

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Theoretische Grundlagen der elastischen Elektronenstreuung | 1 |
| 2.1 | Wirkungsquerschnitt | 1 |
| 2.2 | Methode der Phasenanalyse | 1 |
| 2.2.1 | Beschreibung des Elektrons durch die Dirac-Gleichung . . | 1 |
| 2.2.2 | Partialwellenzerlegung der Wellenfunktion des Elektrons . | 1 |
| 2.2.3 | Die Streuphasen der Coulombwechselwirkung | 1 |
| 2.2.4 | Streuamplitude und Wirkungsquerschnitt | 1 |
| 2.3 | Mott-Wirkungsquerschnitt und Formfaktor | 1 |
| 2.4 | Zusammenfassung aller zugrundeliegenden Annahmen und Nähe- rungen | 1 |
| 3 | Programmbeschreibung | 1 |
| 3.1 | Anforderungen | 1 |
| 3.2 | Gang der Berechnungen im Programm PHASHI | 1 |
| 3.2.1 | Überblick | 1 |
| 3.2.2 | Berechnung des Kernpotentials aus der Grundzustandsla- dungsdichteverteilung | 1 |
| 3.2.3 | Berechnung der Streuphasen fuer eine punktförmige La- dungsdichteverteilung | 1 |
| 3.2.4 | Lösung der Dirac-Gleichung fuer die ausgedehnten La- dungsdichteverteilung des Kerns | 1 |
| 3.2.5 | Berechnung der Streuamplitude und des Wirkungsquer- schnitts | 1 |
| 3.2.6 | Transformation ins Laborsystem | 1 |
| 3.2.7 | Berechnung der Spektrometer-Öffnungswinkelkorrekturen . | 1 |
| 4 | Ergebnisse und Anwendungsbereich | 1 |
| 4.1 | Ergebnisvergleiche anhand der Literatur | 1 |
| 4.2 | Das ^{12}C -Experiment am S-DALINAC als Anwendungsbeispiel . . | 1 |
| 4.3 | Zulässiger Wertebereich der Eingangsparameter | 1 |
| 4.4 | Fehlerabschaetzungen | 1 |
| 4.5 | Einflußder Öffnungswinkelkorrekturen | 1 |
| 5 | Erfahrungen und Ausblick | 1 |
| A | Bedienung von PHASHI | 2 |
| A.1 | Benutzerführung | 2 |

| | |
|---|----------|
| A.2 Programmstart | 3 |
| A.3 Bildschirm-Layout | 4 |
| A.4 Hauptmenü | 5 |
| B Anmerkungen zur Definition des Formfaktors | 8 |

1 Einleitung

2 Theoretische Grundlagen der elastischen Elektronenstreuung

2.1 Wirkungsquerschnitt

2.2 Methode der Phasenanalyse

2.2.1 Beschreibung des Elektrons durch die Dirac-Gleichung

2.2.2 Partialwellenzerlegung der Wellenfunktion des Elektrons

2.2.3 Die Streuphasen der Coulombwechselwirkung

2.2.4 Streuamplitude und Wirkungsquerschnitt

2.3 Mott–Wirkungsquerschnitt und Formfaktor

2.4 Zusammenfassung aller zugrundeliegenden Annahmen und Näherungen

3 Programmbeschreibung

3.1 Anforderungen

3.2 Gang der Berechnungen im Programm PHASHI

3.2.1 Überblick

3.2.2 Berechnung des Kernpotentials aus der Grundzustandsladungsdichteverteilung

3.2.3 Berechnung der Streuphasen fuer eine punktförmige Ladungsdichteverteilung

3.2.4 Lösung der Dirac–Gleichung fuer die ausgedehnten Ladungsdichteverteilung des Kerns

2

3.2.5 Berechnung der Streuamplitude und des Wirkungsquerschnitts

3.2.6 Transformation ins Laborsystem

3.2.7 Berechnung der Spektrometer–Öffnungswinkelkorrekturen

A Bedienung von PHASHI

In diesem Kapitel des Anhangs werden im Anschluß an einige genrelle Bemerkungen zur Benutzerführung und zum Programmstart das Bildschirm-Layout sowie die verschiedenen Menüpunkte und die mit ihnen verbundenen Funktionen beschrieben.

