Anhang A

Linearisierung der Integrale

Die Differenz $\delta V(r) = V(r) - V_{cavity}$ zwischen einem realistischen Cluster-Potential $V(r)$ und dem sphärischen Kavitätspotential ist keine kleine Größe. Um die klassische radiale Wirkung und das Thomas-Fermi Integral für ein Potential $V(r)$ um den Grenzfall der sphärischen Kavität zu entwickeln, können wir daher nicht einfach Störungstheorie nach δV betreiben. Statt dessen müssen wir die gesuchten Integrale direkt nach dem (kleinen) Randparameter a unseres Cluster-Potentials entwickeln. Im Fall eines stückweise definierten Potentials, etwa eines Potentials mit linearem Rand

$$V_{lin}(R_0, a; r) = \begin{cases} -V_0 & , \; r \leq R_0 - a \\ -V_0 + \dfrac{V_0}{2a}\Big(r - (R_0 - a)\Big) & , \; r \in [R_0 - a, R_0 + a] \\ 0 & , \; r \geq R_0 + a \end{cases}$$

läßt sich eine solche Entwicklung nach a direkt angeben. Ein Integral, dessen Integrand $f\Big[V(r), L^2/r^2\Big]$ ein Funktional des Potentials ist, zerfällt dann auf natürliche Weise in zwei Anteile: einen inneren, in dem $V(r)$ mit dem Kavitäts-Potential übereinstimmt, und einen äußeren Anteil, dessen Ausdehnung von der Größenordnung a ist:

$$\int_{r_{in}}^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/r^2\Big]\, dr = \int_{r_{in}}^{R_0 - a} f\Big[-V_0, L^2/r^2\Big]\, dr + \underbrace{\int_{R_0-a}^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/r^2\Big]\, dr}_{\approx \int_{R_0-a}^{r_{out}} f\left[V(r), L^2/R_0^2\right] dr}$$

Für kleinen Randparameter $a \ll R_0$ kann man im zweiten Integral die Variation des Zentrifugalpotentials vernachlässigen und erhält so einen Ansatz für die Entwicklung des gesuchten Integrals nach Potenzen von a. Im Falle des Woods-Saxon Potentials

$$V_{WS}(r) = \frac{-V_0}{1 + e^{(r-R_0)/a}}$$

kann man prinzipiell genauso vorgehen, da das Potential für $r \ll R_0$ praktisch mit dem Kavitätspotential übereinstimmt. Es läßt sich jedoch im Gegensatz zum linearen Potential kein Punkt explizit angeben, an dem man das Integral zerlegen könnte. Wir leiten daher ein Verfahren her, das ohne einen solchen „Zerlegungspunkt" r_a auskommt. Dazu machen wir wieder den Zerlegungs-Ansatz

$$\int_{r_{in}}^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/r^2\Big]\, dr \approx \int_{r_{in}}^{R_0-\alpha} f\Big[-V_0, L^2/r^2\Big]\, dr + \int_{R_0-\alpha}^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/R_0^2\Big]\, dr$$

wobei α von derselben Größenordnung wie a sei. Um die unbekannte Größe $R_0 - \alpha$ zu beseitigen, erweitern wir zunächst mit dem Kavitäts-Integral $\int_0^{R_0-\alpha} f\Big[-V_0, L^2/R_0^2\Big]\, dr$. Da $V(r)$ auf $r \in [0, R_0 - \alpha]$ praktisch gleich $-V_0$ ist, gilt

$$\int_0^{R_0-\alpha} f\Big[-V_0, L^2/R_0^2\Big]\, dr \approx \int_0^{R_0-\alpha} f\Big[V(r), L^2/R_0^2\Big]\, dr$$

Damit finden wir

$$\begin{aligned}\int_{r_{in}}^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/r^2\Big]\, dr \quad &\approx \quad \int_{r_{in}}^{R_0-\alpha} f\Big[-V_0, L^2/r^2\Big]\, dr + \int_0^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/R_0^2\Big]\, dr \\ &\quad - \int_0^{R_0-\alpha} f\Big[-V_0, L^2/R_0^2\Big]\, dr\end{aligned}$$

