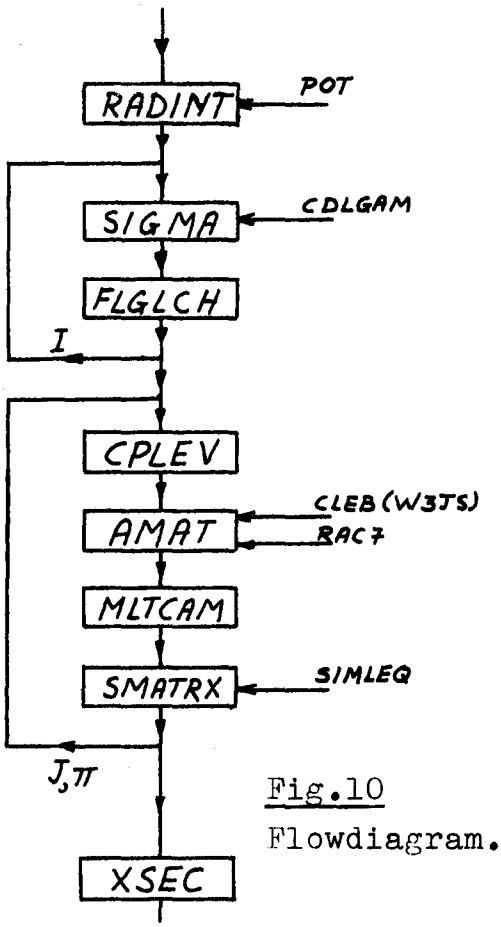


Fig.10
Flowdiagram.

Het doorlopen van nevenstaand flow-diagram wordt gerealiseerd in het hoofdprogramma MAIN.
De voorkomende subroutines en functies zijn weergegeven in onderstaande tabel.

SUBROUTINES:	FUNCTIES:
RADINT, POT,	CDLGAM,
SIGMA,	W3JS.
FLGLCH,	
CPLEV, AMAT,	
CLEB, RAC7,	
MLTCAM,	
SMATRX,	
SIMLEQ, XSEC.	

4 Taakomschrijving van de afzonderlijke subroutines en functies.

RADINT: Deze subroutine bepaalt alle complexe coëfficiënten c_0, c_1, en c_2 (zie formule IV.6).
Elk van deze coëfficiënten wordt gekarakteriseerd door vier parameters namelijk: lstr, str, nint, iaanz. Deze parameters staan voor $\bar{\ell}$, $\bar{\varepsilon}$, het rangnummer van het intervalscheidingspunt en het aanzetnummer.
De parameter $\bar{\ell}$ doorloopt de waarden 0 tot en met ℓ_{max}.
De parameter $\bar{\varepsilon}$ doorloopt de waarden ε_1, ε_2, ε_3, ε_4, ε_5 behorende bij de vijf fononniveaus die in onze beschouwing worden betrokken.

0-fononniveau	0_1^+	: ε_1
1-fononniveau	2_1^+	: ε_2
2-fononniveaus	0_2^+	: ε_3
	2_2^+	: ε_4
	4_1^+	: ε_5

De parameter nint doorloopt de waarden 1 t/m maxint, waarbij maxint het beschouwde aantal intervallen aangeeft.
De parameter iaanz doorloopt de waarden 1,2,afhankelijk van het feit of je een functiewaarde-aanzet in r_i dan wel in r_i+h geeft.
Voor elke mogelijke combinatie van (ℓstr,εstr,nint, iaanz) binnen de hierboven gestelde grenzen worden de complexe coëfficiënten c_0,c_1,en c_2 uitgerekend.
Bijv. voor de bepaling van de coëfficiënten behorende bij de combinatie (1,2,4,2) wordt de d.v. (formule IV.2) voor $\ell=1$, $\varepsilon=\varepsilon_2$ geïntegreerd vanuit r_3 naar r_4 bij een functiewaarde-eenheids-aanzet in r_3+h.

POT :In deze subroutine wordt de interactiepotentiaal voor $0<r<r_m$ in de punten $r_n=n.h$ berekend.(n=1,2,.. ;h= integratiestap)

SIGMA :Deze subroutine bepaalt de Coulombfaseverschuivingen $\sigma_\ell=\arg\Gamma(1+\ell+i\eta)$ voor iedere ℓ bij vaste η.
Hierbij is η de Coulombparameter gegeven door $\eta=\frac{mZZ'e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2k}$
De I-loop zorgt ervoor dat dit voor elk van de vijf mogelijke k-waarden gebeurt.
Uit de complexe functietheorie is bekend dat

$$\log z := \log|z| + i.\arg(z)$$

Hieruit volgt : $\sigma_\ell=\mathrm{Im}\log\Gamma(1+\ell+i\eta)$.
De logaritme van de gammafunctie voor complexe argumenten wordt gegeven door de functie CDLGAM.

CDLGAM :Hierin wordt de logaritme van de gammafunctie bepaald voor complexe argumenten;standaardfunctie uit Jupitor.

FLGLCH :Bepaling van de reguliere en irreguliere Coulombfuncties m.b.v. de Miller-methode.(Zie Lit. 14).
Deze subroutine is in zoverre aangepast dat de output bestaat uit de aan de Numerov-representatie aangepas-

te ("kromme") Coulombfuncties $\mathcal{F}$ en $\mathcal{G}$ op r_m en r_m+h, i.p.v. F,F' en G,G' op r_m.
Deze $\mathcal{F}$'s en $\mathcal{G}$'s worden bepaald voor $\ell=0,1,2,\ldots\ell_{max}$.
De I-loop zorgt ervoor dat deze procedure voor elk van de vijf mogelijke k-waarden geschiedt.

CPLEV :Deze subroutine bepaalt welke (ℓ,N,I)-combinaties kunnen optreden bij gegeven totaalimpulsmomentquantumgetal J en pariteit π.(Zie voorbeelden op blz.55).

AMAT :Deze subroutine berekent de matrixelementen van δ en δ^2 namelijk AMAT1 en AMAT2.

$$\{\ell' N' I' \mid R_{\bar{\ell}\bar{\ell}}(r;\delta) \mid \ell N I\} = c_0(r)\,\delta_{\ell'\ell}\,\delta_{N'N}\,\delta_{I'I} + c_1(r).R_0\langle \ell' N' I' \mid \delta \mid \ell N I\rangle + c_2(r).R_0^2\langle \ell' N' I' \mid \delta^2 \mid \ell N I\rangle$$

(zie formule IV.7).
AMAT1($\ell' N' I'$, ℓ N I)$=R_0\langle \ell' N' I' \mid \delta \mid \ell N I\rangle$
AMAT2($\ell' N' I'$, ℓ N I)$=R_0^2\langle \ell' N' I' \mid \delta^2 \mid \ell N I\rangle$
Hierbij doorlopen ($\ell' N' I'$) resp. (ℓ N I) als combinatie beide de mogelijke waarden in CPLEV bepaald.

CLEB :Deze subroutine bepaalt m.b.v. de functie W3JS de Clebsch Gordan-coëfficiënten.

W3JS :Deze functie bepaalt de waarde van een Wigner-3j-symbool.

RAC7 :M.b.v. deze subroutine worden 6j-symbolen bepaald.

MLTCAM:Deze subroutine berekent in eerste instantie m.b.v. de coëfficiënten $c_0(r_1)$,$c_1(r_1)$,$c_2(r_1)$ en AMAT1 en AMAT2 de ge-"sandwich"-te golffunctie $\bar{R}_{\bar{\ell}\bar{\ell}';\ell' N' I',\ell N I}$ volgens:

$$\bar{R}_{\bar{\ell}\bar{\varepsilon};\ell'N'I',\ell NI}(r_1)=c_0(r_1)\,\delta_{\ell'\ell}\delta_{N'N}\delta_{I'I}+c_1(r_1).AMAT1(\ell'N'I',\ell NI)$$
$$+c_2(r_1).AMAT2(\ell'N'I',\ell NI)$$

Hierin is (ℓNI) het aanzetkanaal (reguliere aanzet in $r_0=0$), $(\ell'N'I')$ het kanaal waarin men de benaderde gekoppelde-kanalen-golffunctie in r_1 wil weten.
Men neemt hierbij die coëfficiënten $c_0(r_1)$, $c_1(r_1)$, en $c_2(r_1)$ waarvoor $(\bar{\ell},\bar{\varepsilon})=(\ell,\varepsilon)_{aanzetkanaal}$, nint=1 en iaanz=2.(regulier).
Zodoende berekent men de oplossingsmatrix $\underline{\underline{B}}_1$ (zie blz. 52) in r_1. Voor nint=2 bepaalt men de overdrachtsmatrix $\underline{\underline{C}}_2$ en voert de vermenigvuldiging $\underline{\underline{C}}_2.\underline{\underline{B}}_1=\underline{\underline{D}}$ uit.
Voor nint=3 bepaalt men overdrachts-matrix $\underline{\underline{C}}_3$ en slaat deze op in matrix $\underline{\underline{C}}_2$; men voert weer de vermenigvuldiging $\underline{\underline{C}}_2.\underline{\underline{D}}$ uit en slaat het resultaat op in matrix $\underline{\underline{B}}_1$. $\underline{\underline{B}}_1$ en $\underline{\underline{D}}$ zijn 2N bij N-matrices, de $\underline{\underline{C}}$-matrices hebben afmeting 2N bij 2N.(N is het aantal kanalen bij de beschouwde J,π-combinatie.)

Zo vindt men uiteindelijk de oplossingsvector in r_m terug in matrix $\underline{\underline{D}}$ als maxint even is, en in $\underline{\underline{B}}_1$ als maxint oneven is. Schrijft men bij oneven maxint matrix $\underline{\underline{B}}_1$ over in matrix $\underline{\underline{D}}$, dan vindt men de oplossingsvectoren in r_m steeds terug in matrix $\underline{\underline{D}}$, onafhankelijk van het aantal intervallen.
Zodoende heeft men voor het succesievelijk bepalen van oplossingsmatrix, overdrachtsmatrix, en vermenigvuldigingsmatrix steeds slechts drie matrices nodig.(De $\underline{\underline{C}}$-matrix, 2N bij 2N, en twee matrices $\underline{\underline{B}}_1$ en $\underline{\underline{D}}$ met afmeting 2N bij N).

SMATRX Deze subroutine bepaalt de C-matrix-elementen uit de vergelijkingen analoog aan C.1 en C.2 uit appendix C. M.b.v. subroutine SIMLEQ worden namelijk de coëfficiënt -en a_p bepaald uit het eerste stelsel vergelijkingen. (C.3).Uit vergelijking C.4 bepaalt SMATRX dan m.b.v. de coëfficiënten a_p het C-matrixelement C_{nq} .

SIMLEQ: Deze subroutine lost een stelsel algebraische inhomogene lineaire vergelijkingen op. Men gebruikt hierbij een standaardtechniek (vegen) om de coëfficiëntenmatrix in de driehoeksvorm te brengen.

XSEC : Deze subroutine rekent via een aantal hier niet genoemde subroutines uit Jupitor, m.b.v. de C-matrixelementen, de differentiële werkzame doorsneden voor de verscheidene fononniveaus uit.

IX. RESULTATEN.

De berekeningen in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering en de c.c.-berekeningen(c.c.="coupled channels"),die hierna ter sprake komen,zijn uitgevoerd op de B7700-computer aan de T.H.E.

Enkele aspecten die in deze resultatenbespreking achtereenvolgens aan de orde komen zijn;

1. Het gedrag van $R_{\ell,\ell'}(r;\delta)$ op een vaste plaats r,als functie van de verschuiving δ.
2. Het vergelijken van de differentiële werkzame doorsnede verkregen met de gekoppelde-kanalen-methode (c.c.),met de e.s.+c.s.-differentiële werkzame doorsnede voor;
   a. proton-verstrooiing aan ^{112}Cd. ; ^{112}Cd(p,p').
   b. α-deeltjes-verstrooiing aan ^{60}Ni. ; ^{60}Ni(α,α').
3. Beschouwing omtrent enkele mogelijke ingrepen ter beperking van de rekentijd.
   a. Het verschuiven van het integratie-startpunt.
   b. Het symmetriseren van de S-matrix.
4. Enkele aspecten die in de toekomst kunnen leiden tot optimalisatie van het huidige programma.
   a. De keuze van de opkrikmethode.
   b. De keuze van ℓ.

IX.1 Het gedrag van de radiële golffunctie $R_{\ell,\varepsilon}(r;\delta)$ op een vaste plaats r,als functie van de verschuiving δ.

Voor ^{60}Ni.(α,α') is het gedrag van de radiële golffunctie $R_{\ell,\varepsilon}(r;\delta)$ onder de loep genomen voor een projectielenergie van 104 MeV.Hiertoe verdelen we het radiële gebied $0 \leqslant r \leqslant r_m$ b.v. in twee intervallen;

interval 1: $r_0=0 \leqslant r \leqslant r_1=6,5$ fm.

interval 2: $r_0=6,5$ fm $\leqslant r \leqslant r_1=13,0$ fm.

Voor $\bar{\varepsilon}=\varepsilon_1=0$,en iaanz=2 (eenheids-aanzet in r_0+h;h=0,1 fm), zijn de reële en imaginaire gedeelten van $R_{\ell,\varepsilon}(r;\delta)$ uitgezet in grafiek Ia en Ib voor interval 1,en in grafiek II voor interval 2,met ℓ als parameter.(Functies zijn genormeerd).

De verwachtingswaarde van δ^2 in de grondtoestand wordt gegeven door $\langle\delta^2\rangle=\beta^2R_0^2$ (zie formule IV.12),zodat het te beschouwen δ-interval ongeveer zal overeenkomen met $-1,0$ fm$<\delta<1,0$ fm. ($\beta=0,168$;$R_0\simeq5,2$ fm)

Vanwege het feit dat $R_0\approx5,2$ fm en $R_1\approx6,1$ fm ligt het punt r=6,5 fm in het koppelingsgebied.

Men ziet dat de functies voor interval 2 voor $\ell>20$ glad verlopen in het hele δ-interval $-1,0$fm$<\delta<1,0$ fm.(grafiek II .)

Voor lage ℓ-waarden <20,overeenkomende met projectielen met een botsingsparameter $b\lesssim R_0$ is het verloop minder glad.

In de omgeving van $\delta=0$ is echter voor alle curven een kwadratische beschrijving (tweede-graadspolynoom) mogelijk,b.v. in het gebied $-0,3$ fm$<\delta<0,3$ fm.Vanwege de beperkte vibratieamplitude zullen voornamelijk de kleinere δ-waarden een belangrijke rol spelen.Uit grafieken Ia en Ib volgt dat het verloop van de curven voor het eerste interval minder glad is.

Voor een beperkt gebied $-0,3$ fm$<\delta<0,3$ fm kan men ook deze curven kwadratisch beschrijven.Hieruit blijkt dat de veronder-stelling die men in het kader van de e.s.+c.s.-benadering maakt m.b.t. het voldoende vlak verlopen van $R_{\ell,\varepsilon}(r;\delta)$ als functie van δ een redelijke veronderstelling is,althans wat

betreft deze grote radiële intervallen en deze beperkte δ-gebieden.

