

Analytische Behandlung und numerische Berechnung der Umwandlungsreihen von Radionukliden mit Hilfe von Matrixfunktionen¹

Von Horst Melcher und Ewald Gerth

Eingegangen am 12. 4. 1973

1 Einleitung

Die den Verfassern erst kürzlich bekannt gewordenen Arbeiten von A. BACH [1] und A. ENDLER [2] geben Veranlassung, die in früheren Arbeiten [3], [4], [5] und [6] allgemein angegebene Lösung für Reaktionen 1. Ordnung beliebiger Art auf den Spezialfall einer analytischen Behandlung der Umwandlungsreihen von Radionukliden anzuwenden, die beispielsweise in den sogenannten „natürlichen Zerfallsfamilien“ oder bei den Spaltprodukten im Reaktor auftreten.

Für die Behandlung der Reaktionsprobleme - einschließlich der Rück- und Nebenreaktionen sowie von Seitenzweigen - in den verschiedensten Wissenschaftsgebieten (Chemie, Physikalische Chemie, Biologie, Kinetik, Kernphysik, Photophysik, Statistik u.a.m.) erweist sich die Anwendung des Matrizenformalismus als besonders geeignet. Die auf der Grundlage des Matrizenformalismus entwickelten Rechenprogramme sind vielseitig einsetzbar. In der vorliegenden Arbeit werden einige Berechnungsbeispiele für Umwandlungsreihen bei spontanen Kernumwandlungen angegeben.

Von A. BACH [1] wurden Matrizen nicht im Lösungsverfahren, sondern lediglich als Ordnungsschema angewendet, mit dem die auf konventionelle Weise gewonnenen Lösungen des Reaktionssystems systematisiert wurden. Das von A. ENDLER [2] angegebene Rechenprogramm für die Xenonvergiftung eines Reaktors verwendet ausschließlich Näherungslösungen ohne Benutzung einer Matrixdarstellung. Analog zu den im folgenden dargestellten Beispielen kann aber eine exakte Lösung mit Hilfe der Matrizen-Rechenprogramme gegeben werden.

In der vorliegenden Arbeit wird das allgemeine Umwandlungsproblem durch eine Differentialgleichung in Matrizenform beschrieben. Die Lösung ergibt sich als Matrix-Exponentialfunktion (NEUMANNsche Reihe), die aus der iterativen Lösung der äquivalenten Integralgleichung folgt. Hierbei spielen im Unterschied zur LAPLACE-Transformation Eigenwertprobleme keine Rolle, was sich u.a. für numerische Berechnungen als vorteilhaft erweist.

2 Gesetz einer unverzweigten Umwandlungsreihe in Matrixdarstellung

Die einzelnen Glieder der Konzentration c_i einer Umwandlungsreihe sind in Form einer Kette angeordnet, bei der jeweils ein Glied mit den beiden benachbarten zusammenhängt (Bild 1).

¹Abstract: www.ewald-gerth.de/44abs.pdf – attached at the end of this article (page 37).

In der geordneten Aufeinanderfolge der einzelnen Nuklidarten gibt es nur Übergänge zwischen benachbarten Zuständen. Da es sich um Folgereaktionen handelt, sind die Übergänge einseitig gerichtet. Eine derartige Folge von Zuständen eines Systems, bei der die Übergänge zwischen den Zuständen zwar der Reihe nach streng geordnet sind, im Einzelfall aber zufällig (stochastisch) erfolgen, erfüllt die Bedingungen einer MARKOWschen Kette.

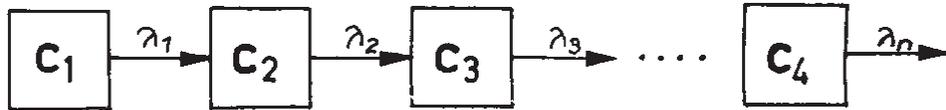


Bild 1: Folgereaktionen als MARKOW-Kette

Die Theorie der MARKOWschen Ketten liefert die Wahrscheinlichkeiten für die zufälligen Einzelprozesse. Für die Gesamtheit aller unabhängig voneinander nach der gleichen Kette verlaufenden Prozesse kann man aus den Wahrscheinlichkeiten Mittelwerte, d.h. „Erwartungswerte“, herleiten. Die Nuklidkonzentrationen sind derartige Erwartungswerte, mit denen im folgenden gerechnet werden soll.

Aus dem Reaktionsschema Bild 1 entnimmt man folgendes System linearer Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned}
 \frac{dc_1}{dt} &= -\lambda_1 c_1 \\
 \frac{dc_2}{dt} &= \lambda_1 c_1 - \lambda_2 c_2 \\
 \frac{dc_3}{dt} &= \lambda_2 c_2 - \lambda_3 c_3 \\
 &\dots\dots\dots \\
 \frac{dc_n}{dt} &= \lambda_{n-1} c_{n-1} - \lambda_n c_n
 \end{aligned} \tag{1}$$

Das System läßt sich zu einer Matrixengleichung zusammenfassen:

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = \mathbf{L}\mathbf{c} \tag{2}$$

Hierin ist \mathbf{c} der Vektor der Nuklidkonzentrationen

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}, \tag{3}$$

und \mathbf{L} ist die konstante quadratische Matrix der Übergangskoeffizienten

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & -\lambda_4 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda_n \end{pmatrix}. \tag{4}$$

\mathbf{L} stellt eine untere Dreiecksmatrix dar.