A.1 Benutzerführung

Die Benutzerführung erfolgt zum einen durch *Menüs*, in denen aus verschiedenen alternativen Aktionen eine ausgewählt werden kann, zum anderen durch *Eingabefenster*, bei denen der Benutzer aufgefordert ist, z.B. Zahlenwerte von Parametern oder Namen von Ausgabedateien über die Tastatur einzugeben.

Menüs

Jedes Menü ist charakterisiert durch verschiedene Elemente, die entweder mit weiteren (untergeordneten) Menüs, Eingabefenstern oder Aktionen (z.B. Berechnungen) verknüpft sind. Die Auswahl eines Elements erfolgt mit Hilfe eines *Rollbalkens*, der unter Verwendung der Cursor-Tasten \uparrow und \downarrow von einem Element zum anderen bewegt werden kann. Die Auswahl wird durch Drücken der `Return` oder `Enter` Taste abgeschlossen.

Ein Menü kann jederzeit durch Drücken der Tastenkombination `Ctrl-Z` (ohne Auswahl eines Elements) verlassen werden.

Das Betätigen von `Ctrl-W` innerhalb eines Menüs bewirkt einen kompletten Neuaufbau des gesamten Bildschirms.

Eingabefenster

Eingabefenster erlauben es dem Benutzer, Werte verschiedener Parameter über die Tastatur einzugeben bzw. zu ändern. Jedes Eingabefenster enthält neben einer Eingabeaufforderung, die den einzugebenden Parameter beschreibt, ggf. einen für den entsprechenden Parameter sinnvollen Wertebereich, dessen Einhaltung durch das Programm überprüft wird. In Abhängigkeit von der Art des einzugebenden Parameterwertes (d.h. entweder Zahlenwert oder Text) wird nur ein bestimmte Menge von Tasten zur Eingabe akzeptiert (so werden z.B. bei der Eingabe von ganzzahligen Werten nur die Tasten `0` – `9` akzeptiert, während das Drücken irgendeiner der übrigen Tasten keine Wirkung hat).

Folgende Tasten können innerhalb eines Eingabefensters verwendet werden:

| | |
|--|---|
| <code>←</code> , <code>→</code> | Bewegen des Cursors in die entsprechende Richtung. |
| <code>Ctrl-H</code> | Bewegen des Cursors zum Beginn der Eingabezeile. |
| <code>Ctrl-E</code> | Bewegen des Cursors zum Ende der Eingabezeile. |
| <code>Backspace</code> | Löschen des Zeichens links vom Cursor. |
| <code>Space</code> | Löschen des Zeichens unter dem Cursor. |
| <code>Ctrl-U</code> | Löschen bis zum Ende der Eingabezeile (ausgehend von der aktuellen Position des Cursors). |
| <code>Ctrl-A</code> | Umschalten zwischen Einfüge- und Überschreib-Modus. |
| <code>Ctrl-R</code> | Wiederherstellung des ursprünglichen Wertes (d.h. ggf. durchgeführte Änderungen rückgängig machen). |
| <code>Ctrl-Z</code> | Verlassen des Eingabefensters ohne den eingegebenen Wert zu übernehmen. |
| <code>Return</code> , <code>Enter</code> | Übernahme des eingegebenen Wertes und Verlassen des Eingabefensters. |