Wil de intervalsgewijze aanpak van de e.s.+c.s.-benadering succes hebben,dan is het noodzakelijk dat voor kleinere inter-vallengten de functies $R_{l,\varepsilon}(r;\delta)$ glad verlopen in een groter δ-gebied,namelijk het realistische gebied,-1,0 fm$< \delta <$ 1,0 fm, overeenkomende met de realistische deformatieparameter β=0,168.

We verdelen nu het radiële gebied $0 \leqslant r \leqslant r_m$ in 10 gelijke intervallen,en beschouwen de functies $R_{l,\varepsilon}(r_1;\delta)$ in de punten 6,5 en 13,0 fm.:

interval 5: r_0=5,2 fm $\leqslant r \leqslant r_1$=6,5 fm.

interval 10: r_0=11,7 fm $\leqslant r \leqslant r_1$=13,0 fm.

In grafieken III en IV zijn weer het reële en imaginaire gedeelten van $R_{l,\varepsilon}(r;\delta)$ uitgezet voor $\bar{\varepsilon}$=0,iaanz=2,voor interval 5 resp. 10,met $\bar{l}$ als parameter.Voor b.v interval 5 wordt de radiële golffunctie verkregen door d.v.IV.2 te integreren vanuit r_0=5,2 fm tot 6,5 fm,met $\bar{\varepsilon}$=0, bij een eenheids-aanzet in r_0+h=5,3 fm.

Uit genoemde grafieken blijkt dat de functies bij deze kleinere intervallen glad verlopen in een groter δ-gebied,zodat een kwadratische beschrijving in praktisch het hele realisti-sche δ-gebied opgaat.De niet getekende curven voor de andere waarden van $\bar{l}$ vertonen alle de trend: vlak verloop in een groter δ-gebied bij 10 vergeleken bij 2 intervallen.

Voor het tiende interval zijn de reële gedeelten in het hele δ-gebied praktisch constant.Dit komt doordat een verschuiving van plus of min één fm in het uiterste van de Saxon-Woods-potentiaal-staart niet meer gevoeld wordt.Voor de imaginaire gedeelten treedt voor positieve δ nog een afbuiging op, [illegible] het feit dat $R_i \geqslant R_0$.

Uit het feit dat voor 15 intervallen de differentiële werkzame doorsneden voor de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering geconvergeerd zijn naar de "exacte" resultaten(c.c.),(hierop komen we zo dadelijk terug),blijkt dat voor 15 intervallen de kwadratische beschrijving in het ter zake doende δ-gebied opgaat.

IX.2a De differentiële werkzame doorsneden voor proton-verstrooiing aan ^{112}Cd.-kernen.

We beschouwen nu de verkregen resultaten voor de differentiële werkzame doorsneden in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering,met de c.c.-resultaten,voor de verscheidene fononniveaus,voor ^{112}Cd(p,p').Dit doen we bij een protonenergie van 30 MeV.Hierbij wordt nog geen Coulombexcitatie in de beschouwing betrokken.(De δ-afhankelijke term in formule VII.5 blijft hier achterwege).De parameters die bij deze berekeningen zijn gebruikt,vinden we op blz.78 .
Voor de elastische verstrooiing,(0_1^+-niveau),vallen de curven voor de verscheidene waarden van het aantal intervallen in de e.s.+c.s.-benadering,en de c.c.-curve praktisch samen.
Voor de 2_1^+-,0_2^+-,2_2^+-,4_1^+-niveaus is dit echter niet het geval.
Als voorbeeld tonen grafieken IV en V voor enkele waarden van het aantal intervallen,de differentiële werkzame doorsneden voor het 2_1^+- en het 2_2^+-niveau.Uit deze grafieken blijkt, (zoals reeds op blz. 45 vermeld),dat de resultaten voor 1 interval erg onbevredigend zijn.(Zie Lit.13).
Dit feit is de aanleiding geweest tot de intervalsgewijze aanpak (+opkrikken),van de e.s.+c.s.-benadering.Men ziet dat voor 5 intervallen de curven reeds een eind in de goede richting zijn verschoven.Voor 10 intervallen komen de differentiële doorsneden goed overeen ($\pm$20%) met de c.c.-curven.Dit geldt ook voor de hier niet getoonde gegevens voor de andere niveaus.
We kunnen concluderen dat er convergentie optreedt naar het c.c.-resultaat.

Vergelijkt men de rekentijden voor de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering voor 10 intervallen,met die benodigd voor de c.c.-berekening,dan levert dit een reductie van de rekentijd op met ruwweg een factor 4 ($\approx$130sec t.o.v.$\approx$500 sec).

Opm.Er geldt bij benadering dat de rekentijd in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering evenredig is met het aantal intervallen.Dit komt doordat de matrixvermenigvuldiging het hoofddeel van de rekentijd kost.(Zie blz.53).

Voor 10 intervallen betrekken we nu de Coulombexcitatie in de beschouwing.In onze berekenigen wordt echter slechts de δ-term meegenomen.In de c.c.-berekening wordt tevens de δ^2-term meegenomen.Hieruit volgt dat onze resultaten niet geheel kunnen overeenstemmen met het c.c.-resultaat.

Voor het 2_2^+-niveau vergelijken we nu de c.c.-curve zonder Coulombexcitatie,en de c.c.-curve met Coulombexcitatie (δ en δ^2),met de e.s.+c.s.-curve met Coulombexcitatie.(Grafiek VII). We zien dat ons resultaat de verschuiving van de c.c.-curve zonder Coulombexcitatie,naar de c.c.-curve met Coulombexcitatie in hoge mate volgt.

IX.2b De differentiële werkzame doorsneden voor α-verstrooiing aan ^{60}Ni.-kernen.

Hier vergelijken we,net als in paragraaf 2a,de verkregen resultaten voor de differentiële werkzame doorsneden in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering,met de c.c.-resultaten, voor de verscheidene waarden van het aantal intervallen.

Hier doen we dit voor 104 MeV-α-deeltjes-verstrooiing aan ^{60}Ni.De parameters die bij deze berekeningen zijn gebruikt vinden we op blz. 78 .

Grafieken VIII en IX tonen voor het 2_1^+-resp. het 2_2^+-niveau de differentiële werkzame doorsneden voor enkele waarden van het aantal intervallen.Voor 1 en 2 intervallen zijn de cur-ven niet getekend,vanwege het feit dat deze te ver van de c.c.-ve verwijdert zijn.Ter illustratie van deze grote afwijking zien we in de tabel op blz.76,77voor 1 en 15 intervallen,voor enkele J-waarden de C-matrixelementen vermeld in de rangschik-king;

	N=1	N=2	N=3	N=4
	N=5	N=6	N=7	N=8
	N=9	N=10	N=11	N=12
	N=13			

b.v. voor J=10 staat op plaats N=7 het C-matrixelement beho-

rende bij de overgang van de grondtoestand (ℓ=J=10,I=0,N_f=0) naar de toestand (ℓ=10,I=2,N_f=2),zie voorbeeld op blz. 55 . Voor 104 MeV α-verstrooiing dragen de J-waarden van ongeveer 20 tot ongeveer 35 significant bij tot de differentiële doorsneden.Voor b.v. J=30 ziet men dat de C-matrixelementen voor 1 interval,veel slechter zijn t.o.v. de c.c.-resultaten,vergeleken met de resultaten voor 15 intervallen.Voor de tot de differentiële doorsneden bijdragende J-waarden zijn de C-matrixelementen voor 1 interval erg slecht;vandaar dat de curve voor 1 interval ver verwijdert is van de c.c.-curve.
Voor b.v. J=10 echter,waarbij geen significante bijdrage tot de differentiële doorsnede hoort,zijn de C-matrixelementen zoals men in deze tabel ziet,voor 1 interval beter dan voor 15 intervallen.Het zou kunnen zijn dat deze kleine getallen door het van elkaar aftrekken van ongeveer even grote getallen ontstaan, zodat hier cijferverlies optreedt.

Beschouwt men de differentiële doorsneden voor 5,10,15 intervallen en de c.c.-curve in de grafieken VIII en IX ,dan blijken de c.c.-curve en de e.s.+c.s.-curve voor 15 intervallen goed overeen te komen.Bij de 104 MeV α-verstrooiing aan ^{60}Ni. blijkt de convergentie langzamer te zijn,dan bij 30 MeV proton-verstrooiing aan ^{112}Cd.Een verklaring hiervoor is op dit moment nog niet te geven.Inopin volgend,zou men verwachten dat de con-vergentie bij de α-verstrooiing sneller zou zijn,dan bij protonen.Immers,voor sterker geabsorbeerde deeltjes,b.v. α-deeltjes,zou de e.s.+c.s.-benadering volgens Inopin beter opgaan. (Zie Lit. 9).Opgemerkt dient te worden,dat de convergentie bij b.v. 34,4MeV α-deeltjes langzamer is.
Vergelijken we de rekentijd voor de c.c.-berekening($\approx$1500 sec) met die,benodigd voor de e.s.+c.s.-berekening voor 15 intervallen ($\approx$450 sec),dan komt dit neer op een reductie van de rekentijd met een factor 3.(104 MeV).

IX.3 Beschouwing omtrent enkele mogelijke ingrepen ter beperking van de rekentijd.

a Het verschuiven van het integratie-startpunt.

Vanwege het feit dat naar verhouding de meeste rekentijd in beslag wordt genomen door het uitvoeren van de complexe matrixvermenigvuldiging (blz.53),zal de rekentijd ongeveer evenredig zijn met het aantal intervallen.Het voornaamste doel,ter besparing van rekentijd zal dus zijn ,het aantal benodigde intervallen te beperken.

Voor hogere ℓ-waarden wordt de kern door de hogere centrifugaalbarrière beter afgeschermd,dan voor lage ℓ-waarden.De golffuncties zullen voor hogere ℓ-waarden in een grotere omgeving van de oorsprong ≈ 0 blijven.
Men zou verwachten,dat men voor hogere $\ell(J)$-waarden pas een eind uit de oorsprong verwijderd,met de integratie zou behoeven te beginnen.
Er blijkt nu dat men b.v. bij J=40,men het startpunt van de integratie kan opschuiven tot ≈ 4 fm,startend met de reguliere Coulombfunctie,zonder dat de C-matrixelementen noemenswaardig veranderen.(^{60}Ni.1 interval).Legt men het startpunt echter bij 5 fm,dan wijken de verkregen C-matrixelementen heel duidelijk af van die verkregen bij de integratiestart in r=0.
Voor enkele J-waarden is dit verschuiven van het integratiestartpunt uitgeprobeerd.Er geldt ruwweg: $r_{start} \approx 0{,}1\ J$ fm.

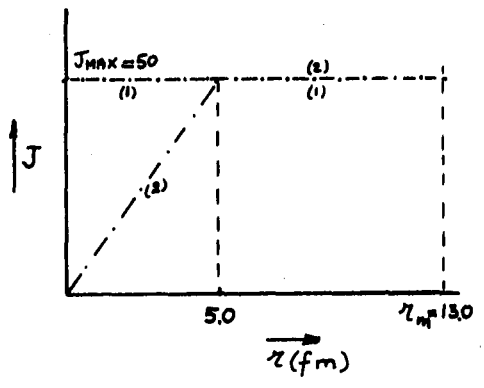


Fig.11

Indien men gebruik zou maken van dit verschuiven van het integratie-startpunt,zou men maximaal (25/130)=20% van de rekentijd kunnen besparen.(Aanname;rekentijd evenredig met J_{max} en aantal intervallen.De rekentijd is dan evenredig met het oppervlak onder de curve in fig.11)

Een gedeelte van de mogelijke besparing gaat echter weer teniet door het feit dat men in het nieuwe startpunt moet beschikken over de reguliere Coulombfunctie,bij het locale golfgetal.De mogelijke besparing is echter niet van dien aard dat men hiervoor in dit kader het programma structureel ingewikkelder zal maken.

IX.3b Het symmetriseren van de S-matrix.

Een ander aspect dat hier ter sprake komt is het feit, dat bij praktische berekeningen van S-matrices,betreffende rotationele aanslag van permanent gedeformeerde axiaalsymmetrische kernen,i.h.a. asymmetrie optrad.
Theoretisch dient de S-matrix echter symmetrisch te zijn,hetgeen met behulp van Wronski-relaties aan te tonen is.
Tom Schulte (zie Lit. 1) stelde empirisch vast dat in zijn berekeningen de ene helft van de berekende S-matrix,overeenkomende met overgangen van hoge l-waarden naar lage l-waarden betrouwbaar is,terwijl de andere helft dit i.h.a. niet is.
In het verslag van Leon Beerendonk (zie Lit. 13),blijkt aan de hand van een driekanaals-model,dat er bij de berekening van S-matrixelementen overeenkomende met overgangen van lage l-waarden naar hoge l-waarden vaak minder nauwkeurige,en soms zelfs erg afwijkende resultaten optreden.Dit blijkt het gevolg te zijn van cijferverlies.

Zou dit nu in ons geval met de (a)-symmetrie van de S-matrix ook zo gesteld zijn?Indien we ervan uitgaan dat dit inderdaad zo is,dan zouden we de C-matrixelementen (zie app.C) overeenkomende met overgangen van lage l-waarden naar hoge l-waarden,kunnen berekenen uit die voor de omgekeerde overgang. Immers deze elementen zouden dan wel betrouwbaar zijn.

Opm.Er zijn inderdaad aanwijzingen dat er ook in ons geval de S-matrix niet symmetrisch is.Het is echter niet zo,

dat er zulke grote verschillen in $S_{ll'}$ en $S_{l'l}$ optreden,als bij de rotationele aanslag van permanent gede -formeerde kernen,omdat hierbij grotere $\Delta l=|l-l'|$waarden een rol spelen.Voor ons geval geldt $\Delta l_{max}=I_{max}=4$.

Indien we deze symmetrisatie uitvoeren,dan blijkt dat de "verwisselde" C-matrixelementen over het algemeen meer lijken op de overeenkomstige c.c.-berekenings-C-matrixelementen. Toch heeft de symmetrisatie geen duidelijk zichtbaar gunstig effect op de convergentie van de differentiële doorsneden naar de c.c.-resultaten.Zie grafiek X .
Dit zou men eigenlijk ook niet verwacht mogen hebben,indien men bedenkt dat de convergentie bij de O_1^+- en O_2^+-niveaus, waarop symmetrisatie van de S-matrix geen effect heeft,(alleen diagonaalmatrixelementen in l spelen hier een rol),niet beter is dan bij de overige niveaus.

IX.4 Enkele aspecten die in de toekomst kunnen leiden tot optimalisatie van het huidige programma.