Die charakteristische Determinante mit der Einheitsmatrix $\mathbf{1}$

$$|\mathbf{1}s - \mathbf{L}| = 0 \quad (5)$$

liefert als Lösung die Eigenwerte $s_1 = -\lambda_1, s_2 = -\lambda_2, \dots, s_n = -\lambda_n$, die mit den Elementen der Hauptdiagonale der Matrix übereinstimmen. Die Lösung nach dem allgemein bekannten Verfahren über Eigenwerte und Eigenvektoren ist aber nur anwendbar, wenn alle Eigenwerte reell und verschieden sind. Als Lösung von (2) erhält man – siehe GANTMACHER [8] –

$$\mathbf{c}(t) = e^{\mathbf{L}t} \mathbf{c}(0) \quad (6)$$

Das ist das allgemeine Umwandlungsgesetz für Radionuklide, worin das einfache Umwandlungsgesetz für eine einzige instabile Kernart als Spezialfall enthalten ist,

$$c(t) = e^{-\lambda t} c(0). \quad (7)$$

Dieses Gesetz (7) gilt z.B., wenn das Folgeprodukt nicht weiter zerfällt, d.h. stabil ist, oder wenn c die Konzentration der Muttersubstanz ist, die keinerlei Zuflüsse hat und die in der Reihe der Umwandlungsfolge allein betrachtet wird.

3 Lösungsverfahren mit Hilfe der Laplace-Transformation

Ein Auffinden der Lösung von (2) ist mit Hilfe der LAPLACE-Transformation möglich, die generell zur Lösung eines linearen Differentialgleichungssystems geeignet ist. In der Ausgangsgleichung

$$\frac{d}{dt} \mathbf{c} = \mathbf{L} \mathbf{c}(t) \quad (8)$$

wird \mathbf{L} zunächst als konstant vorausgesetzt. Diese Voraussetzung trifft für die Umwandlungsreihen, in denen ja die „Umwandlungskonstanten“ (Übergangskoeffizienten) konstant sind, zu. Die zeitliche Abhängigkeit $\mathbf{L}(t)$ hingegen spielt eine Rolle bei der Erzeugung „künstlicher“ Radionuklide im Neutronenstrom eines Reaktors (siehe unter 5.).

Die LAPLACE-Transformation ermöglicht eine einfache Rechnung im Bildraum. Aus der Differentiation einer Funktion im Originalraum wird bekanntlich eine Multiplikation mit der unabhängigen komplexen Variablen s im Bildraum.

Man erhält dann

$$s \mathbf{c}(s) - \mathbf{c}(0) = \mathbf{L} \mathbf{c}(s). \quad (9)$$

Hierin ist $\mathbf{c}(0)$ die Integrationskonstante, die sofort die Anfangsbedingung liefert und nicht erst aus einem Bestimmungs-Gleichungssystem ermittelt zu werden braucht. Die Anfangsbedingungen sind die Konzentrationen der einzelnen Nuklide in den verschiedenen Zuständen (Stufen), die durch den Vektor $\mathbf{c}(0)$ gegeben sind.

Die Integraltransformation gestattet es, die konstante Matrix vorzuziehen. Aus der Funktion im Originalraum wird durch die Transformation eine entsprechende Funktion im Bildraum. Durch Umstellen und Ausklammern gelangt man von (9) zur linearen Vektortransformation im Bildraum

$$(\mathbf{1}s - \mathbf{L}) \mathbf{c}(s) = \mathbf{c}(0). \quad (10)$$

Der Vektor, der sich im Bildraum ergibt, wird mit Hilfe der charakteristischen Matrix in den Anfangsvektor transformiert. Die Gleichung wird invertiert:

$$\mathbf{c}(s) = (\mathbf{1}s - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{c}(0). \quad (10a)$$

Nun ergibt sich aus dem Anfangsvektor der Endvektor im Bildraum. Die inverse charakteristische Matrix, die von s abhängt, ist die Reaktionsmatrix $\mathbf{R}(s)$ im Bildraum der Transformation. Um die Gleichung im Originalraum zu erhalten, muß man zurücktransformieren:

$$\mathbf{c}(t) = \mathbf{R}(t) \mathbf{c}(0) \quad (11)$$

Damit ist die Grundgleichung (11) – eine lineare Vektortransformation – gewonnen, um eine Umwandlungskette zu beschreiben. Hierin ist $\mathbf{R}(t)$ die zeitabhängige Reaktionsmatrix, durch die der Vektor der Anfangszustände $\mathbf{c}(0)$ (Ausgangsverteilung) in den Vektor der Endzustände $\mathbf{c}(t)$ der einzelnen Glieder (Stufen) nach Ablauf der Reaktionszeit t transformiert wird.

Um die analytische Struktur der Reaktionsmatrix zu untersuchen, hat man die inverse charakteristische Matrix $(\mathbf{1}s - \mathbf{L})^{-1}$ aus dem Bildraum in den Originalraum der LAPLACE-Transformation zurückzutransformieren. Das kann für jedes Matrixelement einzeln durchgeführt werden. Daß sämtliche Elemente einzeln berechenbar sind, kann durchaus als Vorteil der LAPLACE-Transformation betrachtet werden.

Die LAPLACE-Transformation macht die Lösung von Eigenwertproblemen erforderlich, was mitunter einige Mühe bereitet. Diese gewisse Schwerfälligkeit der LAPLACE-Transformation umgeht man, indem das vorliegende Umwandlungsproblem mit Hilfe einer Matrix-Exponentialfunktion (NEUMANNsche Reihe) behandelt wird (siehe [3, 5, 6]), wobei eine Unterscheidung der Fälle (12) und (13) nicht vorgenommen zu werden braucht.

Bei der Berechnung der inversen charakteristischen Matrix treten in den Bildfunktionen Polstellen auf, die den Eigenwerten entsprechen. Darüber hinaus ergeben sich aber noch Differenzen der einzelnen Koeffizienten. Hierbei muß man voraussetzen, daß alle Koeffizienten verschieden sind. Wenn nämlich ihre Differenz Null ergibt, wird die charakteristische Matrix singulär und ist mithin nicht invertierbar.