Nun ist aber α laut Voraussetzung von der Größenordnung a. Wir können im Intervall $[R_0 - \alpha, r_{out}]$ also wieder von der Variation des Zentrifugalpotentials absehen: $L^2/r^2 \approx L^2/R_0^2$. Damit läßt sich die Hilfsgröße α aus unserem Ansatz für die Entwickung des Integrals eliminieren:

$$\int_{r_{in}}^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/r^2\Big]\, dr \approx \underbrace{\int_{r_{in}}^{R_0} f\Big[-V_0, L^2/r^2\Big]\, dr}_{\text{Kavität}} \;\; \underbrace{\begin{array}{l} + \int_0^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/R_0^2\Big]\, dr \\ - \int_0^{R_0} f\Big[-V_0, L^2/R_0^2\Big]\, dr \end{array}}_{\text{Korrektur}} \tag{A.1}$$

Wir haben damit also auch für das Woods-Saxon Potential[1] eine natürliche Zerlegung des Integrals $\int_{r_{in}}^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/r^2\Big]\, dr$ in einen Kavitäts-Anteil sowie eine Randkorrektur gefunden. Im folgenden werden wir diese Randkorrektur für die radiale Wirkung und das Thomas-Fermi Integral bestimmen und nach dem Randparameter a entwickeln. Beim Übergang auf reduzierte Koordinaten verwenden wir dabei die Abkürzungen aus Abschnitt 6.1.

[1] Das Verfahren funktioniert natürlich auch für andere Cluster-Potentiale.

A.1 Radiale Wirkung

Für die radiale Wirkung lautet der Integrand in den obigen Integralen

$$f[v,w] = \sqrt{2m(E-v)-w} \tag{A.2}$$

Damit ist das zweite Korrektur-Integral in (A.1) trivial

$$\int_0^{R_0} f\Big[-V_0, L^2/R_0^2\Big]\,dr = \int_0^{R_0} \sqrt{2m(E+V_0) - \frac{L^2}{R_0^2}}\,dr = pR_0\,\sqrt{1-\hat{L}^2} \tag{A.3}$$

Das erste Korrektur-Integral bereitet mehr Mühe

$$\int_0^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/R_0^2\Big]\,dr = \int_0^{r_{out}} \sqrt{2m\Big(E - V(r)\Big) - \frac{L^2}{r^2}}\,dr \tag{A.4}$$

Mittels der Identität für das Woods-Saxon Potential

$$V(r) = \frac{-V_0}{1+e^{(r-R_0)/a}} = -V_0 + \frac{V_0}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{r-R_0}{2a}\right)\right) \tag{A.5}$$

finden wir

$$\int_0^{r_{out}} f\Big[V(r), L^2/R_0^2\Big]\,dr = pR_0\,\underbrace{\int_0^{\hat{r}_{out}} \sqrt{1-\hat{L}^2 - \frac{1+\tanh\left(\frac{x-1}{2\hat{a}}\right)}{2P^2}}\,dx}_{=\hat{I}_{s,1}(P,\hat{L},\hat{a})}$$

Durch die Substitution $y := \frac{x-1}{2\hat{a}}$ ergibt sich daraus

$$\begin{aligned}
\hat{I}_{s,1}(P,\hat{L},\hat{a}) &= \frac{\sqrt{2}\,\hat{a}}{P}\int_{-\frac{1}{2\hat{a}}}^{\mathrm{artanh}(c)} \sqrt{c-\tanh(y)}\,dy \qquad c := 2P^2(1-\hat{L}^2)-1 \\
&= 2\hat{a}\left\{\sqrt{1-\hat{L}^2}\;\mathrm{artanh}\sqrt{\frac{1-\hat{L}^2-1+\tanh(-1/2\hat{a})}{1-\hat{L}^2}}\right. \\
&\qquad \left. -\sqrt{\frac{1}{P^2}-(1-\hat{L}^2)}\;\arctan\sqrt{\frac{1-\hat{L}^2-1+\tanh(-1/2\hat{a})}{1/P^2-(1-\hat{L}^2)}}\right\}
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Die Darstellung wurde so gewählt, daß alle auftretenden Wurzeln reell sind. Wir stellen fest, daß die obere Integrationsgrenze nicht zum Integral beiträgt.