Onder optimalisatie van het programma kan men o.a. verstaan,het beperken van de rekentijd door snellere convergentie, m.a.w. door er voor te zorgen dat het aantal benodigde intervallen kleiner wordt.Ook zou men onder optimalisatie kunnen verstaan,het stroomlijnen van het programma,m.a.w.het beperken van de rekentijd bij een gegeven aantal intervallen,door efficiënter te programmeren.De hier behandelde aspecten hebben be -trekking op de eerstgenoemde interpretatie.In tegenstelling tot de in paragraaf 3 behandelde aspecten,die onderzocht zijn, zijn de hier behandelde aspecten mogelijkheden die nader onderzocht dienen te worden.

a De keuze van de opkrikmethode.
Om een geschikte opkrikmethode te kunnen kiezen,beschou-

wen we het matrixelement van $V(r;\delta)$;we ontwikkelen $V(r;\delta)$ naar δ volgens;

$$V(r;\delta) = v_0(r) + v_1(r)\,\delta + v_2(r)\,\delta^2 + \ldots\ldots$$

Met $V(r;\delta)=V(r-\delta)$ wordt dit;

$$V(r;\delta) = V(r) - \frac{\partial V}{\partial r}\Big|_{\delta=0}\cdot\delta - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial r^2}\Big|_{\delta=0}\cdot\delta^2 + \ldots\ldots$$

Het matrixelement van $V(r;\delta)$ kan dan als volgt geschreven worden;

$$V_{cc'}(r) = v_0(r)\,\delta_{cc'} - \frac{\partial V}{\partial r}\Big|_{\delta=0} \langle c|\delta|c'\rangle - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial r^2}\Big|_{\delta=0} \langle c|\delta^2|c'\rangle + \ldots$$

De matrixelementen van de 1-fonon-processen zijn evenredig met de eerste afgeleide van V.De directe 2-fonon-processen corresponderen met de tweede afgeleide van V.

Uit de Saxon-Woods-vorm voor V volgt dat $V_{cc'}$ en dus $\omega_{cc'}$ geconcentreerd is rond het kernoppervlak.
Uit de formules ($\underline{V}$ .12) voor de afgeleiden van de coëfficiënten a_c en b_c,zien we dat men de afgeleiden van deze coëfficienten vindt door het wegen van $\omega_{cc'}(r)$ met o.a. $R_{c'}(r)$.
Vanwege de hogere centrifugaalpotentiaalbarrière voor hogere ℓ-waarden,beginnen de functies $R_{c'}(r)$ steeds verder uit de oor-sprong van nul uit,steiler aan te groeien,zodat verwacht mag worden dat de bijdragen tot a_c en b_c in hoofdzaak komen uit een radieel gebied,dat vanaf het kernoppervlak naar buiten verschuift,naarmate $\ell_{c'}$ groter is.In paragraaf $\underline{V}$.3 hebben we gezien dat opkrikken voordeliger is in het beginpunt,indien $|\omega_{cc'}|$ ter plaatse stijgt voor toenemende r,en in het eindpunt indien $|\omega_{cc'}|$ ter plaatse daalt.Doordat meerdere gevouwen $\omega_{cc'}$'s bijdragen tot b.v. a_c is het niet eenvoudig te zeggen welke opkrikmethode betere resultaten zal geven.Vanwege het verschuiven van de met $R_{c'}$ gewogen $\omega_{cc'}$ met toenemende $\ell(J)$,kan het best zijn dat men de intervalverdeling en opkrikprocedure aan moet passen aan de J-waarde.Dit zal gewoon nader onderzocht dienen te worden.

b De keuze van $\bar{\ell}$.

Door de keuze van $\bar{\ell} = \ell_{aanzet}$ (in combinatie met $\bar{\varepsilon} = \varepsilon_{aanzet}$) werd in ons geval het opkrikken triviaal. Het is echter geenszins zeker, dat $\bar{\ell} = \ell_{aanzet}$ de beste resultaten zal geven.
In formule V.17 ziet men dat de afwijking in de vierde afgeleide van de opgekrikte functie t.o.v. de exacte functie gegeven wordt door:

$$\tilde{R}^{(4)}(r_0) - R^{(4)}(r_0) = \sum_{c' \neq c} \left\{ 4\,\bar{\omega}_{c'c'}(r_0) - \omega_{c'c'}(r_0) - 3\,\omega_{cc}(r_0) \right\} R_{c'}(r_0)$$

Beschouwen we het $\bar{\ell}, \ell_{c'}, \ell_c$-afhankelijke gedeelte van de uitdrukking $(4\bar{\omega}_{c'c'}(r_0) - \omega_{c'c'}(r_0) - 3\omega_{cc}(r_0))$ dan komen we tot de volgende vorm;

$$\left[-4\bar{\ell}(\bar{\ell}+1) + \ell_c(\ell_c+1) + 3\ell_c(\ell_c+1) \right] / r_0^2 .$$

Deze uitdrukking wordt nul voor:

$$\bar{\ell} = \left[-1 + \sqrt{1 + 3\ell_c^2 + 3\ell_c + \ell_{c'}^2 + \ell_{c'}} \right] / 2$$

De keuze van $\bar{\ell}$ is alleen dan zo gunstig mogelijk, uitgedrukt in ℓ_c en $\ell_{c'}$, als bij benadering voldaan is aan bovenstaande laatstgenoemde gelijkheid. Hieruit blijkt dat $\bar{\ell} = \ell_c$ niet de geschiktste keuze voor $\bar{\ell}$ hoeft te zijn.

B.v. $\left.\begin{matrix} \ell_c = 2 \\ \ell_{c'} = 0 \end{matrix}\right\} \longrightarrow \bar{\ell} \approx 2 = \ell_c$ $\qquad$ $\left.\begin{matrix} \ell_c = 8 \\ \ell_d = 4 \end{matrix}\right\} \longrightarrow \bar{\ell} \approx 7$

$\left.\begin{matrix} \ell_c = 0 \\ \ell_c = 2 \end{matrix}\right\} \longrightarrow \bar{\ell} \approx 1 = (\ell_c + \ell_{c'})/2$ $\qquad$ $\left.\begin{matrix} \ell_c = 4 \\ \ell_{c'} = 8 \end{matrix}\right\} \longrightarrow \bar{\ell} \approx 5$

Hieruit blijkt dat ook de keuze van $\bar{\ell}$ nog nader onderzocht dient te worden. (Lineaire interpolatie)

C-matrixelementen voor enkele J-waarden,voor enkele waarden van het aantal intervallen in de e.s.+c.s.-benadering,en voor de c.c.-berekening.

J=10.

1 interval.

(0,00465 , 0,50002) (0,00189 , 0,00125) (0,00042 ,-0,00155) (-0,00175 ,-0,00004)
(-0,00098 ,-0,00021) (0,00058 ,-0,00056) (-0,00059 ,-0,00014) (0,00024 , 0,00071)
(0,00033 , 0,00100) (0,00050 ,-0,00058) (-0,00069 ,-0,00010) (0,00027 , 0,00065)
(0,00062 ,-0,00067)

15 intervallen.

(0,00414 , 0,50026) (-0,00099 , 0,00043) (0,00043 ,-0,00201) (-0,00367 , 0,00164)
(-0,00123 ,-0,00012) (0,00070 ,-0,00021) (-0,00040 , 0,00001) (0,00055 , 0,00131)
(-0,00113 , 0,00080) (0,00056 ,-0,00022) (-0,00095 ,-0,00006) (0,00052 , 0,00108)
(0,00114 ,-0,00102)

C.C.

(0,00456 , 0,49937) (0,00158 , 0,00168) (0,00017 ,-0,00245) (-0,00200 , 0,00072)
(-0,00116 ,-0,00074) (0,00109 ,-0,00051) (-0,00027 ,-0,00032) (0,00103 , 0,00111)
(-0,00005 , 0,00084) (0,00088 ,-0,00052) (-0,00100 ,-0,00042) (0,00018 , 0,00091)
(0,00072 ,-0,00063)

J=20.

1 interval.

(-0,00219 , 0,49853) (-0,00458 , -0,00100) (-0,00249 , -0,00105) (-0,00076 , 0,00090)
(-0,00116 , 0,00557) (-0,00313 , -0,00282) (0,00114 , 0,00781) (0,00024 , 0,00261)
(0,00839 , -0,01509) (-0,00152 , -0,00245) (-0,00150 , 0,00011) (-0,00003 , 0,00181)
(0,00081 , -0,00082)

15 intervallen.

(-0,00123 , 0,49424) (0,00030 , -0,00329) (-0,00447 , 0,00051) (0,00037 , 0,00105)
(0,00027 , 0,00124) (-0,00143 , -0,00087) (-0,00037 , -0,00135) (0,00030 , 0,00003)
(0,00050 , -0,00126) (-0,00125 , -0,00053) (-0,00003 , 0,00199) (0,00014 , -0,00015)
(-0,00162 , 0,00110)

C.C.

(-0,00110 , 0,49399) (0,00158 , -0,00144) (-0,00475 , 0,00028) (-0,00084 , 0,00086)
(0,00005 , 0,00110) (-0,00035 , -0,00114) (0,00011 , -0,00175) (0,00051 , 0,00028)
(0,00079 , -0,00013) (-0,00035 , -0,00075) (-0,00009 , 0,00208) (0,00032 , 0,00028)
(-0,00022 , 0,00018)

J=30.

1 interval.

(0,41829 , -0,23752) (0,44967 , 0,12555) (0,28032 , 0,12238) (-0,50039 , -0,52414)
(0,09577 , -0,13004) (-0,00296 , 0,08895) (0,14642 , -0,27156) (0,10377 , -0,16013)
(0,01710 , 0,15880) (-0,01548 , 0,07520) (0,01094 , 0,32434) (0,08709 , -0,15436)
(0,35656 , 0,21170)

15 intervallen.

(0,17218 , 0,17019) (-0,01255 , -0,01328) (-0,01576 , -0,03449) (-0,00108 , -0,05795)
(-0,00027 , 0,00756) (0,00056 , 0,00226) (0,00092 , 0,00352) (-0,00765 , 0,00499)
(-0,00018 , 0,00028) (0,00043 , 0,00181) (-0,00079 , 0,00484) (-0,00643 , 0,00401)
(-0,00840 , -0,00682)

C.C.

(0,16938 , 0,16962) (-0,01750 , -0,02121) (-0,01422 , -0,03570) (0,00040 , 0,04861)
(-0,00156 , 0,00800) (0,00057 , 0,00377) (-0,00007 , 0,00386) (0,00657 , 0,00364)
(0,00063 , 0,00161) (0,00046 , 0,00312) (-0,00146 , 0,00508) (0,00556 , 0,00295)
(-0,00481 , -0,00456)

Parameters die in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-berekeningen gebruikt zijn:

^{112}Cd.(p,p'):

R_0=1,20 fm. R_i=1,25 fm. R_C=1,25 fm.
a_0=0,70 fm. a_i=0,70 fm.
V_0=56,00 MeV. W_V=0 MeV. (Voor potentiaalparameters,zie Lit.15)
W_D=9,50 MeV.

h=0,1 fm. δ=0,1 fm. β=0,2 r_m=13,00 fm.
E_{lab}=30 MeV. $l_{max}=J_{max}$=19.
ε_1=0 ε_2=0,62 MeV. ε_3=1,22 MeV. ε_4=1,31 MeV.
ε_5=1,41 MeV.

Equidistante intervalscheidingspunten.

^{60}Ni.(α,α'):

R_0=1,34 fm. R_i=1,55 fm. R_C=1,25 fm.
a_0=0,70 fm. a_i=0,62 fm.
V_0=109,40 MeV. W_V=22,20 MeV. (Voor potentiaalparameters,zie Lit.16)
W_D=0 MeV.

h=0,1 fm. δ=0,20 fm. β=0,168 r_m=13,00 fm.
E_{lab}=104 MeV. $l_{max}=J_{max}$=50.
ε_1=0 ε_2=1,33 MeV. ε_3=2,16 MeV. ε_4=2,29 MeV.
ε_5=2,50 MeV.

Equidistante intervalscheidingspunten bij 2,5,10 intervallen.
Bij 15 intervallen,nagenoeg equidistant:
0-9-18-27-36-45-53-61-69-77-85-94-103-112-121-130.

X. CONCLUSIES.

In hoofdstuk IX hebben we gezien dat de te sandwichen radiële golffuncties $R_{\ell,\varepsilon}(r;\delta)$ gladder verlopen als functie van δ, naarmate men het radiële gebied $0 < r \leq r_m$ in kleinere intervallen verdeelt. Dit resultaat is een noodzakelijke voor-waarde voor het toepasbaar zijn van een intervalsgewijze aanpak bij realistische waarden van de deformatieparameter β. Ook de correcties op de e.s.+c.s.-benadering in onze intervalsgewijze aanpak, worden beter bij kleinere intervallengte omdat in de Taylorreeksontwikkeling voor het gecorrigeerde resultaat de eerste termen overeenkomen met die van het c.c.-resultaat.

De op grond hiervan verwachte convergentie wordt bevestigd in onze berekeningen. De resultaten voor de differentiële werkzame doorsneden in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering convergeren naar de c.c.-resultaten voor een toenemend aantal intervallen. Voor protonverstrooiing (^{112}Cd., 30MeV) blijkt de convergentie sneller, dan voor α-verstrooiing (^{60}Ni., 104MeV), in tegenstelling tot de voorspelling die Inopin geeft. (Lit. 9)

De rekentijd, die ongeveer evenredig is met het aantal intervallen, blijkt vergeleken met de c.c.-rekentijd met ongeveer een factor 3 à 4 gereduceerd te worden.

Beschouwt men een c.c.-berekening met ongeveer dezelfde rekentijd als de geconvergeerde intervalsgewijze e.s.+c.s.-berekening, door de stapgrootte groter te maken (0,1 fm ⟶ 0,4 fm), dan blijken de verkregen resultaten heel sterk af te wijken van de resultaten bij de kleine stapgrootte; zie grafiek XI.
Het is dus niet zo, dat men met een c.c.-berekening met ongeveer dezelfde rekentijd als de intervalsgewijze e.s.+c.s.-berekening, resultaten verkrijgt die gelijkwaardig zijn met de resultaten van de intervalsgewijze e.s.+c.s.-berekening.

Er dient te worden opgemerkt, dat het huidige intervalsgewijze e.s.+c.s.-programma nog op geen enkele wijze geoptima-

liseerd is,zodat de genoemde reductiefactor nog zeker niet definitief is en voorlopig gezien moet worden als een ondergrens.

Een aantal factoren die van belang kunnen zijn bij optimalisatie van de methode en het programma verdienen vermelding. Een kleine vermindering van de intervalsgewijze e.s.+c.s.-reken-tijd kan verkregen worden door het integratie-startpunt te ver-schuiven voor hogere J-waarden (≈20%).

Meer besparing van rekentijd is te verwachten van vergroting van de intervallen (snellere convergentie).