Die Elemente der Reaktionsmatrix für untereinander verschiedene Werte λ_i sind durch folgende analytische Ausdrücke gegeben:

$$R_{ik}(t) = \begin{cases} \left(\prod_{h=i}^k \lambda_h \right) \sum_{j=i}^k \frac{e^{-\lambda_j t}}{\prod_{\substack{l=i \\ j \neq l}}^k (\lambda_l - \lambda_j)} & \text{für } i > k \\ e^{-\lambda_i t} & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i < k. \end{cases} \quad (12)$$

Im Falle gleicher Koeffizienten $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \dots = \lambda$ ergibt sich

$$R_{ik}(t) = \begin{cases} \frac{1}{(i-k)!} (\lambda t)^{i-k} e^{-\lambda t} & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i < k. \end{cases} \quad (13)$$

Diese Funktionen (13) wurden auf Grund von Wahrscheinlichkeitsüberlegungen für die Transmission von Strahlungen durch Materieschichten verwendet [4]. Neben diesem Spezialfall gleicher Übergangskoeffizienten wurden dort [4, S. 152] bereits auch einige Betrachtungen für den allgemeineren Fall unterschiedlicher Werte der Übergangskoeffizienten angestellt. Bei der Analyse und Deutung der Dosis-Effekt-Kurven [7] wurde bisher ausschließlich der Spezialfall gleicher Übergangskoeffizienten betrachtet, so daß es angezeigt erscheint, diese Umwandlungs- bzw. Überlebenskurven auch unter der Voraussetzung unterschiedlicher Umwandlungskoeffizienten darzustellen. Damit würden dann die bisherigen häufig gekünstelten Ansätze entfallen.

Das nachstehend dargestellte Verfahren wurde in [3] entwickelt. Wegen seiner Allgemeinheit ist es für die Beschreibung von beliebigen Reaktionen 1. Ordnung geeignet. Bei entsprechender Spezialisierung ist es demzufolge auch für die Darstellung und für die numerische Berechnung von Umwandlungsreihen radioaktiver Nuklide vorteilhaft anwendbar.

4 Lösung durch Reihenentwicklung der Matrix-Exponentialfunktion

Ein wesentlich übersichtlicheres Lösungsverfahren als die LAPLACE-Transformation, das man auch für die numerische Behandlung aller möglichen Spezialfälle gleichermaßen gut anwenden kann, ist durch die Reihenentwicklung der Matrix-Exponentialfunktion gegeben.

Die Integration von Gleichung (2) ergibt

$$\mathbf{c}(t) = \mathbf{c}(0) + \int_0^t \mathbf{L}\mathbf{c}(\tau) \, d\tau. \quad (14)$$

Hierin ist $\mathbf{c}(0)$ der Vektor der Anfangskonzentration zum Zeitpunkt $t = 0$.

Die Gleichung (14) ist eine VOLTERRASche Integralgleichung mit konstanter und somit zweifach ausgearteter Kernmatrix. Durch Iteration mit dem ersten Näherungsansatz $\mathbf{c}(t) = \mathbf{c}(0)$ erhält man

$$\mathbf{c}(t) = \mathbf{c}(0) + \mathbf{L}t\mathbf{c}(0) = (\mathbf{1} + \mathbf{L}t)\mathbf{c}(0). \quad (15)$$

Durch wiederholtes Einsetzen ergibt sich schließlich eine NEUMANNsche Reihe

$$\mathbf{c}(t) = \left(\mathbf{1} + \mathbf{L}t + \frac{1}{2!}\mathbf{L}^2t^2 + \frac{1}{3!}\mathbf{L}^3t^3 + \dots \right) \mathbf{c}(0). \quad (16)$$

Hierin ist der rechtsseitige Klammerausdruck von (16)

$$e^{\mathbf{L}t} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{L}t)^k}{k!} \quad (17)$$

die Reaktionsmatrix als Resolvente der Integralgleichung (14) in Form einer Matrix-Exponentialfunktion.

Somit kann das Umwandlungsgesetz der Radionuklide gemäß Gl. (6) durch

$$\mathbf{c}(t) = e^{\mathbf{L}t}\mathbf{c}(0) \quad (18)$$

dargestellt werden. Es gilt also ganz allgemein eine Exponentialform für die Umwandlungsreihen – und nicht nur für einen einzelnen Übergang –, wenn man die Verallgemeinerung der Matrix-Exponentialfunktion einführt.

Durch Gleichung (18) ist eine bessere Übersicht über alle Umwandlungsprozesse gegeben. Die Koeffizientenmatrix \mathbf{L} enthält alle wechselseitigen Beziehungen zwischen den Komponenten der Umwandlungsreihe.

Man kann auch ohne weiteres von der eingangs erwähnten Kettenstruktur (Bild 1) der Umwandlungsreihen abgehen und Verzweigungen, zusätzliche Quellen und dergleichen zulassen. Auch von außen induzierte Umwandlungen – beispielsweise infolge Neutronenbestrahlung – lassen sich mit dieser Darstellung erfassen.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß man mit Hilfe der Resolventenmatrix in der Lage ist, die Lösung in anderer Weise zu finden, als es bisher üblich war. Hierbei spielen nämlich Eigenwertprobleme - vgl. LAPLACE-Transformation - überhaupt keine Rolle. Man braucht nur die entsprechende Reihe anzusetzen und kann eine beliebige Koeffizientenmatrix

verwenden. Um die Lösung numerisch zu erhalten, hat man lediglich die Reihe für einen Rechenautomaten zu programmieren. Die Näherungsverfahren, die man für die Bestimmung der Nullstellen von Polynomen anwendet, sind hier nicht mehr erforderlich: Jedes Eigenwertproblem ist gegenstandslos, also auch dasjenige für gleiche Übergangskoeffizienten.