Aus diesem Ausdruck zusammen mit (A.3) können wir die gesuchte Änderung der radialen Wirkung für ein Woods-Saxon Potential mit kleinem Randparameter a gegenüber derjenigen für eine entsprechende Kavität gemäß (A.1) bestimmen. Nun ist aber (A.1) selbst schon eine Näherung für kleine a und darüber hinaus sind wir auch nur an der führenden Ordnung des Korrektur-Terms interessiert. Es genügt uns daher, die Entwicklung von (A.6) nach Potenzen von $\hat{a}$ bis auf $\mathcal{O}(\hat{a}^2)$ zu kennen.

Der Limes $\hat{a} \to 0$ des zweiten Summanden in (A.6) ist problemlos und liefert mit $\lim_{\hat{a}\to 0} \tanh(-1/2\hat{a}) = -1$

$$\lim_{\hat{a}\to 0} \arctan \sqrt{.} = \arctan \sqrt{\frac{1-\hat{L}^2}{1/P^2 - (1-\hat{L}^2)}} = \arcsin\left(P\sqrt{1-\hat{L}^2}\right) \tag{A.7}$$

Der erste Summand divergiert für $\hat{a} \to 0$. Wir können den Grenzwert dennoch bestimmen, indem wir die Wurzel im Argument des Areatangens entwickeln. Aus

$$1 + \tanh\left(-\frac{1}{2\hat{a}}\right) = \frac{2}{1+e^{1/\hat{a}}} \to 2\,e^{-1/\hat{a}}$$

ergibt sich

$$\sqrt{\frac{1-\hat{L}^2 - 1 + \tanh\left(-1/2\hat{a}\right)}{1-\hat{L}^2}} \to 1 - \frac{e^{-1/\hat{a}}}{2P^2(1-\hat{L}^2)}$$

woraus wir mit Hilfe der Formel

$$\operatorname{artanh}(x) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right)$$

schließlich finden

$$\operatorname{artanh}\sqrt{.} = \frac{1}{2\hat{a}} + \ln\left(2P\sqrt{1-\hat{L}^2}\right) + \mathcal{O}(\hat{a}^2) \tag{A.8}$$

Einsetzen von (A.8) und (A.7) liefert dann $\left(\text{mit } P_L := P\sqrt{1-\hat{L}^2}\right)$:

$$\hat{I}_{s,1} = \sqrt{1-\hat{L}^2} + \frac{2}{P}\left(P_L \ln\left(2P_L\right) - \sqrt{1-P_L^2}\,\arcsin\left(P_L\right)\right)\hat{a} + \mathcal{O}(\hat{a}^2) \tag{A.9}$$

D.h. der divergente Anteil in (A.8) kompensiert zusammen mit dem Vorfaktor $\hat{a}$ genau den Beitrag des Integrals (A.3).

Es existiert also eine Entwicklung der radialen Wirkung für ein Woods-Saxon Potential $V(V_0, R_0, a; r)$ um den Fall der radialen Kavität:

$$\frac{1}{pR_0}\int_{r_{in}}^{r_{out}} \sqrt{2m\left(E - V(r)\right) - \frac{L^2}{r^2}}\,dr = \underbrace{\left(\sqrt{1-\hat{L}^2} - \hat{L}\arccos(\hat{L})\right)}_{\text{Kavität}} + \underbrace{\left(\hat{I}_s(P,\hat{L})\,\hat{a} + \mathcal{O}(\hat{a}^2)\right)}_{\text{Korrektur}} \tag{A.10}$$

mit

$$\boxed{\hat{I}_s(P,\hat{L}) = \frac{2}{P}\left(P_L \ln\left(2P_L\right) - \sqrt{1-P_L^2}\,\arcsin\left(P_L\right)\right)} \tag{A.11}$$