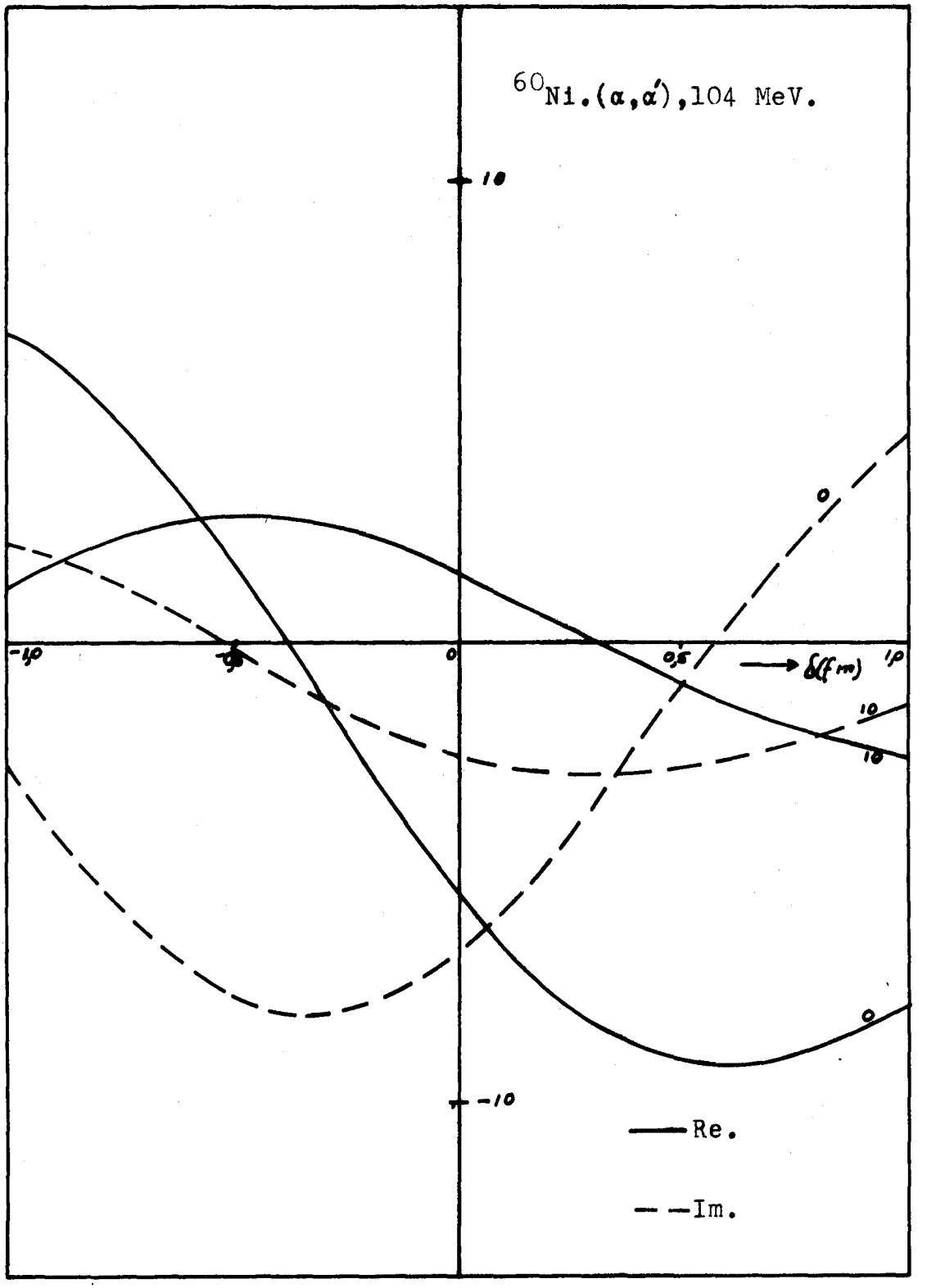
Het symmetriseren van de berekende asymmetrische S-matrix,(de symmetrie van de S-matrix volgt uit gegeneraliseerde Wronski-relaties),heeft geen duidelijk effect op de convergentie van de intervalsgewijze e.s.+c.s.-resultaten naar de c.c.-resultaten.

Meer wordt verwacht van het toepassen van gegeneraliseerde Wronskirelaties,die gelden voor de componenten van de oplossingsvector in elk van de afzonderlijke intervallen.

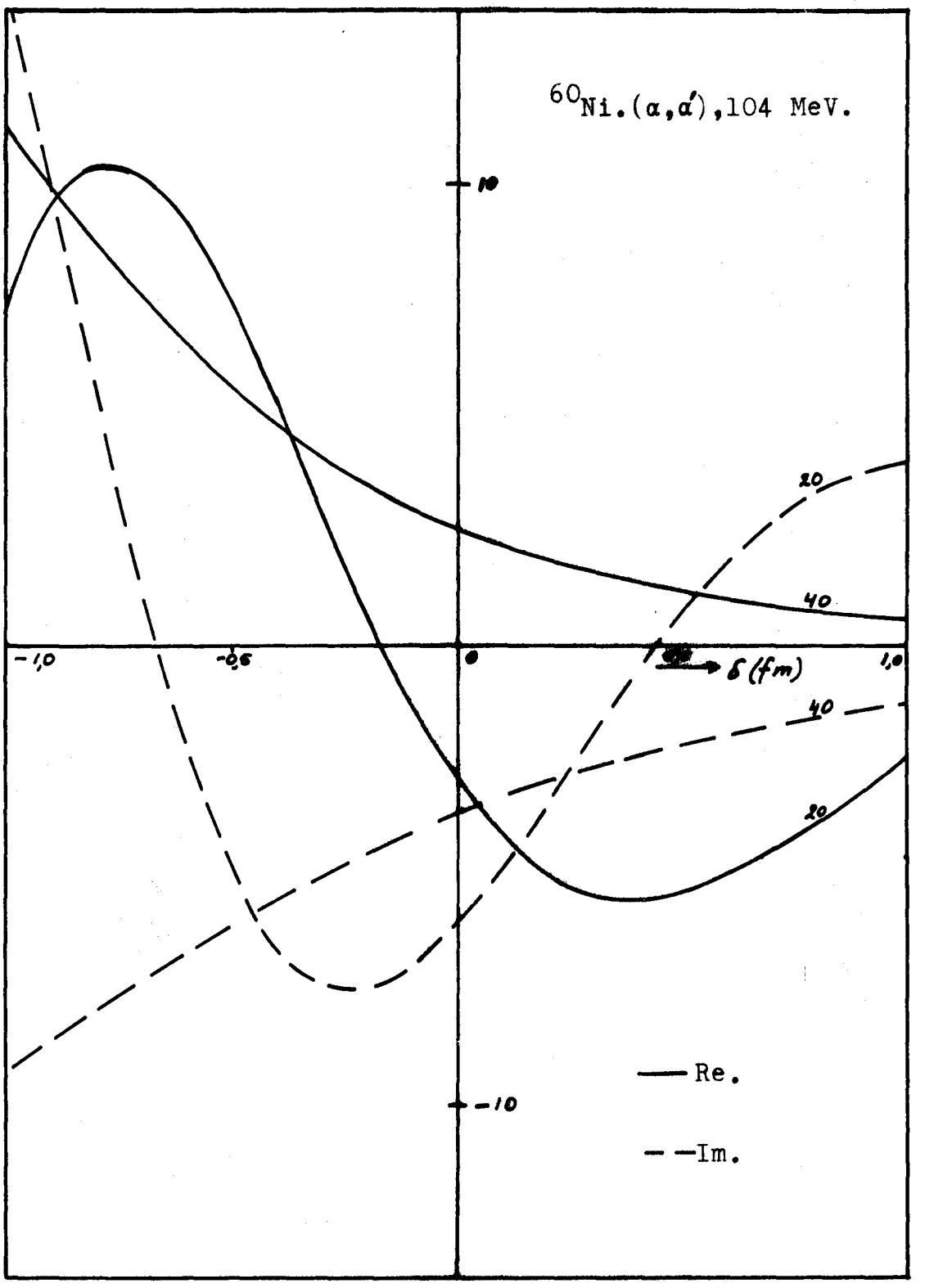
Verder lijkt het mogelijk snellere convergentie te verkrijgen door te keuze van $\bar{\ell}$ en de opkrikprocedure te optimaliseren.

Bij de keuze van $\bar{\ell}$ kan men gebruik maken van de laagste orde benadering voor de afwijking tussen onze intervalsgewijze e.s.+c.s.-resultaten en de c.c.-resultaten.

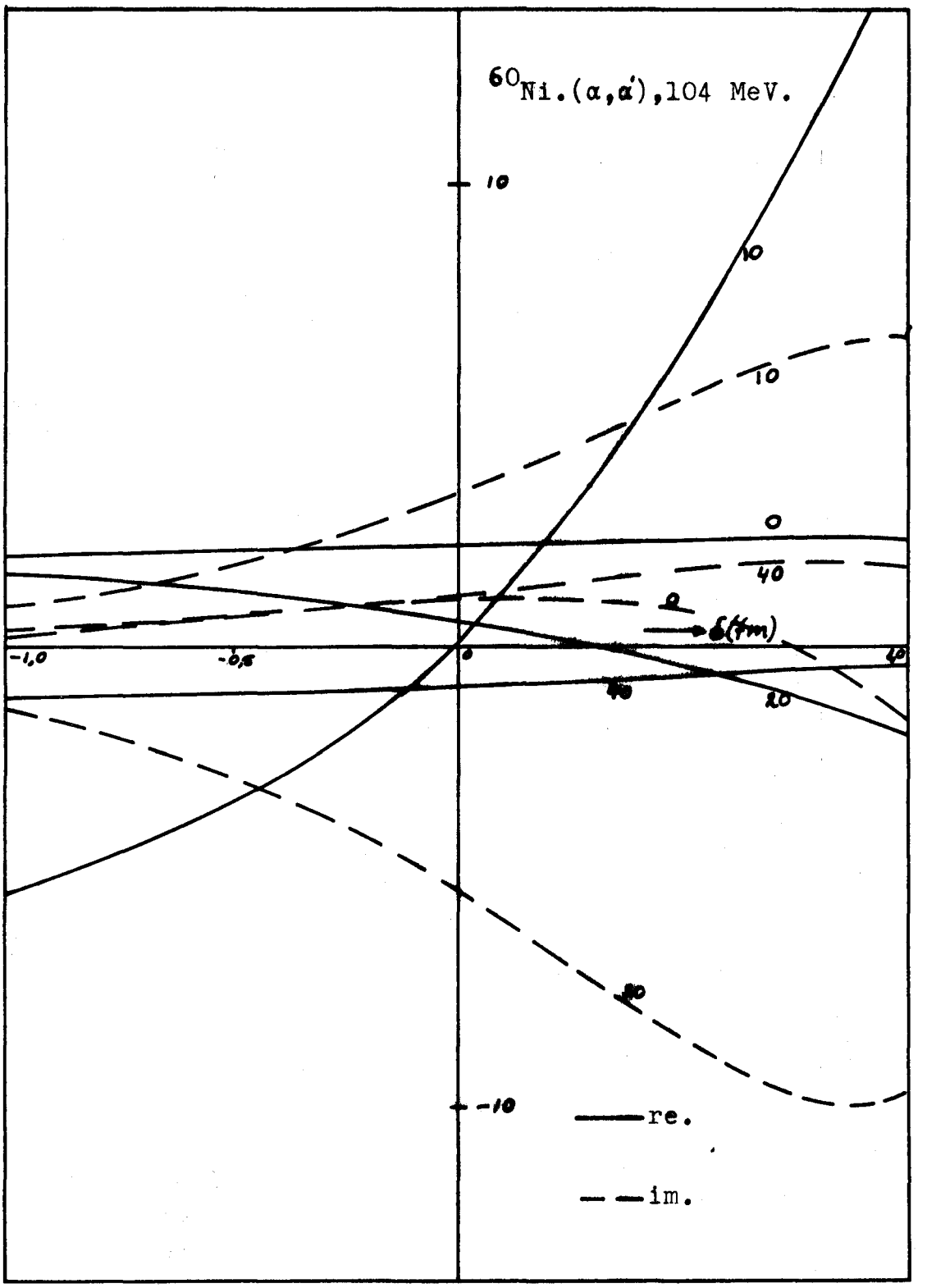
XI. GRAFIEKEN.



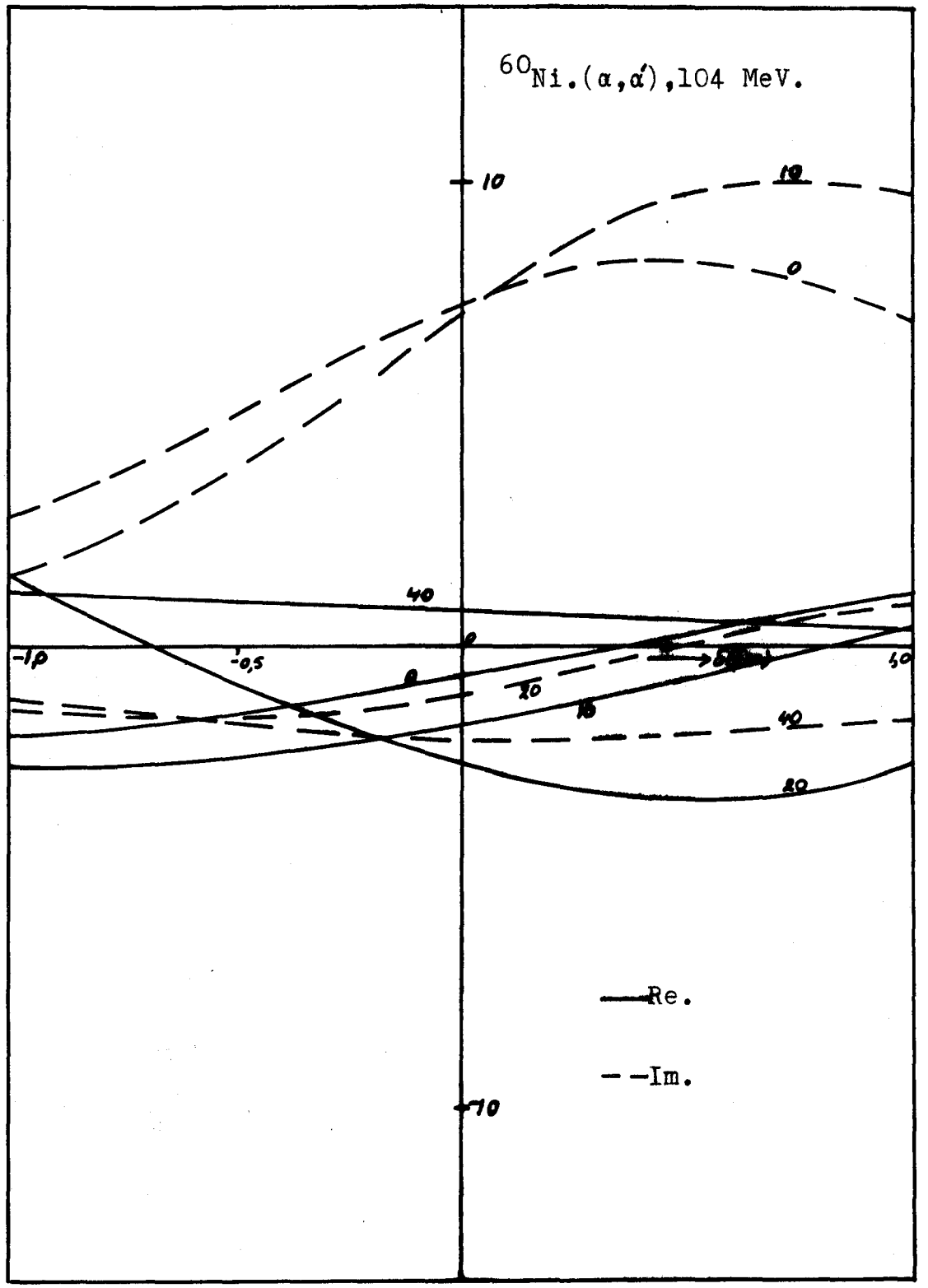
Grafiek Ia. Radiële golffuncties $R_{\ell,\bar{\ell}}(r_1;\delta)$ als functie van de verschuiving δ. (parameter ℓ)
2 intervallen: $r_0=0, r_1=6{,}5$ fm .