5 Induzierte Aktivität in Kernumwandlungsreihen

Bei induzierten Kernumwandlungen, z.B. durch Neutronenbestrahlung, deren Fluß zeitlichen Schwankungen unterliegt, sind auch die Übergangskoeffizienten zeitabhängig. Diese Koeffizienten ν_i ergeben sich aus dem Wirkungsquerschnitt σ_i des i -ten Nuklids der n betrachteten Komponenten des Reaktionssystems und der Strahlungsflußdichte Φ zu

$$\nu_i = \sigma_i \Phi(t). \quad (19)$$

Da für jedes Nuklid ein Wirkungsquerschnitt für den Neutroneneinfang existiert, der energieabhängig ist, läßt sich die Gesamtheit aller Wirkungsquerschnitte zu einer Matrix \mathbf{S} zusammenfassen:

$$\mathbf{S}\Phi(t) \quad (20)$$

Zerfalls- und Aktivierungsreaktionen können somit in einem gemeinsamen System dargestellt werden. Die Koeffizientenmatrix $\mathbf{K}(t)$ ergibt sich als Summe der Zerfalls-Koeffizientenmatrix \mathbf{L} und der Aktivierungs-Koeffizientenmatrix $\mathbf{S}\Phi(t)$ zu

$$\mathbf{K}(t) = \mathbf{S}\Phi(t) + \mathbf{L}. \quad (21)$$

Die Reaktionsmatrix läßt sich ebenfalls durch eine NEUMANNsche Reihe mit einfach ausgearteter Kernmatrix darstellen:

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{1} + \int_0^t \mathbf{K}(\tau) d\tau + \int_0^t \mathbf{K}(\tau) \int_0^\tau \mathbf{K}(\tau') d\tau' d\tau + \dots \quad (22)$$

Wenn im speziellen Fall der Neutronenfluß während der Dauer der Bestrahlung konstant ist, gilt

$$\mathbf{R}(t_1) = e^{\mathbf{K}t} = e^{(\mathbf{S}\Phi + \mathbf{L})t}. \quad (23)$$

Die Lösung ergibt sich jeweils durch eine Transformation des Vektors der Nuklidkonzentrationen. Es sind auch mehrere sukzessive Transformationen möglich. Wenn in zwei aneinander anschließenden Reaktionszeiten t_1 und t_2 unterschiedliche Reaktionsmatrizen \mathbf{R}_1 und \mathbf{R}_2 gelten, wird der Anfangsvektor zunächst in

$$\mathbf{c}(t_1) = \mathbf{R}_1(t_1) \mathbf{c}(0) \quad (24)$$

und danach in

$$\mathbf{c}(t_1 + t_2) = \mathbf{R}_2(t_2) \mathbf{c}(t_1) = \mathbf{R}_2(t_2) \mathbf{R}_1(t_1) \mathbf{c}(0) \quad (25)$$

mit der resultierenden Reaktionsmatrix

$$\mathbf{R}_{1,2}(t_1 + t_2) = \mathbf{R}_2(t_2) \mathbf{R}_1(t_1) \quad (26)$$

als Produkt beider Reaktionsmatrizen transformiert.

Die Vertauschung der Reihenfolge beider Reaktionen führt im allgemeinen zu unterschiedlichen Reaktionsergebnissen, da die Vertauschungsrelation der Matrizenmultiplikation nicht erfüllt ist,

$$\mathbf{R}_2\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_1\mathbf{R}_2 \neq \mathbf{O}, \quad (27)$$

wobei \mathbf{O} die Nullmatrix ist.

Damit gilt auch

$$e^{\mathbf{L}t_2} e^{\mathbf{K}t_1} \neq e^{\mathbf{K}t_1} e^{\mathbf{L}t_2}. \quad (28)$$

Bei einer zeitlich veränderlichen Bestrahlung kann man die Reaktion in einzelne Abschnitte zerlegen:

$$\mathbf{R}_{1,2,\dots,m}\left(\sum_i t_i\right) = \mathbf{R}(t_m) \cdots \mathbf{R}(t_2) \mathbf{R}(t_1). \quad (29)$$

Handelt es sich bei den t_i um infinitesimale Zeitintervalle $\Delta\tau_i$, so gilt näherungsweise

$$\mathbf{R}(\Delta\tau_i) \approx e^{\mathbf{K}(\tau_i)\Delta\tau_i} \approx \mathbf{1} + \mathbf{K}(\tau_i)\Delta\tau_i, \quad (30)$$

wenn man die Reihe der Matrix-Exponentialfunktion nach dem linearen Glied abbricht. Die gesamte Reaktionsmatrix ergibt sich im Grenzfall einer ausgezeichneten Zerlegungsfolge mit $t_{max} \rightarrow 0$ und $m \rightarrow \infty$ zu

$$\mathbf{R}(t) = \int_0^t e^{\mathbf{K}(\tau)d\tau} = \int_0^t (\mathbf{1} + \mathbf{K}(\tau)d\tau) \quad (31)$$

als VOLTERRASches Produktintegral.

Die Resolventenmatrix als NEUMANNsche Reihe und das VOLTERRASche Produktintegral sind also äquivalent. Für $\mathbf{K}(\tau) = \mathbf{Const}$ liefert das Produktintegral wieder die Matrix-Exponentialfunktion:

$$\mathbf{R}(t) = e^{\mathbf{K}(t)}. \quad (32)$$

6 Aktivität und Zählrate bei Umwandlungsreihen

Die Aktivität A ist durch die in der Zeiteinheit erfolgenden Umwandlungen von N Atomkernen gegeben,

$$A = N\lambda; \quad (32a)$$

hierin ist λ die Umwandlungskonstante, die mit der Halbwertszeit T eines gegebenen Radionuklids durch

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T} \quad (33)$$

zusammenhängt.