A.2 Programmstart

Nachdem das Programm gestartet wurde erscheint zunächst ein einführendes Fenster mit Titel und Zweck des Programms, das für wenige Sekunden auf dem Bildschirm bleibt. Währenddessen wird im Hintergrund die Datenbank für die Parameter der Ladungsdichteverteilung geöffnet und für den Zugriff vorbereitet. Im Anschluß daran ist der Benutzer aufgefordert, sämtliche Parameter, die zur Berechnung eines Formfaktors benötigt werden, einzugeben. Zu diesem Zweck werden nacheinander verschiedene Eingabefenster geöffnet und die Werte der entsprechenden Parameter abgefragt. Sind alle erforderlichen Werte eingegeben, so werden sie gemäß dem im folgenden Abschnitt beschriebenen Bildschirm-Layout dargestellt und das Hauptmenü wird angezeigt. Die Eingabe kann aber auch an jeder beliebigen Stelle durch Drücken von `Ctrl-Z` abgebrochen werden. Auch dann wird das unten genannte Bildschirm-Layout sowie das Hauptmenü angezeigt, vor einer Berechnung des Formfaktors müssen jedoch die fehlenden Parameter nachgeliefert werden.

A.3 Bildschirm–Layout

Der Bildschirm besteht aus vier verschiedenen Fenstern wie in Abb. ?? zu sehen ist. Während die Fenster **NUCLEUS**, **ELECTRON** und **SPECTROMETER** zur Darstellung der für die Berechnung relevanten Parameter dienen, erfüllt das Fenster in der rechten unteren Ecke verschiedene Funktionen: Im Verlauf der Programmausführung werden hier die verschiedenen Menüs und Eingabefenster dargestellt sowie der Status der laufenden Berechnung angezeigt.

Im Fenster **NUCLEUS** werden die den Target–Kern beschreibenden Parameter angezeigt. Neben dem *Elementsymbol* (d.h. der *Kernladungszahl*) und der *Nukleonenzahl* sind das die Parameter, die die Grundzustandsladungsdichteverteilung des Target–Kerns beschreiben. Als Verteilungsfunktion $\rho(r)$ wird dabei die *3–Parameter–Fermi–Verteilung*

$$\rho(r) = \rho_0 \frac{1 + w \frac{r^2}{c^2}}{1 + e^{\frac{r-c}{z}}}$$

verwandt, die durch den Radius c (**Half–Density**), bei dem die Ladungsdichte auf die Hälfte ihres Wertes ρ_0 bei $r = 0$ abgefallen ist, die Oberflächendicke $t = z \cdot 4 \ln 3$ (**Surface Thickness**) sowie den Parameter w (**Central Depression**), der eine Absenkung ($w > 0$) oder Anhebung ($w < 0$) der Dichterverteilung bei $r = 0$ bewirkt, eindeutig bestimmt ist.¹

Die Parameter, die das gestreute Elektron beschreiben, werden im Fenster **ELECTRON** angezeigt. Der Streuprozeß ist durch die *Energie E* und den *Streuwinkel Θ* (**Theta**) des elastisch gestreuten Elektrons charakterisiert. Wurde anstelle eines einzelnen Streuwinkels ein ganzer Streuwinkelbereich für die Berechnung gewählt, so erfolgt die Darstellung im Format

Theta = Startwinkel deg : Endwinkel deg : Schrittweite deg.

Die charakteristischen Parameter des beim Streuexperiment verwendeten Spektrometers, sind im Fenster **SPECTROMETER** zu sehen. Neben der Größe der Öffnungswinkel **dTheta** in der Streuebene und **dphi** in der dispersiven Ebene des Spektrometers werden die Form des Öffnungswinkels (*elliptisch* oder *rechtwinklig*) und ggf. der Spektrometertyp (**QCLAM** für das neue QCLAM–Spektrometer oder **169 deg** für das 169°–Spektrometer) angezeigt. Werden für beide Öffnungswinkel jeweils **0 deg** angezeigt, so wird die Berechnung für ein idealisiertes Spektrometer ohne Öffnungswinkelkorrektur durchgeführt.

¹Der skalierende Parameter ρ_0 errechnet sich, unter Verwendung der übrigen Parameter, aus der Normierungsbedingung ??

Das obenbeschriebene Bildschirm–Layout wird während der gesamten Laufzeit des Programmes beibehalten und ist so gewählt, daß jederzeit sämtliche Werte der aktuellen, für die Berechnung der Formfaktoren relevanten Parameter auf einen Blick zu sehen sind.