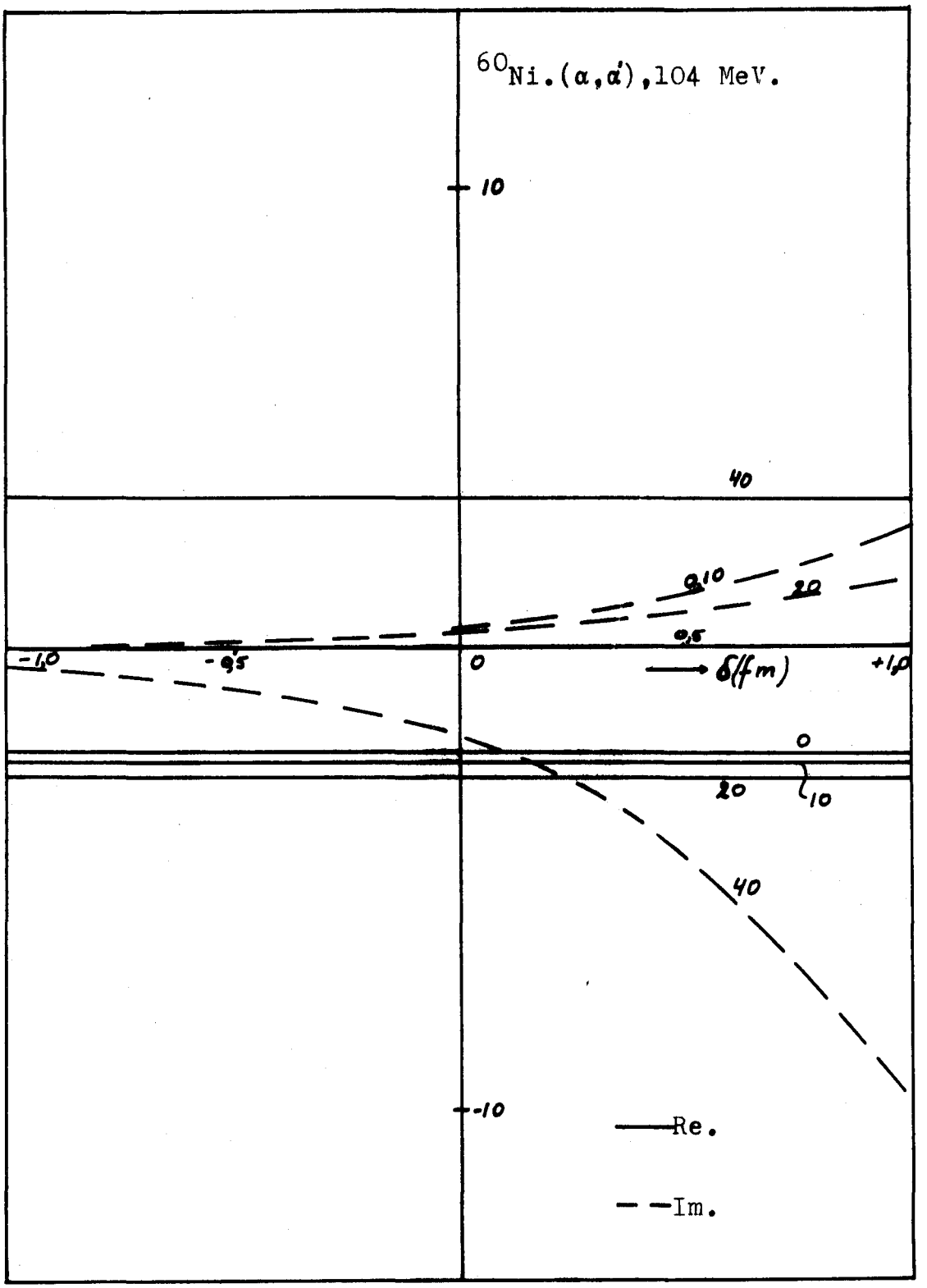
Grafiek Ib. Radiële golffuncties $R_{\ell,j}(r_1;\delta)$ als functie van de verschuiving δ. (parameter ℓ)
2 intervallen: $r_0=0, r_1=6,5$ fm.



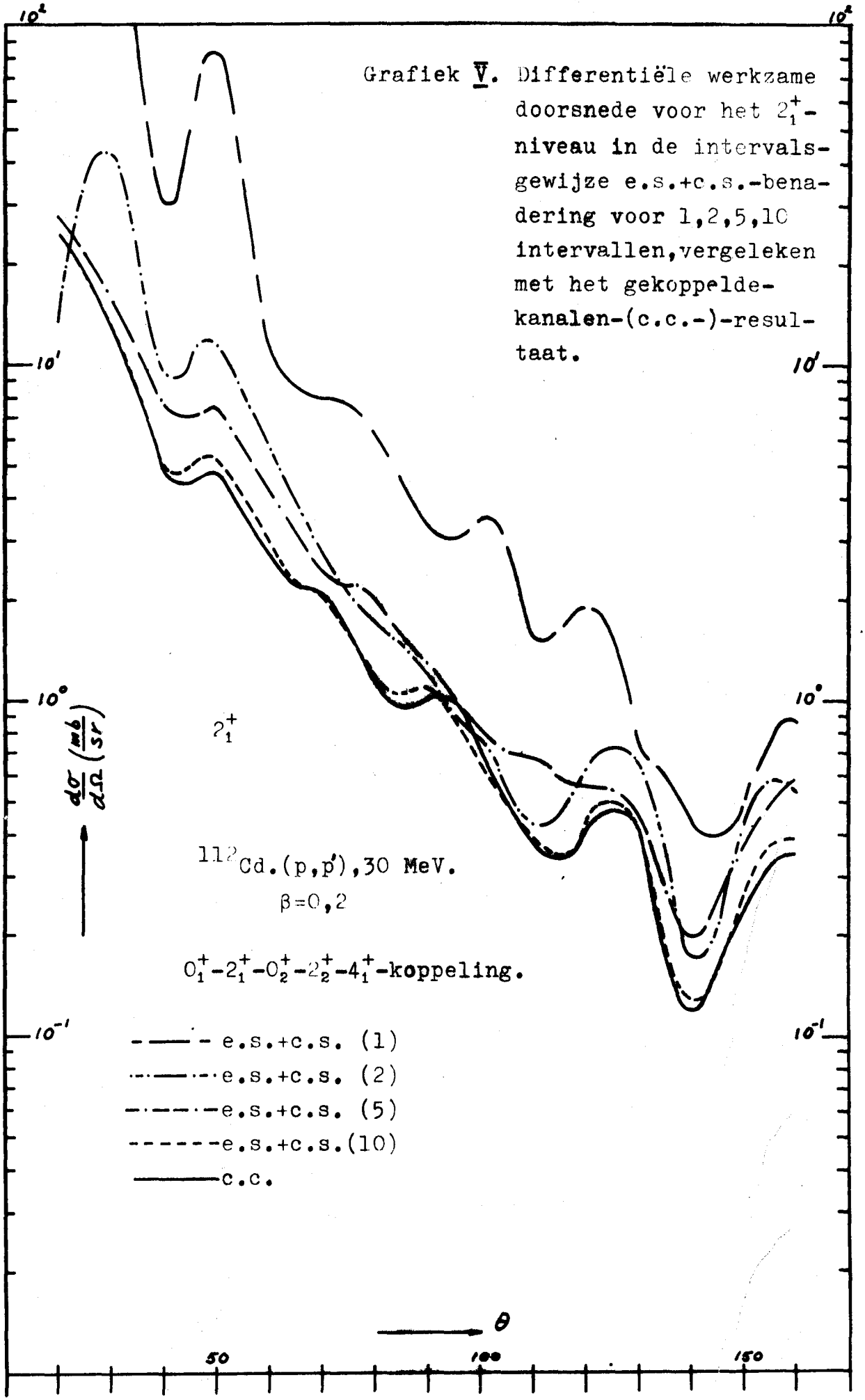
Grafiek II. Radiële golffuncties $R_{\ell\varepsilon}(r_1;\delta)$ als functie van de verschuiving δ (parameter ℓ)
2 intervallen: r_0=6,5 fm., r_1=13,00 fm.

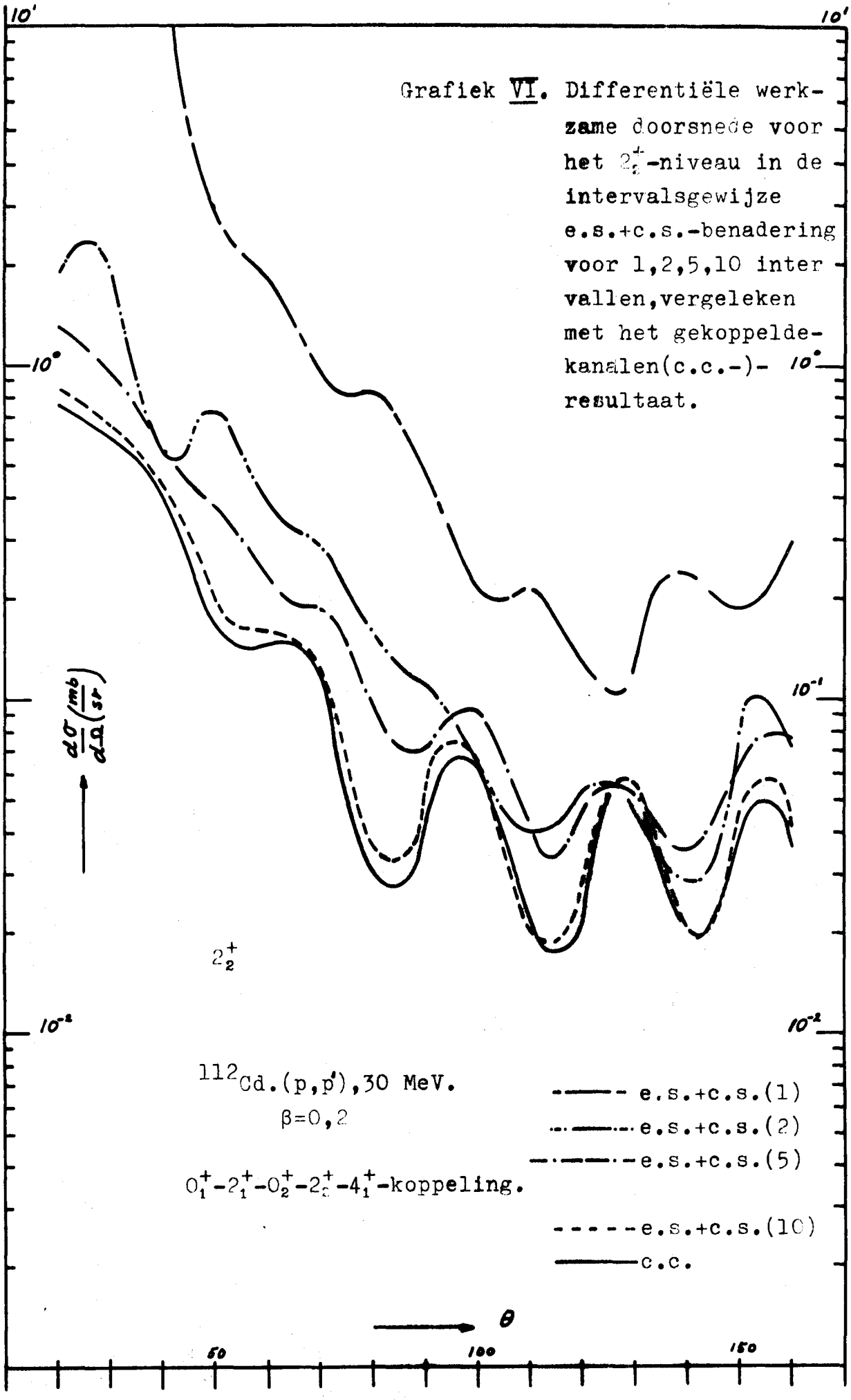


Grafiek III. Radiele golffuncties $R_{\ell}(r_1;\delta)$ als functie van de verschuiving δ. (ℓ parameter)
10 intervallen: r_0=5,2 fm., r_1=6,5 fm.