Die Gesamt- oder Teilaktivitäten müssen innerhalb der Umwandlungsreihen durchaus nicht immer mit Notwendigkeit in allen Zeitabschnitten geringer werden, siehe Bild 4 und Bild 5. Die Beziehung für die Aktivität („Zerfallsgesetz“)

$$A = \lambda N = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = A_0 e^{-\lambda t} \quad (34)$$

gilt nur für den speziellen Fall, wenn nämlich ein Radionuklid in ein stabiles Nuklid zerfällt, bzw. wenn die Zerfälle aller Folgeprodukte nicht mitgezählt werden.

Es ist also allgemeiner, von Umwandlungen anstatt von Zerfällen zu sprechen. Das Anwachsen von Gesamt- oder Teilaktivität in den Ketten aufeinander folgender spontaner Kernprozesse wird durch den Begriff „Umwandlung“ besser erfaßt als durch „Zerfall“. Die Zahl der je Zeiteinheit erfolgenden Umwandlungen ist nicht in allen Fällen gleich der Zahl der in dieser Zeiteinheit emittierten Korpuskeln plus Quanten. (Hierbei steht Korpuskel für Teilchen mit endlicher Ruhmasse und Quant für Teilchen mit der Ruhmasse Null.) Bei der über die gemessene Zählrate z zu ermittelnden Aktivität hat man den Wirkungsgrad $W \leq 1$ der Meßanordnung zu berücksichtigen, $A = z/W$.

Für die spezifische Aktivität a gilt entsprechend Gl. (32a)

$$a = \lambda c. \quad (35)$$

Die Gesamtaktivität aller n Komponenten des Systems ergibt sich als die Summe

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i N_i; \quad (36)$$

entsprechend gilt für die gesamte spezifische Aktivität

$$a = \sum_{i=1}^n \lambda_i c_i. \quad (37)$$

Man erhält diese Summe auch, indem man den Spaltenvektor der Nuklidkonzentrationen \mathbf{c} mit dem Zeilenvektor der Zerfallskonstanten

$$\mathbf{l} = (\lambda_1 \ \lambda_2 \ \lambda_3 \ \cdots \ \lambda_n) \quad (38)$$

multipliziert, nämlich als Skalarprodukt

$$a = \mathbf{l} \mathbf{c}. \quad (39)$$

Zur Berechnung der Aktivitäten der einzelnen Komponenten transformiert man \mathbf{c} mit der Diagonalmatrix der Umwandlungskonstanten

$$\mathbf{D}_\lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}. \quad (40)$$

und erhält den Spaltenvektor der spezifischen Aktivitäten

$$\mathbf{a} = \mathbf{D}_\lambda \mathbf{c}. \quad (41)$$

Die Gleichungen (39) und (41) gelten nur für geradlinige Ketten ohne Verzweigungen.

Im Falle von Verzweigungen ist für Gl. (38) der „Eigenwert-Zeilenvektor“

$$\mathbf{l}_s = -(s_1 \ s_2 \ s_3 \ \cdots \ s_n)$$

und für Gl. (40) die „Eigenwert-Diagonalmatrix“ einzusetzen:

$$\mathbf{D}_s = \begin{pmatrix} -s_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -s_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -s_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -s_n \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Die Darstellung

$$\mathbf{a} = \mathbf{D}_s \mathbf{c} \quad (43)$$

gestattet zudem die linksseitige Multiplikation mit einem weiteren Zeilenvektor \mathbf{w} , in dem die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors, die Energieausbeute oder die Multiplizität enthalten sein können.

So ist beispielsweise die Zählrate z darstellbar durch

$$z = \mathbf{w} \mathbf{a} \quad (44)$$

$$z(t) = \mathbf{w} \mathbf{D}_s e^{\mathbf{L}t} \mathbf{c}(0). \quad (45)$$

Die Zählrate ist also eine skalare Zeitfunktion. Wegen des Informationsverlustes bei der Skalarmultiplikation kann man von der Zählrate aus nicht ohne weiteres auf die Komponenten-Zusammensetzung schließen. Zur Identifizierung der Komponenten bedarf es anderer physikalischer oder chemischer Methoden.

7 Numerische Lösung für zwei Beispiele

Die numerische Lösung der Darstellung der Nuklidkonzentrationen und beliebiger Skalarprodukte (Aktivität, Zählrate usw.) als Zeitfunktionen wurde mit Hilfe eines Programmes für den polnischen Digitalrechenautomaten Odra 1204 durchgeführt, das aber hier nicht abgedruckt werden soll.

In den Rechner werden zunächst die Koeffizientenmatrix und die Schrittweite eingegeben. Hieraus berechnet er die Resolventenmatrix für das Zeitintervall Δt . Der einzugebende Anfangsvektor wird dann der Schrittzahl entsprechend oft mit der Reaktionsmatrix transformiert und jeweils ausgedruckt. Der Spaltenvektor wird mit beliebig vielen Zeilenvektoren skalar multipliziert, und die Skalarprodukte werden ebenfalls ausgedruckt.

Für die Berechnung eines gegebenen Systems besteht die Aufgabe darin, an Hand des Reaktionsschemas das Differentialgleichungssystem aufzustellen und daraus die Koeffizientenmatrix zu entnehmen. Sind die Koeffizienten numerisch bekannt, so kann man die Matrix als Datenstreifen dem Rechner eingeben. Entsprechendes gilt auch für die Vektoren. Das Speichervermögen des Rechenautomaten reicht zur Berechnung von Matrizen bis zur 31. Ordnung aus. Eine zu berechnende Umwandlungsreihe kann also maximal 31 Komponenten² enthalten.