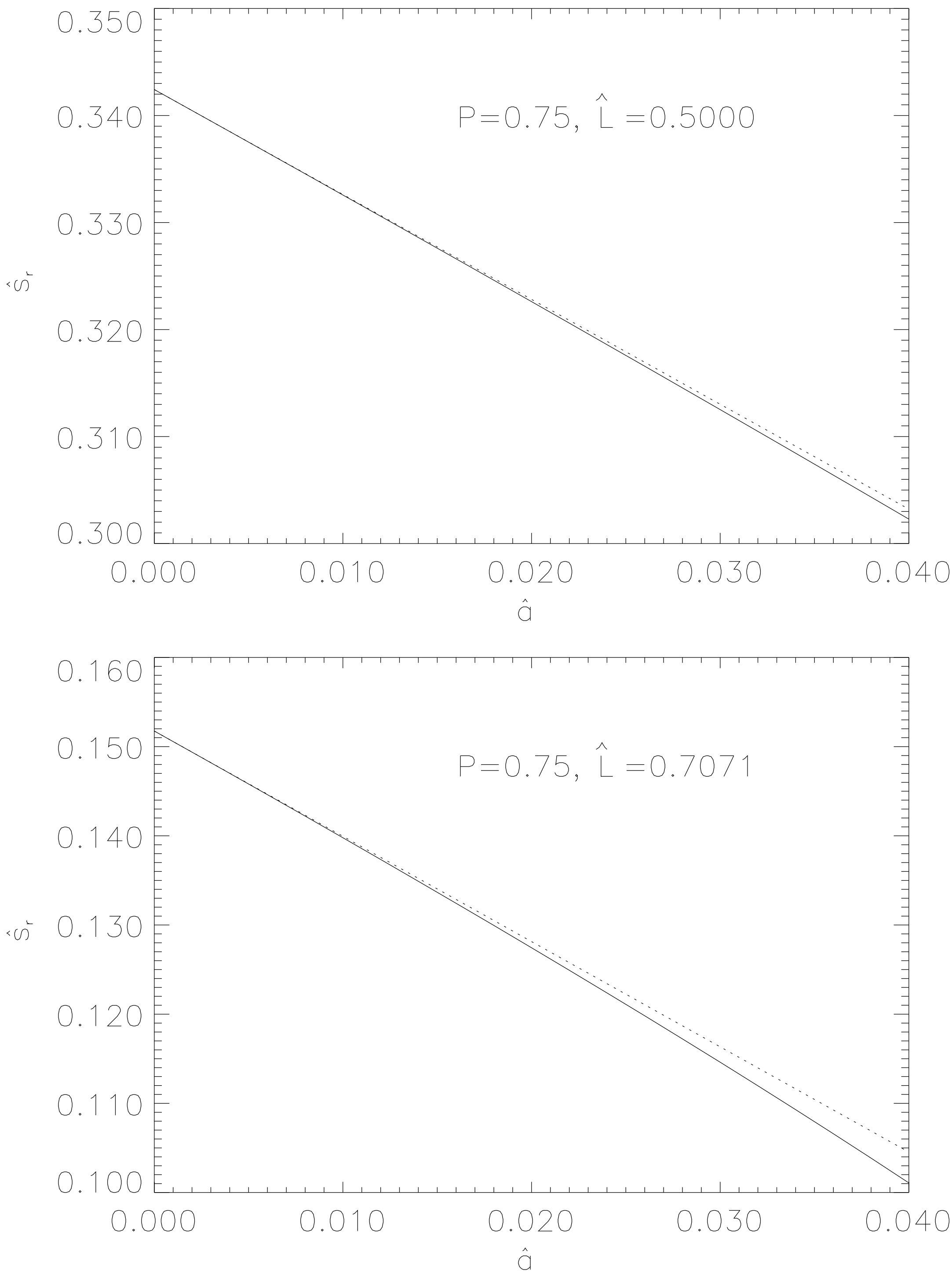

Abbildung A.1: Vergleich der numerisch bestimmten radialen Wirkung $\hat{s}_r$ (durchgezogene Kurve) mit der Linearisierung (A.10) (gepunktete Linie) für $P = 0.75$ und $\hat{L} = 0.5$ (das entspricht einer Dreieck-Bahn) bzw. $\hat{L} = 0.7071$ (das entspricht einer Quadrat-Bahn).