A.4 Hauptmenü

Das Hauptmenü gliedert sich in zwei Bereiche (vgl. Abb. ??). Während sich im oberen Bereich (Calculation) Menüpunkte befinden, die die Berechnung der Formfaktoren sowie die Darstellung und Sicherung der Ergebnisse betreffen, sind im unteren Bereich (Parameters) diejenigen zu sehen, die mit der Eingabe von Parameterwerten zusammenhängen.

In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Elemente des Hauptmenüs in ihrer Funktion beschrieben.

Start Calculation

Nach Auswahl dieses Menüpunktes wird die Berechnung der Formfaktoren für den aktuellen Satz von Parametern gestartet.

Falls sich die Parameterwerte gegenüber einer eventuell vorausgegangenen Berechnung nicht verändert haben, wird der Benutzer darüber informiert, daß eine erneute Berechnung überflüssig ist.

Andernfalls wird zunächst geprüft, ob alle für die Berechnung notwendigen Parameter definiert sind. Ist dieses nicht der Fall, so werden die Werte derjenigen Parameter, die noch nicht definiert sind, vom Benutzer abgefragt und die Berechnung im Anschluß daran gestartet.

Während der Rechenvorgang läuft, gibt ein Status–Fenster kontinuierlich Auskunft über den aktuellen Stand der Berechnungen. Nach Beendigung der Rechnung wird das Hauptmenü angezeigt und der Benutzer hat nun die Möglichkeit durch Auswahl des im folgenden Abschnitt beschriebenen Menüpunktes die berechneten Formfaktoren auf dem Bildschirm darzustellen.

Display Results

Dieser Menüpunkt dient zu Darstellung der berechneten Formfaktoren im Fenster in der rechten unteren Ecke des Bildschirmes.

Voraussetzung ist, daß eine Berechnung der Formfaktoren vorausgegangen ist.

Ist das nicht der Fall, so wird der Benutzer durch eine Fehlermeldung darauf hingewiesen, diese zunächst durchzuführen.

Sind berechnete Formfaktoren vorhanden, so werden sie tabellarisch dargestellt. Folgende Tasten stehen zur Steuerung der Ausgabe zur Verfügung:

, Bewegen des Tabelleninhalts um eine Zeile in die entsprechende Richtung.

, Bewegen des Tabelleninhalts um eine Seite in die entsprechende Richtung.

, Zurück zum Hauptmenü.

Save Results and Parameters

Es besteht nicht nur die Möglichkeit die berechneten Formfaktoren auf dem Bildschirm auszugeben sondern auch die, sie zusammen mit den bei der Berechnung verwendeten Parametern in einer Datei abzuspeichern. Voraussetzung ist natürlich auch hier, daß berechnete Daten zur Verfügung stehen (vgl. vorausgegangenen Abschnitt).

Nach Auswahl dieses Menüpunktes ist der Benutzer aufgefordert, in einem Eingabefenster den Namen der Ausgabedatei einzugeben. Hierbei wird ihm als Vorgabewert eine Kombination aus dem Namen des Target-Kerns, der Nukleonenzahl und der Elektronenenergie angeboten. Eine Extension darf nicht angegeben werden.

Es werden zwei Ausgabedateien erzeugt, eine mit der Extension **.par**, in der sowohl die bei der Berechnung verwendeten Parameter als auch die berechneten Formfaktoren in übersichtlicher Form abgelegt sind und die für ein anschließendes Ausdrucken vorgesehen ist. Die andere Ausgabedatei hat die Extension **.dat** und beinhaltet ausschliesslich die berechneten Formfaktoren in einem Format, das von Programmen, die zur graphischen Ausgabe zur Verfügung stehen (wie z.B. PAW oder PLOTDATA), gelesen werden kann.

Exit

Durch Auswahl dieses Menüpunktes wird das Programm PHASHI beendet. Existieren berechnete Formfaktoren, die jedoch noch nicht abgespeichert wurden, so wird dem Benutzer die Gelegenheit gegeben, diese vor dem Verlassen des Programms abzuspeichern.