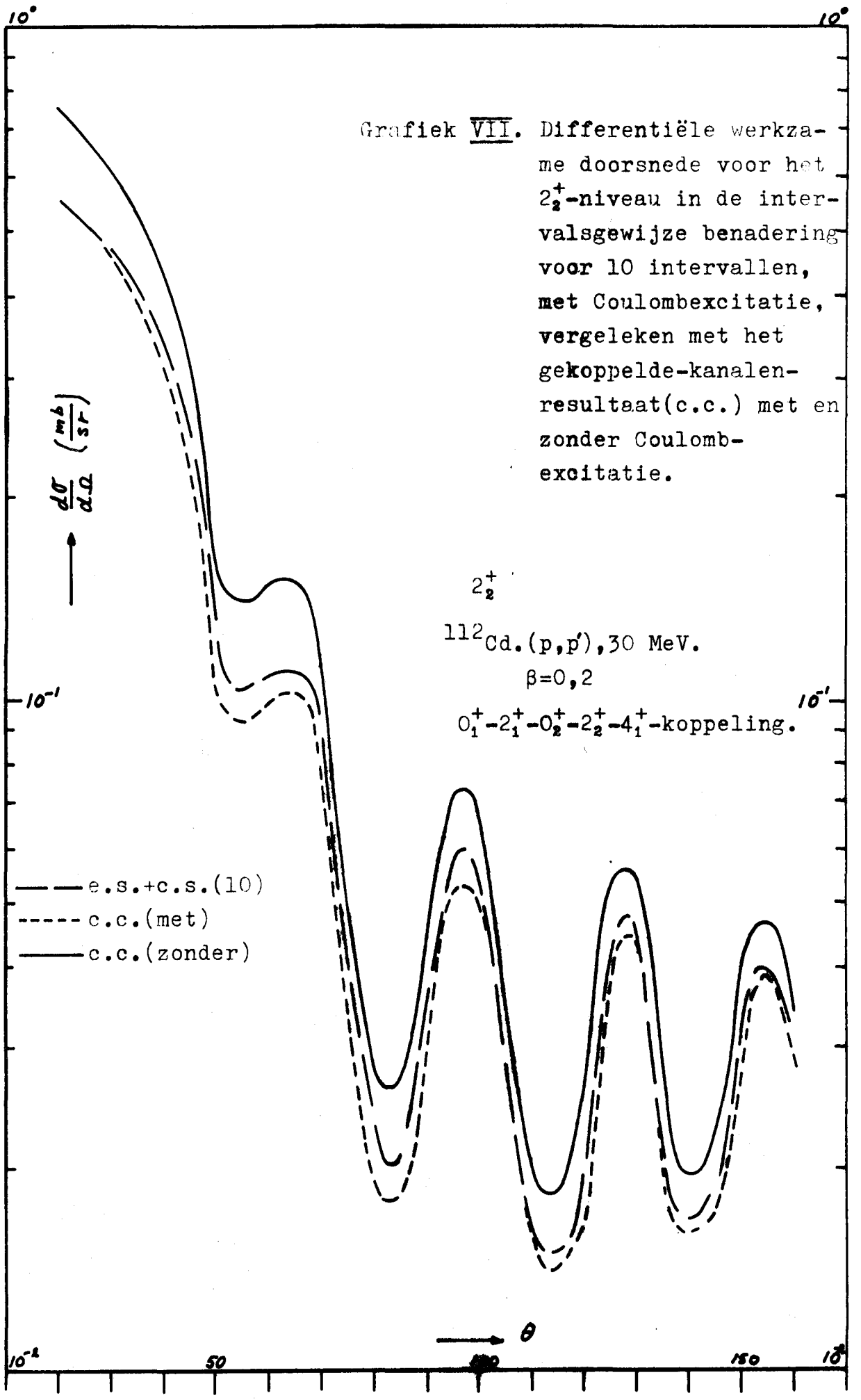


Grafiek IV. Radiële golffuncties $R_{\tau,\bar{\tau}}(r_1;\delta)$ als functie van de verschuiving δ.(τ,$\bar{\tau}$ parameter ℓ)
10 intervallen: r_0=11,7 fm., r_1=13,00 fm.

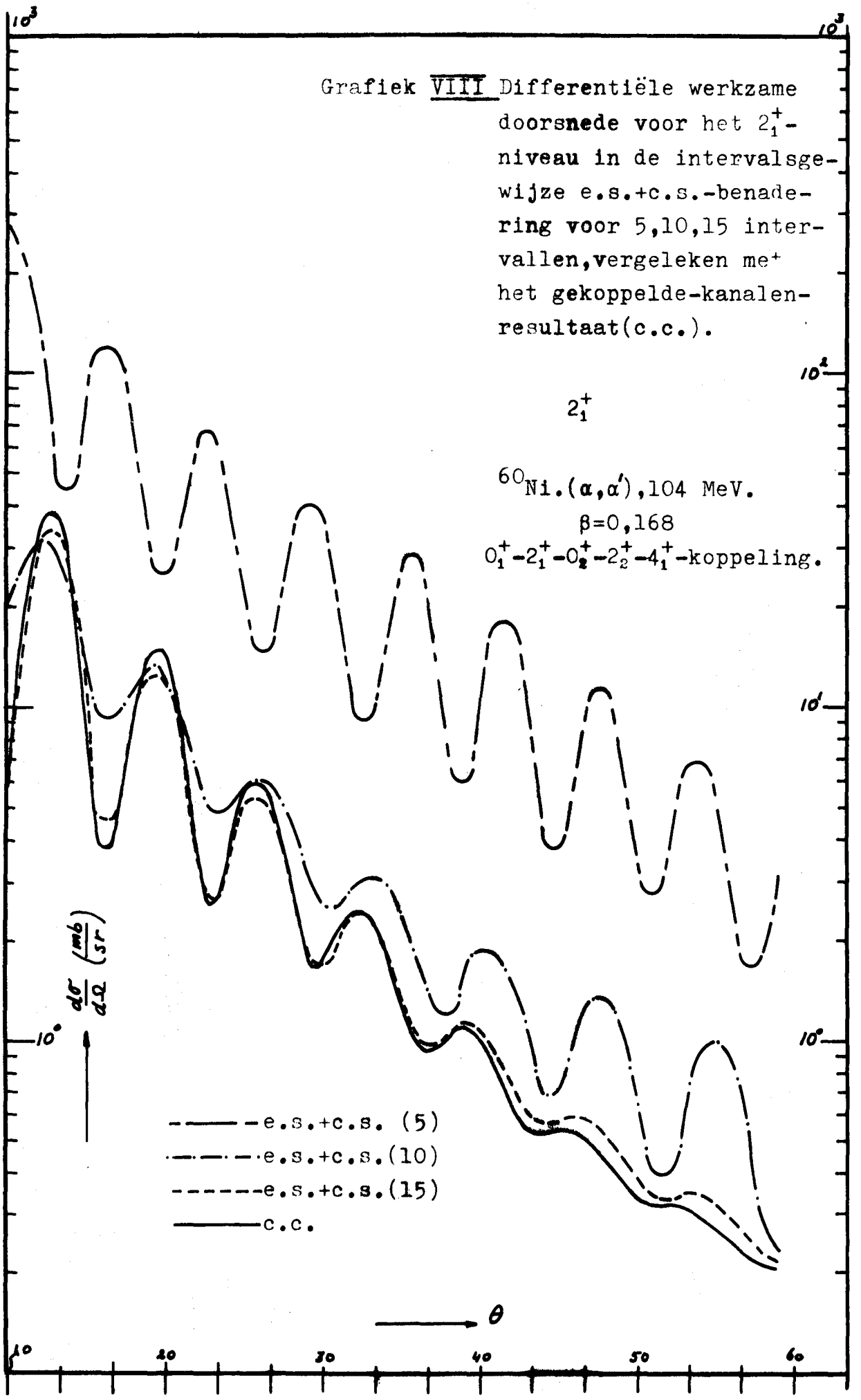

Grafiek V. Differentiële werkzame doorsnede voor het 2_1^+-niveau in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering voor 1,2,5,10 intervallen, vergeleken met het gekoppelde-kanalen-(c.c.-)-resultaat.
10^2
10^1
10^0
10^{-1}
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ (mb/sr)
2_1^+
^{112}Cd.(p,p'),30 MeV.
β=0,2
$0_1^+-2_1^+-0_2^+-2_2^+-4_1^+$-koppeling.
e.s.+c.s. (1)
e.s.+c.s. (2)
e.s.+c.s. (5)
e.s.+c.s.(10)
c.c.
θ
50
100
150

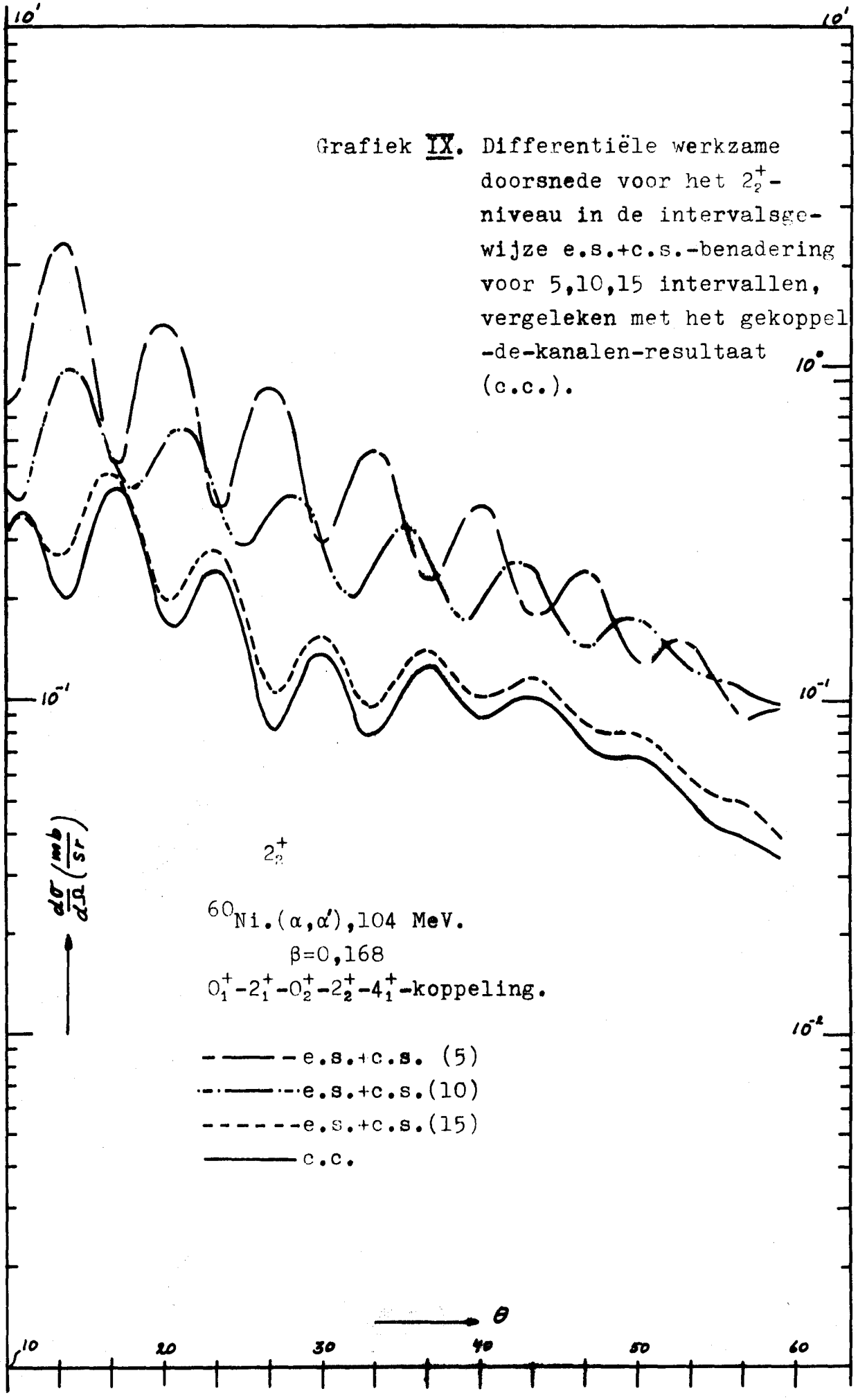


Grafiek VI. Differentiële werkzame doorsnede voor het 2_2^+-niveau in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering voor 1,2,5,10 intervallen, vergeleken met het gekoppelde-kanalen(c.c.-)-resultaat.