Um die Anwendbarkeit des Ausdrucks (A.10) zu demonstrieren, vergleichen wir in Abbildung A.1 unsere Linearisierung

$$\hat{s}_r(P, \hat{L}, \hat{a}) = \sqrt{1 - \hat{L}^2} - \hat{L}\ \arccos(\hat{L}) + \hat{I}_s\,\hat{a}$$

mit den Ergebnissen der numerischen Quadratur des exakten Integrals für die radiale Wirkung

$$\hat{s}_r = \int_{\hat{r}_{in}}^{\hat{r}_{out}} \sqrt{1 - \frac{1/P^2}{1 + e^{(x-1)/\hat{a}}} - \frac{\hat{L}^2}{x^2}}\, dx$$

bei realistischen Werten der Parameter P, $\hat{L}$ und $\hat{a}$. Wie sich zeigt, ist die Näherung für Dreieck-Bahnen hervorragend (maximaler relativer Fehler: 2%), für Quadrat-Bahnen mit einem relativen Fehler von unter 7% noch gut. Für größere Drehimpulse wird die Linearisierung dann immer schlechter. Das ist verständlich, da die Näherung eines konstanten Zentrifugalpotentials in der Umgebung von R_0 bei großen Drehimpulsen und für wachsende Randbreite a immer gröber wird. Für das Schwebungsargument aus Kapitel 6 benötigen wir jedoch keine höheren als die gezeigten Drehimpulse. Mithin ist unsere Linearisierung für diesen Zweck einsetzbar.

A.2 Thomas-Fermi Integral

Das Thomas-Fermi Integral tritt in der Gleichung

$$N = \frac{1}{3\pi^2} \int d^3r\ k_F^3(\vec{r}\,) = \frac{4}{3\pi} \int_0^{r_{out}} \left(\frac{2m\big(E_F - V(r)\big)}{\hbar^2} \right)^{3/2} r^2\, dr$$

auf. Die Rolle des Zentrifugalpotentials (vgl. (A.1)) übernimmt nun der Faktor r^2:

$$f[v, r^2] = \left(\frac{2m(E_F - v)}{\hbar^2} \right)^{3/2} r^2$$

Das zweite Integral des Korrektur-Terms aus (A.1) ist wieder trivial

$$\int_0^{R_0} f\big[- V_0, R_0^2 \big]\, dr = \big(k_F R_0\big)^3 \tag{A.12}$$

Zur Bestimmung des ersten Integrals gehen wir ähnlich wie im Fall der radialen Wirkung vor. Zunächst schreiben wir

$$\int_0^{r_{out}} f\big[V(r), R_0^2\big]\, dr = (k_F R_0)^3 \underbrace{\int_0^{\hat{r}_{out}} \left[1 - \frac{1 + \tanh\left(\frac{x-1}{2\hat{a}}\right)}{2P^2} \right]^{3/2} dx}_{=:\ \hat{I}_{N,1}}$$