Nucleus

Die den Target-Kern beschreibenden Parameter können durch Auswahl dieses Menüpunktes eingegeben bzw. geändert werden. Zunächst erscheinen nacheinander zwei Eingabefenster, die zur Eingabe des Elementsymbols und der Nukleonenzahl des Target-Kerns auffordern. Mit Hilfe dieser Informationen versucht das Programm aus der Datenbank die entsprechenden die Ladungsdichteverteilung beschreibenden Parameter zu lesen. Dabei wird gleichzeitig überprüft, ob das eingegebene Elementsymbol gültig ist und ggf. eine Fehlermeldung mit anschließender erneuter Eingabeaufforderung angezeigt. Findet sich für den spezifizierten Target-Kern ein entsprechender Eintrag in der Datenbank, so werden die Parameterwerte übernommen. Anderenfalls stehen dem Benutzer zwei Möglichkeiten offen, aus denen er eine anhand des nun auf dem Bildschirm erscheinenden Menüs auswählen kann. Zum einen können die Ladungsdichteverteilungsparameter eines zum Target-Kern benachbarten Kerns aus der Datenbank übernommen werden. Hierzu wird ein Menü benachbarter Kerne angezeigt aus dem dann eine Auswahl getroffen werden kann. Zum anderen besteht die Möglichkeit, die Parameter der Ladungsdichteverteilung direkt einzugeben und diese im Anschluß daran als neuen Eintrag in die Datenbank zu übernehmen.

Zum Schluß werden die geänderten Parameter im Fenster **NUCLEUS** ausgegeben.

Charge Distribution

Dieser Punkt des Hauptmenüs erlaubt die Eingabe bzw. Änderung der Parameterwerte der Ladungsdichteverteilung. Nach Auswahl dieses Menüpunktes erscheint ein weiteres Menü, aus dem der Parameter, dessen Wert geändert werden soll, ausgewählt werden kann. Um den Benutzer an die Bedeutung der einzelnen Parameter zu erinnern wird zusätzlich noch die Formel der *β -Parameter-Fermi-Verteilung* angezeigt. Wurde ein Parameterwert gegenüber seinem in der Datenbank abgespeicherten Wert geändert, so wird der Benutzer gefragt, ob er den entsprechenden Eintrag in der Datenbank ändern möchte.

Jede Änderung eines der Parameterwerte wird im Fenster **NUCLEUS** angezeigt.

Electron

Möchte man die das elastisch gestreute Elektron betreffenden Parameterwerte eingeben bzw. ändern, so ist dieser Menüpunkt zu wählen. Die Auswahl führt zu einem weiteren Menü, in dem man sich zwischen der Änderung der Energie oder des Streuwinkels entscheiden muß. Der Streuwinkel kann dabei sowohl als

einzelner Winkel wie auch als Winkelbereich, definiert durch einen Startwinkel, einen Endwinkel und eine Schrittweite, angegeben werden.

Energie und Streuwinkel werden im Fenster **ELECTRON** angezeigt.

Spectrometer

Die Parameter des beim Streuexperiment verwendeten Spektrometers schließlich lassen sich mit Hilfe dieses Menüpunktes modifizieren. Das nach seiner Auswahl auf dem Bildschirm erscheinende Menü, verfügt neben der Möglichkeit auf eine spektrometerbedingte Öffnungswinkelkorrektur ganz zu verzichten, noch über die Möglichkeit, eines der am Institut zur Verfügung stehenden Spektrometer, d.h. entweder das neue QCLAM-Spektrometer oder das 169°-Spektrometer für eine Öffnungswinkelkorrektur auszuwählen. Desweiteren kann durch Eingabe der für den Öffnungswinkel charakteristischen Parameter jedes beliebige andere Spektrometer in eine Öffnungswinkelkorrektur einbezogen werden.

Das Fenster **SPECTROMETER** wird nach einer Änderung des Öffnungswinkels auf den neuesten Stand gebracht.

B Anmerkungen zur Definition des Formfaktors

Literatur