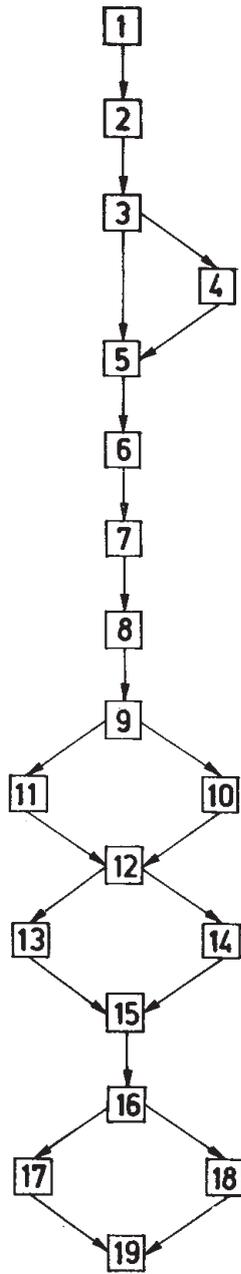
7.1 Uranreihe

Das Schema der Uranreihe für ²³⁸U ist im Bild 2 dargestellt. In das Differentialgleichungssystem dieser Reihe (Bild 3) werden die aus Bild 2 zu entnehmenden Werte eingesetzt, wodurch sich die \mathbf{L} -Matrix für den Datenstreifen ergibt. Hierbei wurden die Halbwertszeiten als fehlerfrei betrachtet, so daß die Stellenzahl für die Umwandlungskonstanten mit sechs Dezimalstellen gewählt wurde, nicht zuletzt deshalb, um auch einen möglichen Rundungsfehler des Rechenautomaten zu kontrollieren, da die Umwandlungskonstanten über 21 Zehnerpotenzen variieren (siehe Bild 3).

Unter der Voraussetzung, daß sich bis zum ²²²Rn ein radioaktives Dauer Gleichgewicht eingestellt hat und keine Nuklide der Folgeprodukte vorhanden sind, wurde als spezielles Beispiel für diese Reihe der Aktivitätsverlauf von ²²²Rn mit seinen Folgeprodukten ausgedruckt.

²Anmerkung bei der Textbearbeitung des vorliegenden Artikels im Jahre 2008:

Die Angabe der Leistungsfähigkeit des Rechners ODRA 1204 bezieht sich auf den damaligen Stand der Rechentechnik - also etwa von 1970. In der nachfolgenden Zeit nahm die Computertechnik einen enormen Aufschwung, welcher u. a. die Organisation der Datenverarbeitung, die Speicherkapazität, die Rechengeschwindigkeit und die graphische Darstellung betrifft. Somit entfällt die hier angegebene Begrenzung der Matrix auf den Rang 31. Es ist daher ohne weiteres möglich, das gesamte Nukleidschema aller radioaktiven Übergänge in einer „globalen Reaktionsmatrix“ vom Rang 260 (maximale Anzahl der Nukleonen eines Atomkerns bis zu den Transuranen mit allen Isotopen) unterzubringen und die Reaktionsmatrix für beliebige Übergänge mit den entsprechenden Untermatrizen simultan zu berechnen.



Nummer	Zerfallsart	Nuklid Bezeichnung alt neu	T_H	$\lambda = \frac{\ln 2}{T_H}$ in s	Zehner- potenz
1	α	UI $^{238}_{92}\text{U}$	$4,51 \cdot 10^9 a$	0,487348	-17
2	β	UX ₁ $^{234}_{90}\text{Th}$	24,10 d	0,332883	-6
3	β γ	UX ₂ $^{234}_{91}\text{Pa}$	1,18 min	0,979015	-2
4	β	UZ $^{234}_{91}\text{Pa}$	6,75 h	0,285244	-4
5	α	UII $^{234}_{92}\text{U}$	$2,47 \cdot 10^5 a$	0,889854	-13
6	α	Io $^{230}_{90}\text{Th}$	$7,5 \cdot 10^4 a$	0,293059	-12
7	α	Ra $^{226}_{88}\text{Ra}$	1600 a	0,137371	-10
8	α	Rn $^{222}_{86}\text{Rn}$	3,824 d	0,209793	-5
9	α β	RaA $^{218}_{84}\text{Po}$	3,05 min	0,378766	-2
10	β	RaB $^{214}_{82}\text{Pb}$	26,8 min	0,431069	-3
11	α	At $^{218}_{85}\text{At}$	2 s	0,500000	0
12	α β	RaC $^{214}_{83}\text{Bi}$	19,8 min	0,583453	-3
13	α	RaC' $^{214}_{84}\text{Po}$	$1,64 \cdot 10^{-4} s$	0,422648	4
14	β	RaC'' $^{214}_{81}\text{Tl}$	1,32 min	0,875180	-2
15	β	RaD $^{210}_{82}\text{Pb}$	22,3 a	0,985624	-9
16	α β	RaE $^{210}_{83}\text{Bi}$	5,0 d	0,160450	-5
17	α	RaF $^{210}_{84}\text{Po}$	138,4 d	0,579659	-7
18	β	RaE'' $^{210}_{81}\text{Tl}$	4,23 min	0,273106	-2
19		RaG $^{206}_{82}\text{Pb}$	∞	0	

Verteilungswahrscheinlichkeiten:

$$\begin{aligned}
 w_{3,4} &= 0,0015 & w_{3,4}\lambda_3 &= 0,14685225 \cdot 10^{-4} \\
 w_{3,5} &= 0,9985 & w_{3,5}\lambda_3 &= 0,9775464775 \cdot 10^{-2} \\
 w_{9,10} &= 0,9996 & w_{9,10}\lambda_9 &= 0,3786144936 \cdot 10^{-2} \\
 w_{9,11} &= 0,0004 & w_{9,11}\lambda_9 &= 0,1515064 \cdot 10^{-5} \\
 w_{12,13} &= 0,9996 & w_{12,13}\lambda_{12} &= 0,5832196188 \cdot 10^{-3} \\
 w_{12,14} &= 0,0004 & w_{12,14}\lambda_{12} &= 0,2333812 \cdot 10^{-6} \\
 w_{16,17} &= 0,9999995 & w_{16,17}\lambda_{16} &= 0,16044991978 \cdot 10^{-5} \\
 w_{16,18} &= 0,0000005 & w_{16,18}\lambda_{16} &= 0,80225 \cdot 10^{-12}
 \end{aligned}$$