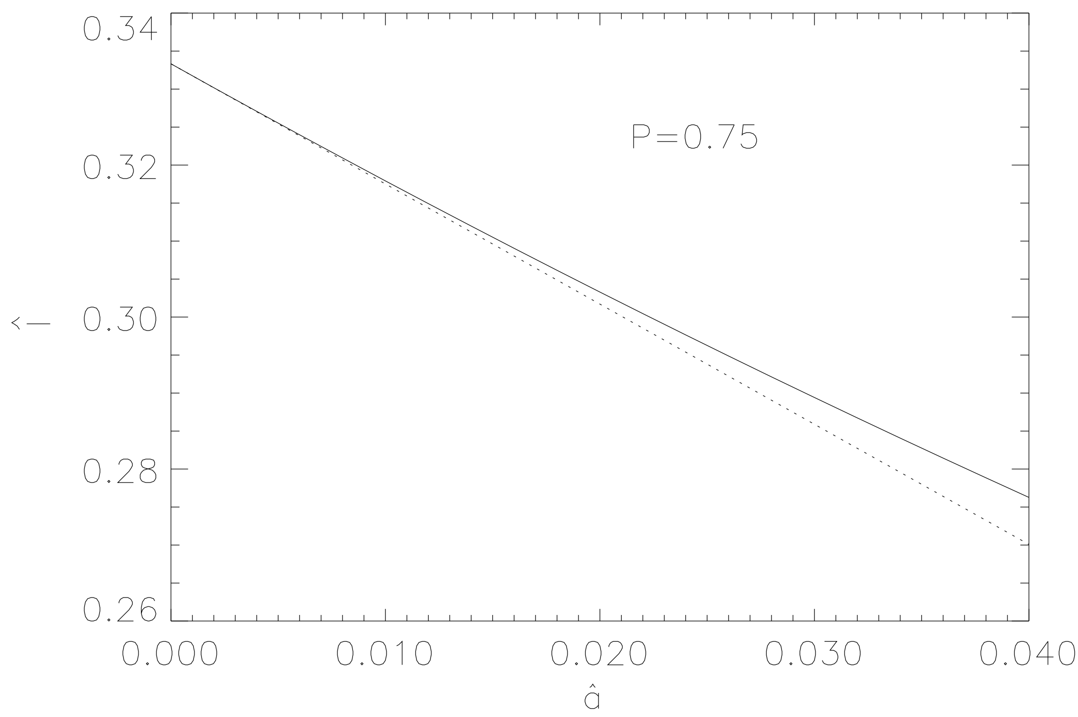

Abbildung A.2: Vergleich des numerisch bestimmten Thomas-Fermi Integrals $\hat{I}_N$ (durchgezogene Kurve) mit der Linearisierung (A.15) (gepunktete Linie) für $P = 0.75$. Der maximale relative Fehler der Linearisierung beträgt etwa 11% (bei $\hat{a} = 0.04$).

Wir substituieren wieder $y := \frac{x-1}{2\hat{a}}$ und finden so

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{2}\,P^3}{\hat{a}}\,\hat{I}_{N,1} &= \int_{-\frac{1}{2\hat{a}}}^{\operatorname{artanh}(c)} \Big(c - \tanh(y)\Big)^{3/2} dy \qquad c := 2P^2 - 1 \\
&= -2\sqrt{2P^2 - 1 - \tanh\left(-\frac{1}{2\hat{a}}\right)} \\
&\quad + \Big(2(1-P^2)\Big)^{3/2} \arctan\sqrt{\frac{2P^2 - 1 - \tanh\left(-\frac{1}{2\hat{a}}\right)}{2(1-P^2)}} \\
&\quad + \Big(2P^2\Big)^{3/2} \operatorname{artanh}\sqrt{\frac{2P^2 - 1 - \tanh\left(-\frac{1}{2\hat{a}}\right)}{2P^2}}
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Der Arcustangens und der Areatangens entsprechen den Funktionen in (A.6) für $\hat{L} = 0$. Den Limes $\hat{a} \to 0$ können wir also genauso wie im vorigen Abschnitt bilden:

$$\hat{I}_{N,1} = 1 + 2\left(\ln(2P) + \left(\frac{1}{P^2} - 1\right)^{3/2} \arcsin(P) - \frac{1}{P^2}\right)\hat{a} + \mathcal{O}(\hat{a}^2) \tag{A.14}$$

wobei wiederum der $\mathcal{O}(\hat{a}^0)$ Term den Beitrag von (A.12) kompensiert. Insgesamt finden wir also die Entwicklung

$$\frac{1}{(k_F R_0)^3} \int_0^{r_{out}} \left(\frac{2m\Big(E_F - V(r)\Big)}{\hbar^2} \right)^{3/2} r^2 \, dr = \underbrace{\frac{1}{3}}_{\text{Kavität}} + \underbrace{\Big(\hat{I}_N(P)\hat{a} + \mathcal{O}(\hat{a}^2)\Big)}_{\text{Korrektur}} \tag{A.15}$$

mit

$$\boxed{\hat{I}_N(P) = 2\left(\ln(2P) + \left(\frac{1}{P^2} - 1 \right)^{3/2} \arcsin(P) - \frac{1}{P^2} \right)} \tag{A.16}$$

Den Vergleich des numerisch bestimmten exakten Integrals mit unserer Linearisierung zeigt Abbildung A.2. Die Näherung ist mit einem relativen Fehler von 11% akzeptabel.