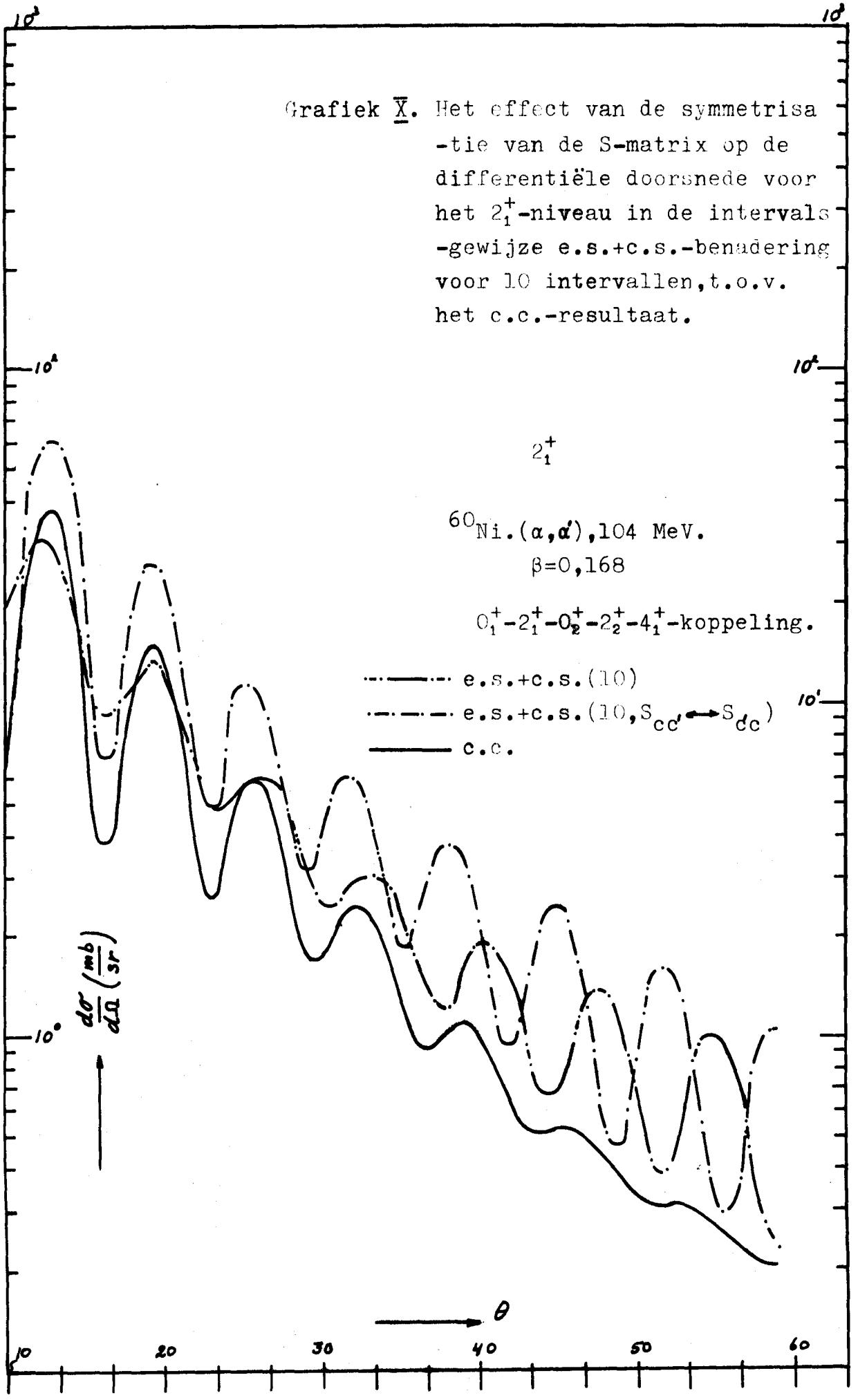


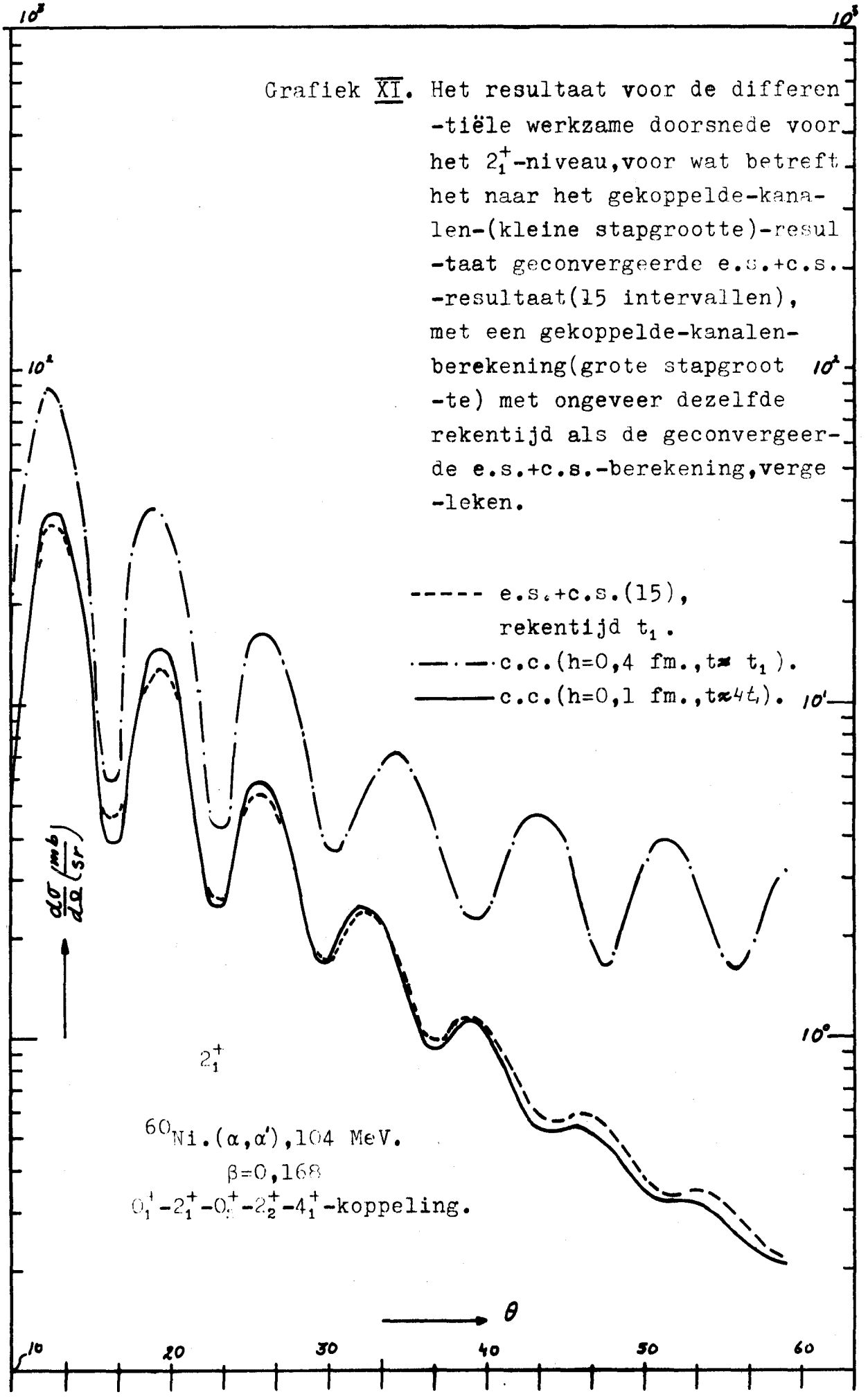
Grafiek VII. Differentiële werkzame doorsnede voor het 2_2^+-niveau in de intervalsgewijze benadering voor 10 intervallen, met Coulombexcitatie, vergeleken met het gekoppelde-kanalen-resultaat(c.c.) met en zonder Coulomb-excitatie.


Grafiek VIII Differentiële werkzame doorsnede voor het 2_1^+-niveau in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering voor 5,10,15 intervallen, vergeleken met het gekoppelde-kanalen-resultaat(c.c.).
2_1^+
^{60}Ni.(α,α'),104 MeV.
β=0,168
$0_1^+-2_1^+-0_2^+-2_2^+-4_1^+$-koppeling.
10^3
10^2
10^1
10^0
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ $(\frac{mb}{sr})$
e.s.+c.s. (5)
e.s.+c.s.(10)
e.s.+c.s.(15)
c.c.
θ
10
20
30
40
50
60


Grafiek IX. Differentiële werkzame doorsnede voor het 2_2^+-niveau in de intervalsgewijze e.s.+c.s.-benadering voor 5,10,15 intervallen, vergeleken met het gekoppel-de-kanalen-resultaat (c.c.).
10^1
10^0
10^{-1}
10^{-2}
$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{mb}{sr}\right)$
2_2^+
^{60}Ni.(α,α'),104 MeV.
β=0,168
$0_1^+-2_1^+-0_2^+-2_2^+-4_1^+$-koppeling.
e.s.+c.s. (5)
e.s.+c.s.(10)
e.s.+c.s.(15)
c.c.
θ
10
20
30
40
50
60

Grafiek X. Het effect van de symmetrisa-tie van de S-matrix op de differentiële doorsnede voor het 2_1^+-niveau in de intervals-gewijze e.s.+c.s.-benadering voor 10 intervallen, t.o.v. het c.c.-resultaat.




Grafiek XI. Het resultaat voor de differen -tiële werkzame doorsnede voor het 2_1^+-niveau,voor wat betreft het naar het gekoppelde-kanalen-(kleine stapgrootte)-resul -taat geconvergeerde e.s.+c.s. -resultaat(15 intervallen), met een gekoppelde-kanalen-berekening(grote stapgroot -te) met ongeveer dezelfde rekentijd als de geconvergeer-de e.s.+c.s.-berekening,verge -leken.
----- e.s.+c.s.(15), rekentijd t_1.
·—·—·c.c.(h=0,4 fm.,t≈ t_1).
——— c.c.(h=0,1 fm.,t≈4t_1).
10^3
10^2
10^1
10^0
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ (mb/sr)
2_1^+
^{60}Ni.(α,α'),104 MeV.
β=0,168
$0_1^+-2_1^+-0_2^+-2_2^+-4_1^+$-koppeling.
θ
10
20
30
40
50
60

XII LITERATUURLIJST.

1 Schulte,A.M.
Proefschrift,mei 1978.

2 Eisenberg,J.M. and Greiner,W.
Nuclear theory,vol.1,Nuclear models.
North-Holland Publ. Comp.,Amsterdam,1970.

3 Verhaar,B.J.
Theoretische natuurkunde IV. (Collegedictaat THE)

4 Morse,P.M. and Feshbach,H.
Methods of theoretical physics.
McGraw-Hill Book Company,New York,1953.

5 Glendenning,N.K.
Proceedings of the International School of Physics
"Enrico Fermi".
Academic Press,New York,1967.

6 Hodgson,P.E.
Nuclear reactions and nuclear structure.
Oxford Univ. Press,London,1971.

7 -Brink,D.M. and Satchler,G.R.
Angular momentum.
Oxford Univ. Press,Oxford,1962.
-Tinkham,M.
Group theory and quantum mechanics.
McGraw-Hill Book Company,New York,1964.

8 Grechukhin,D.P.
Nucl. Phys. 24(1961)576

9 Inopin,E.V.
JETP 23(1966)1061.

10 -Inopin,E.V.
JETP 21(1965)1090.
-Inopin,E.V.,Kreshnin,A.A.
JETP 22(1966)1228,1247.
-Inopin,E.V.,Shebeko,A.V.
JETP 24(1967)1189.
-McGuire,P. and Kouri,D.J.
J.Chem.Phys. 60(1974)2488.
-Lukyanov,V.K.,Semenov,V.M.,Tseipek,Ya.
Sov.J.Nucl.Phys. 19(1974)295.
-Secrest,D.
J.Chem.Phys. 62(1975)710.

11 Tamura,T.
Rev.Mod.Phys. 37(1965)679.

12 Tamura,T.
Oak Ridge National Laboratory report ORNL-4152 (1967).

13 Beerendonk,L.H.J.
Afstudeerverslag,vakgroep Deeltjesfysica,jan. 1979.

14 -Carpay.
Stageverslag,vakgroep Theoretische Natuurkunde,1967.
-Buck,B.,Maddison,R.N.,Hodgson,P.E.
Phil.Mag. (1960)1181.

15 Stelson,P.H.,Ford,J.L.C.,Robinson,R.L.,Wong,C.Y.,
Tamura,T.
Nucl.Phys. A119(1968)14.

16 Rebel,H.,Löhken,R.,Schweimer,G.W.,Schatz,G.,Hauser,G.
Z.Phsyk 256(1972)258.

17 Rotenberg,M.,Metropolis,N.,Bivins,R.,Wooten,J.K.
The 3j- and 6j-symbols.
The Technology Press Massachusetts Institute of Technology.

18 Messiah,A.
Quantum Mechanics,vol.1.
North-Holland Publ. Comp. Amsterdam,1961.

XIII. APPENDICES.

A. Beknopte afleiding van formule IV.10.

De tweede-graads-polynoomontwikkeling voor $R_{\bar{\ell},\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ luidt (zie form. IV.6.),

$$R_{\bar{\ell},\bar{\varepsilon}}(r;\delta) = c_0(r) + c_1(r).\delta + c_2(r).\delta^2$$
$$= c_0(r) + c_1(r) R_0 \sum_{\mu} \alpha^*_{2\mu} Y_{2\mu}(\theta,\phi) + c_2(r) R_0^2 \sum_{\mu\nu} \alpha^*_{2\mu}\alpha^*_{2\nu} Y_{2\mu}(\theta,\phi) Y_{2\nu}(\theta,\phi) \qquad (1)$$
$$= c_0(r) + c_1(r) R_0 \sum_{\mu} \alpha^*_{2\mu} Y_{2\mu}(\theta,\phi) +$$
$$c_2(r) R_0^2 \sum_{\mu\nu\sigma\tau} \alpha^*_{2\mu}\alpha^*_{2\nu} \frac{5}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & \sigma \\ \mu & \nu & -\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & \sigma \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} (-1)^{\tau} \sqrt{2\sigma+1}\, Y_{\sigma\tau}(\theta,\phi)$$

Hierin is het symbool $\begin{pmatrix} 2 & 2 & \sigma \\ \mu & \nu & \tau \end{pmatrix}$ een voorbeeld van een Wigner-3j-symbool, dat i.h.a. een rol speelt bij het samenstellen van twee impulsmomentvectoren, en slechts in fase en normering verschilt met de zgn. Clebsch-Gordan-coëfficiënt;

$$(j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) = (-1)^{j_1 - j_2 + M} \cdot (2J+1)^{1/2} \cdot \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix}$$

(Zie Lit.17)
Het 3j-symbool $\begin{pmatrix} 2 & 2 & \sigma \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ is ongelijk nul voor $\sigma = 0,2,4$.
Indien we $R_{\bar{\ell},\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ schrijven als een multipoolontwikkeling volgens;

$$R_{\bar{\ell},\bar{\varepsilon}}(r;\delta) = \sum_{t\lambda} c_\lambda^{(t)}(r)(A_\lambda^{(t)}.Y_\lambda) = \sum_{t\lambda\eta} c_\lambda^{(t)}(r)\, A_{\lambda\eta}^{(t)*} Y_{\lambda\eta}(\theta,\phi) \qquad (2)$$

(zie form. IV.9.), dan blijkt na herschrijven van (1) dat er geldt;

$$c_0^{(0)}(r) = c_0(r) \qquad A_0^{(0)} = \sqrt{4\pi}\,, \text{ vanwege } Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$
$$c_2^{(1)}(r) = c_1(r) R_0 \qquad A_{2\eta}^{(1)} = \alpha_{2\eta} \qquad (3)$$
$$c_\lambda^{(2)}(r) = c_2(r) R_0^2 \qquad A_{\lambda\eta}^{(2)} = \sum_{\mu\nu} \frac{5}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{2\lambda+1} \begin{pmatrix} 2 & 2 & \lambda \\ \mu & \nu & -\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} (-1)^2 \alpha_{2\mu}\alpha_{2\nu}$$

In (2) geeft t aan van welke orde in δ (of α) de afzonderlijk-ke termen afkomstig zijn, en is $A_\lambda^{(t)}$ een operator die slechts

werkt op de interne coördinaten van de kern. Substitueert men de multipoolontwikkeling (2) voor $R_{\ell,\bar{\varepsilon}}(r;\delta)$ in het matrixelement (form. IV.7.)

$$\{(i)^{\ell''}(Y_{\ell''}\otimes\chi_{I''}^{(N'')})_{JM} \mid R_{\ell\bar{\varepsilon}}(r;\delta) \mid (i)^{\ell'}(Y_{\ell'}\otimes\chi_{I'}^{(N')})_{JM}\}$$

dan volgt

$$\bar{R}^{(r)}_{\ell,\bar{\varepsilon};\ell''N''I'',\ell'N'I'} = \sum_{t\lambda\eta} C_\lambda^{(t)}(r) \langle (i)^{\ell''}(Y_{\ell''}\otimes\chi_{I''}^{(N'')})_{JM} \mid A^{(t)*}_{\lambda\eta} \mid (i)^{\ell'}(Y_{\ell'}\otimes\chi_{I'}^{(N')})_{JM}\rangle \tag{4}$$

Vanwege het feit dat de operatoren A alleen werken op de kerncoördinaten $\alpha_{2\mu}$ kan men het matrixelement opsplitsen in een product van 2 matrixelementen.

$$\bar{R}^{(r)}_{\ell,\bar{\varepsilon};\ell''N''I'',\ell'N'I'} = \sum_{t\lambda\eta m''M_I''m'M_I'} C_\lambda^{(t)}(r)\,(i)^{\ell'-\ell''}(\ell''m''I''M_I''\mid JM)(\ell'm'I'M_I'\mid JM)\cdot \langle \ell''m''\mid Y_{\lambda\eta}\mid \ell'm'\rangle \langle N'';I''M_I''\mid A^{(t)*}_{\lambda\eta}\mid N';I'M_I'\rangle \tag{5}$$

Het Wigner-Eckart-theorema drukt het matrixelement van een tensoroperator uit in een Clebsch-Gordan-coëfficiënt en een gereduceerd matrixelement volgens;

$$\langle N'';I''M_I''\mid A_{\lambda\eta}\mid N';I'M_I'\rangle = (I'M_I'\lambda-\eta\mid I''M_I'')\langle N'';I''\|A_\lambda\|N';I'\rangle (2I''+1)^{-1/2}. \tag{6}$$

(zie Lit.11).

Het gereduceerde matrixelement $\langle N";I" \|A_\lambda\| N';I'\rangle$ hangt niet meer van de quantumgetallen M_I'' en M_I' af, en niet meer van η. M.b.v. eigenschappen van, en relaties tussen Clebsch-Gordan-coëfficiënten, Wigner-3j-symbolen kan men de uitdrukking voor de ge"sandwich"te radiële golffunctie herleiden tot;

$$\bar{R}^{(r)}_{\ell\bar{\varepsilon};\ell''N''I'',\ell'N'I'} = \tag{7}$$

$$\sum_{t\lambda} C_\lambda^{(t)}(r)(-1)^J(i)^{\ell'-\ell''}(2\ell'+1)^{+1/2}(2\ell''+1)^{1/2}(4\pi)^{-1/2}(\ell'0\ell''0\mid\lambda 0)\begin{Bmatrix}\ell'I'J\\ I''\ell''\lambda\end{Bmatrix}\langle N'';I''\|A^{(t)}_\lambda\|N';I'\rangle$$

Hierin is $\begin{Bmatrix}\ell'I'J\\ I''\ell''\lambda\end{Bmatrix}$ een zgn. 6j-symbool.