Bild 2: Schema der Umwandlungsreihe des ^{238}U

$$\begin{aligned}
\dot{c}_1 &= -\lambda_1 c_1 \\
\dot{c}_2 &= \lambda_1 c_1 - \lambda_2 c_2 \\
\dot{c}_3 &= \lambda_2 c_2 - \lambda_3 c_3 \\
\dot{c}_4 &= w_{3,4} \lambda_3 c_3 - \lambda_4 c_4 \\
\dot{c}_5 &= w_{3,5} \lambda_3 c_3 + \lambda_4 c_4 - \lambda_5 c_5 \\
\dot{c}_6 &= \lambda_5 c_5 - \lambda_6 c_6 \\
\dot{c}_7 &= \lambda_6 c_6 - \lambda_7 c_7 \\
\dot{c}_8 &= \lambda_7 c_7 - \lambda_8 c_8 \\
\dot{c}_9 &= \lambda_8 c_8 - \lambda_9 c_9 \\
\dot{c}_{10} &= w_{9,10} \lambda_9 c_9 - \lambda_{10} c_{10} \\
\dot{c}_{11} &= w_{9,11} \lambda_9 c_9 - \lambda_{11} c_{11} \\
\dot{c}_{12} &= \lambda_{10} c_{10} + \lambda_{11} c_{11} - \lambda_{12} c_{12} \\
\dot{c}_{13} &= w_{12,13} \lambda_{12} c_{12} - \lambda_{13} c_{13} \\
\dot{c}_{14} &= w_{12,14} \lambda_{12} c_{12} - \lambda_{14} c_{14} \\
\dot{c}_{15} &= \lambda_{13} c_{13} + \lambda_{14} c_{14} - \lambda_{15} c_{15} \\
\dot{c}_{16} &= \lambda_{15} c_{15} - \lambda_{16} c_{16} \\
\dot{c}_{17} &= w_{16,17} \lambda_{16} c_{16} - \lambda_{17} c_{17} \\
\dot{c}_{18} &= w_{16,18} \lambda_{16} c_{16} - \lambda_{18} c_{18} \\
\dot{c}_{19} &= \lambda_{17} c_{17} + \lambda_{18} c_{18} - 0 \cdot c_{19}
\end{aligned}$$

Bild 3: Differentialgleichungssystem der ^{238}U -Reihe

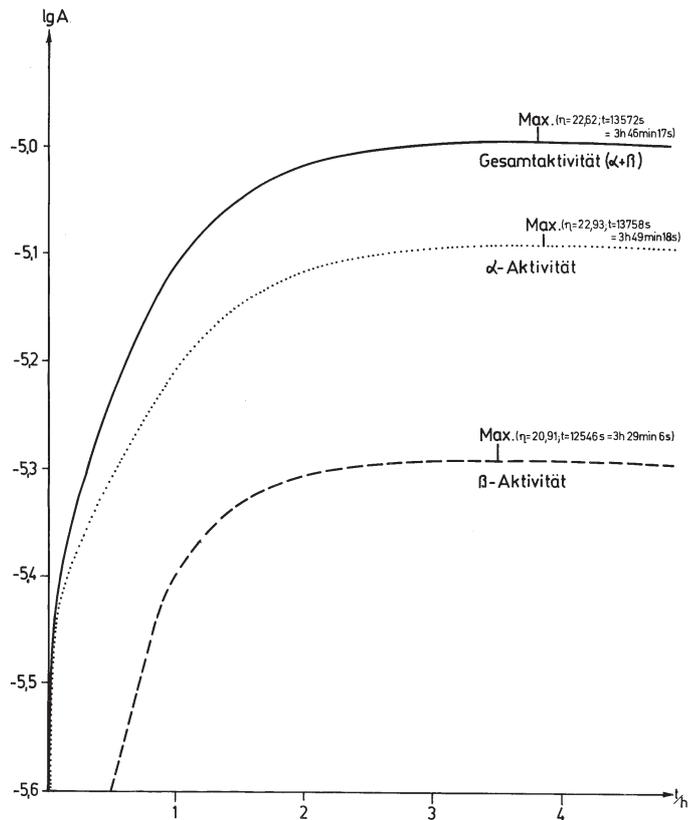


Bild 4: Maxima beim Aktivitätsverlauf von Radon mit seinen Folgeprodukten (η bedeutet Schrittzahl im Rechengang.)

Die zu Beginn der Messung vorliegende Radon-Aktivität klingt ab ($T = 3,824$ d); zugleich aber wächst die Aktivität der Folgeprodukte (RaA \equiv $^{218}_{84}\text{Po}$, RaB \equiv $^{214}_{82}\text{Pb}$ usw.) an. Die resultierende Gesamtaktivität wächst auf Grund der kleineren Halbwertzeiten der Folgeprodukte rasch an, so daß sich schließlich ein Maximum ausbildet.

Verfolgt man gesondert die Kurven für die Alpha- und Beta-Aktivität, so findet man, daß sich zunächst das Maximum für die Beta-Aktivität bei $t = 3$ h 29 min 6 s, sodann das Maximum für die Gesamtkurve (Alpha- plus Beta-Aktivität bei $t = 3$ h 46 min 12 s und schließlich das Maximum für die Alpha-Aktivität bei $t = 3$ h 49 min 18 s ausbildet (Bild 4). Nach dem Überschreiten des Maximums klingt die Gesamtaktivität zunächst über einen längeren Zeitraum (etwa) mit der Halbwertzeit des vergleichsweise längstlebigen Nuklids ab (Bild 5).