Deze 6j-symbolen treden op bij het samenstellen van drie impulsmomenten.

Het 6j-symbool verschilt slechts in fase met de zgn. Racah-coëfficiënt $W(\ell' I' \ell'' I''; J\lambda)$ volgens;

$$\begin{Bmatrix} \ell' I' J \\ I'' \ell'' \lambda \end{Bmatrix} = (-1)^{\ell'+I'+\ell''+I''} W(\ell' I' \ell'' I''; J\lambda)$$

Bij de afleiding van (7) is verder gebruik gemaakt van een relatie, waarin een 6j-symbool in een sommatie over een product van vier 3j-symbolen volgens (8) wordt uitgedrukt;

$$\begin{Bmatrix} \ell' I' J \\ I'' \ell'' \lambda \end{Bmatrix} = \sum_{m' M_I' m'' M_I''} (-1)^{I''+\ell''+\lambda-M_I''-m''-\eta} (2J+1) \begin{pmatrix} \ell' I' J \\ m' M_I' -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' \ell'' \lambda \\ m' -m'' \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I'' I' \lambda \\ -M_I'' M_I' -\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I'' \ell'' J \\ M_I'' m'' -M \end{pmatrix} \qquad (8)$$

(zie Lit.17).

In uitdrukking (7) rest ons nu nog een uitdrukking te vinden voor het gereduceerde matrixelement.

Hiertoe drukt men $A_{\lambda\eta}$ uit in creatie- en annihilatie-operatoren. Daarmee berekent men $A_{\lambda\eta} |N; IM_I\rangle$ .Als dit gebeurd is neemt men het inproduct van de resulterende vector met de vector $|N''; I'' M_I''\rangle$;dit leidt tot een uitdrukking voor het matrixelement $\langle N''; I'' M_I'' | A_{\lambda\eta} | N'; I' M_I' \rangle$.

M.b.v. het Wigner-Eckart-theorema (6) volgt dan de uitdrukking voor het gereduceerde matrixelement $\langle N''; I'' \| A_\lambda \| N'; I' \rangle$.

Verder wordt bij de berekening van de gereduceerde matrixelementen gebruik gemaakt van de relatie:

$$\langle N''; I'' \| A_\lambda \| N'; I' \rangle = (-1)^{I''-I'+\lambda} \langle N'; I' \| A_\lambda \| N''; I'' \rangle = \langle N'; I' \| A_\lambda \| N''; I'' \rangle$$

(zie Lit.11).

De resultaten voor de voor ons van belang zijnde overgangen zijn vermeld op blz.39. (Zie ook Lit.11)

APPENDIX B.

De_model-potentiaal.

In deze appendix geven we een gedetailleerde beschrijving van de wisselwerkings-potentiaal,zoals we reeds in hoofdstuk VII,formule (1) gezien hebben.De meest voor de hand liggende termen in de verstrooiingspotentiaal worden beschreven met de Coulombpotentiaal $V_C(r)$ en de reële potentiaal $V_0 f(r,R_0,a_0)$ De meest simpele vorm van de reële potentiaal is een rechthoekige put.Vanwege het diffuse karakter van het kernoppervlak,is dit echter geen erg realistische beschrijving.Een put met afgeronde hoeken zoals b.v. de Saxon-Woods-vorm geeft vaak een goede beschrijving.De Saxon-Woods-vormfactor (zie form.VII.2),en de afgeleide vormfactor zijn in beeld gebracht in fig.12.

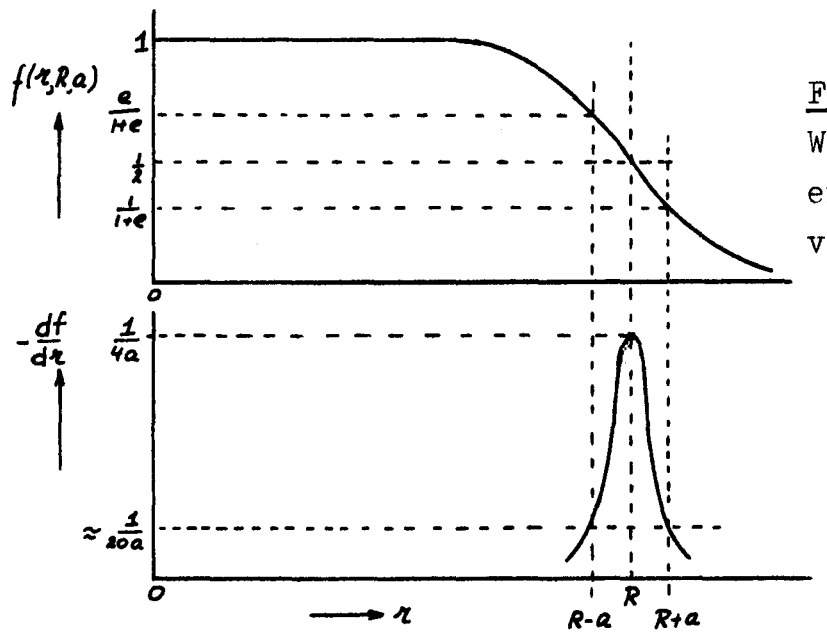


Fig.12:De Saxon-Woods-vormfactor en de afgeleide vormfactor.

De diffuusheid a is een maat voor de kernoppervlaklaagdikte. Dit is de radiële afstand waarover de vormfactor f(r,R,a) afneemt van 1 tot 0.Voor r=R geldt:f(R,R,a)=1/2.
In de potentiaaluitdrukking (VII.1) staat R_0 voor de kern-

straal.De potentiaalparameter R_i wordt meestal iets groter gekozen dan R_0.

Vanwege het feit dat men slechts met een beperkt aantal kanalen werkt,(afkapping),is een imaginaire potentiaal vereist,die de verdwijning van flux naar andere kanalen,die niet in de beschouwing worden betrokken,beschrijft.Deze imaginaire potentiaal is een combinatie van een oppervlakte-absorptieterm W_D,en een volume-absorptieterm W_V.Voor proton-verstrooiing b.v. is empirisch voor energieën beneden 20 MeV de oppervlakte-absorptieterm de belangrijkste absorptieterm gebleken.Voor hogere energieën dient echter ook de volume-absorptieterm meegenomen te worden,om de meetresultaten te kunnen verklaren.

Opm. Dat het imaginaire gedeelte van de potentiaal absorptie veroorzaakt,kan men als volgt inzien.Beschouw voor het gemak een potentiaal die alleen van r afhangt:$V(r)=U(r)+iW(r)$.De tijdafhankelijke Schrödinger-vergelijking ziet er dan als volgt uit;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + iW(r)\right]\Psi(r,t)$$

$$i\hbar^2 \frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*(r,t)\Psi(r,t)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi^*(r,t)\nabla^2\Psi(r,t) - \Psi(r,t)\nabla^2\Psi^*(r,t)\right] + 2iW(r)\Psi(r,t)\Psi^*(r,t).$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(r,t)|^2 - \frac{i\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}.\left[\Psi^*(r,t)\nabla\Psi(r,t) - \Psi(r,t)\nabla\Psi^*(r,t)\right] = \frac{2W(r)}{\hbar}\Psi(r,t)\Psi^*(r,t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(r,t)|^2 + \nabla.\vec{J} = \frac{2W(r)}{\hbar}|\Psi(r,t)|^2.$$

Dit is de quantummechanische uitdrukking voor de deeltjesflux J en de deeltjesdichtheid $\rho = |\Psi(r,t)|^2$,het q.m. equivalent van de klassieke continuiteitsvergelijking.Mits $W(r) < 0$ absorbeert het systeem invallende deeltjes,en wel meer naarmate W(r) sterker negatief is.

Keren we nu terug naar de beschouwing van de interactie potentiaal.Indien de potentiaal sferisch zou zijn,dan zou er alleen elastische verstrooiing optreden.Bij een niet-sferische kernpotentiaal kan er ook inelastische verstrooiing optreden. Indien je nu de kern quadrupoolvibraties laat uitvoeren,om een sferische evenwichtsvorm dan manifesteert de (θ,ϕ,α)-afhankelijkheid van de potentiaal V zich alleen in de parametrische afhankelijkheid van δ,zoals we reeds in hfds.IV gezien hebben.In de potentiaaluitdrukking vervangt men R_0 door $R_0+\delta$.Ook van de imaginaire potentiaal wordt verondersteld,dat deze de kernoppervlaktrillingen volgt;$R_i \longrightarrow R_i+\delta$. Hoe de invloed is van de quadrupoolvibraties op de Coulombpotentiaal hebben we reeds gezien in hoofdstuk VII.

APPENDIX C.

Het aansluiten.

De methode ter bepaling van de S-matrixelementen.
In hoofdstuk VI zagen we dat de oplossingsmatrix $\underline{\underline{D}}$ bestaat uit N lineair onafhankelijke oplossingsvectoren $\underline{u}_p$,die voldoen aan het stelsel gekoppelde d.v.-en.Elk van deze N oplos-singsvectoren bestaat uit 2N componenten.Namelijk N componenten $u_{pq}(r_m)$ en N componenten $u_{pq}(r_m)$ in de N kanalen. Men zoekt nu een lineaire combinatie van deze N lineair onafhankelijke oplossingsvectoren,die in r_m wat betreft functiewaarde en afgeleide aansluiten op de asymptotische oplossing ("smooth matching"),zodat de gelijkheid van deze oplossing aan de asymptotische oplossing in het gehele buitengebied gegarandeerd is.(Een oplossing wordt volledig vastgelegd door twee randvoorwaarden).
In het geval van geladen projectielen,en randvoorwaarde-formulering m.b.v. de S-matrix ziet aansluiten er als volgt uit;

$$\sum_{p=1}^{N} a_p u_{pq}(r_m) = e^{i\sigma_{l_n}} \delta_{nq} \left[G_q(r_m) - iF_q(r_m)\right] - e^{-i\sigma_{l_n}} S_{nq} \frac{k_n^{1/2}}{k_q^{1/2}} \left[G_q(r_m) + iF_q(r_m)\right] \qquad (1)$$

$$\sum_{p=1}^{N} a_p u'_{pq}(r_m) = e^{i\sigma_{l_n}} \delta_{nq} \left[G'_q(r_m) - iF'_q(r_m)\right] - e^{-i\sigma_{l_n}} S_{nq} \frac{k_n^{1/2}}{k_q^{1/2}} \left[G'_q(r_m) + iF'_q(r_m)\right] \qquad (2)$$

Hierin zijn F_q en G_q de reguliere en irreguliere Coulombfunc ties. Asymptotisch geldt;

$$F_l \overset{r\to\infty}{\sim} \sin(kr - \eta \ln 2kr - (l\pi/2) + \sigma_l)$$
$$G_l \overset{r\to\infty}{\sim} \cos(kr - \eta \ln 2kr - (l\pi/2) + \sigma_l)$$

$$u_l^{(-)} \overset{r\to\infty}{\sim} \exp -i(kr - \eta \ln 2kr - (l\pi/2)) \quad ; \text{ inlopende golf.}$$

$$u_l^{(+)} \overset{r\to\infty}{\sim} \exp\ i(kr - \eta \ln 2kr - (l\pi/2)) \quad ; \text{ uitlopende golf.}$$

met:

$$u_l^{(\mp)} = e^{\mp i\sigma_l}(G_l \pm iF_l) \qquad , \sigma_l = \arg\Gamma(1 + l + i\eta), \ \eta = \frac{mZZ'e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 k}$$

(Zie Lit.18).

Uit vergelijkingen (1) en (2) kan men nu de N coëfficiënten a_p en de matrixelementen S_{nq} bepalen.

Vermenigvuldigt men vergelijking (1) met $\left[G'_q(r_m) + iF'_q(r_m)\right]$ en vergelijking (2) met $\left[G_q(r_m) + iF_q(r_m)\right]$ en neemt men het verschil van de zo verkregen uitdrukkingen dan resulteert dit in;

$$\sum_{p=1}^{N} a_p \left\{ \left[G'_q(r_m) + iF'_q(r_m)\right] u_{pq}(r_m) - \left[G_q(r_m) + iF_q(r_m)\right] u'_{pq}(r_m) \right\} = 2ie^{i\sigma_{l_n}} \delta_{nq} \quad , \text{voor elke q.} \qquad (3)$$

Hierin is gebruik gemaakt van het feit dat er geldt;

$$F'_q(r_m)G_q(r_m) - F_q(r_m)G'_q(r_m) = 1.$$

Vergelijking (3) levert de coëfficiënten a_p.

Vermenigvuldigt men vergelijking (1) met $\left[G'_q(r_m) - iF'_q(r_m)\right]$ en vergelijking (2) met $\left[G_q(r_m) - iF_q(r_m)\right]$ en neemt men het verschil van beide uitdrukkingen, dan vindt men;

$$\sum_{p=1}^{N} a_p \{ [G'_q(r_m)-iF'_q(r_m)]\, u_{pq}(r_m) - [G_q(r_m)-iF_q(r_m)]\, u'_{pq}(r_m) \} = 2ie^{-i\sigma_{\ell_q}} S_{nq} \frac{k_n^{1/2}}{k_q^{1/2}} \qquad (4)$$

Deze vergelijking drukt S_{nq} uit in bekende grootheden.

Opm. Het aansluiten m.b.v. de randvoorwaarde-formulering uitgedrukt in de C-matrixelementen verloopt analoog, uitgaande van de vergelijkingen;

$$\sum_{p=1}^{N} a_p u_{pq}(r_m) = d_n \delta_{nq} F_q(r_m) + e_{nq} C_{nq} [G_q(r_m)+iF_q(r_m)]$$

$$\sum_{p=1}^{N} a_p u'_{pq}(r_m) = d_n \delta_{nq} F'_q(r_m) + e_{nq} C_{nq} [G'_q(r_m)+iF'_q(r_m)]$$

met $d_n = (2\ell_n+1)^{1/2} . \exp(i\sigma_{\ell_n})$

en $e_{nq} = (k_n/k_q)^{3/2} (2\ell_q+1)^{1/2} \exp(i\sigma_{\ell_q})$

Zie Lit. 11

Opm. Uit de definitie van de S-matrix resp. C-matrix kan men het volgende verband tussen de C-matrix en de S-matrix afleiden:

$$C_{\ell' N' I' ; \ell N I} = -0.5i(k'/k)((2\ell+1)/(2\ell'+1))^{1/2} S_{\ell' N' I' ; \ell N I} e^{i(\sigma_\ell - \sigma_{\ell'})}$$

$$+0.5i \delta_{\ell'\ell} \delta_{N'N} \delta_{I'I}$$