Das Maximum der Gesamtaktivität für die Rn-Umwandlung läßt sich z.B. in Praktikumsversuchen³ experimentell bestätigen, allerdings nicht mit der hier angegebenen Genauigkeit im Sekundenbereich. Die Summe aller Komponenten müßte in allen Umwandlungsstadien konstant bleiben. Das Rechenergebnis, daß diese Summe (Bild 5) dennoch mit der Zeit kleiner wird, ist auf den Rundungsfehler im Rechenautomaten zurückzuführen.

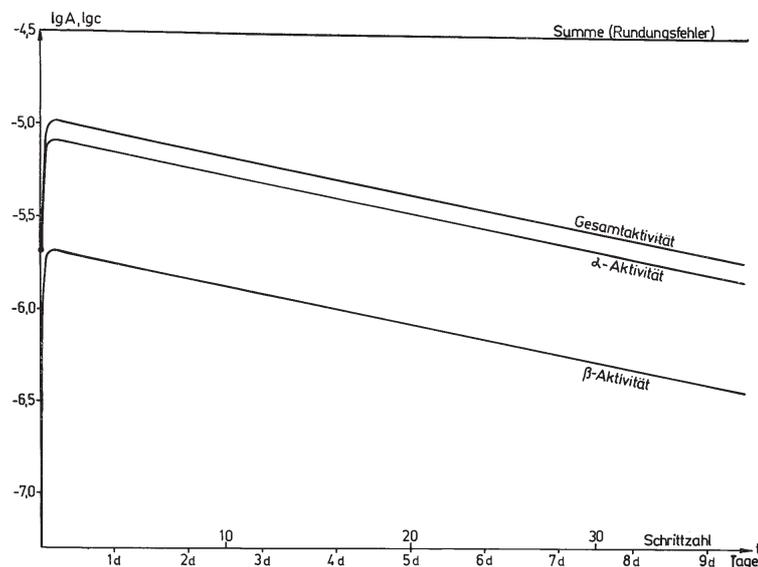


Bild 5: Aktivitätsverlauf von Radon mit seinen Folgeprodukten

7.2 Umwandlung von Gold in Quecksilber

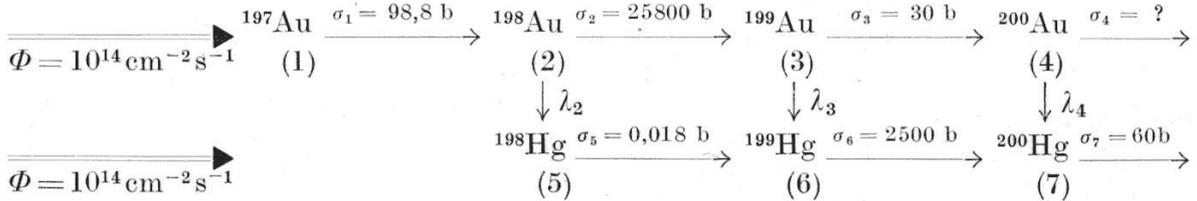
Setzt man Gold, von dem nur ein einziges Isotop, nämlich $^{197}_{79}\text{Au}$, stabil vorkommt, einem Neutronenfluß aus, so wird $^{198}_{79}\text{Au}$ erzeugt, das sich in das stabile $^{198}_{80}\text{Hg}$ umwandelt. Während der Einwirkung des Neutronenstromes auf das Goldtarget, in dem zur Zeit $t = 0$ nur $^{197}_{79}\text{Au}$ -Kerne vorhanden sind, werden schließlich auch die folgenden Umwandlungsprodukte $^{198}_{79}\text{Au}$, $^{199}_{79}\text{Au}$, $^{200}_{79}\text{Au}$ usw. sowie die stabilen Hg-Isotope $^{198}_{80}\text{Hg}$, $^{199}_{80}\text{Hg}$, $^{200}_{80}\text{Hg}$, $^{201}_{80}\text{Hg}$ entstehen, die - je nach Dauer der Bestrahlung - ebenfalls der Neutroneneinwirkung unterliegen, so daß u.U. auch radioaktive Hg-Isotope entstehen können.

³Horst Melcher: Handbuch der experimentellen Schulphysik Band 10, Zweiter Teil: Kernphysik, S. 95–394. Aulis Verlag Deubner & Co KG · Köln · 1969

Die entstehenden Nuklidmengen hängen - außer von der Bestrahlungsdauer - von der Neutronenflußdichte Φ und von den Wirkungs- bzw. Einfangquerschnitten σ_i ab, die Funktionen der Neutronenenergie sind.

Das Reaktionsschema und das Differentialgleichungssystem der Aktivierung von Gold sowie die Umwandlung in Quecksilber sind im Bild 6 dargestellt.

Goldumwandlung durch Neutronenbeschuß



Differentialgleichungssystem

$$\begin{array}{l}
 \dot{c}_1 = -\sigma_1 \Phi c_1 \\
 \dot{c}_2 = \sigma_1 \Phi c_1 - (\sigma_2 \Phi + \lambda_2) c_2 \\
 \dot{c}_3 = \sigma_2 \Phi c_2 - (\sigma_3 \Phi + \lambda_3) c_3 \\
 \dot{c}_4 = \sigma_3 \Phi c_3 - \lambda_4 c_4 \\
 \dot{c}_5 = \lambda_2 c_2 - \sigma_5 \Phi c_5 \\
 \dot{c}_6 = \lambda_3 c_3 - \sigma_6 \Phi c_6 \\
 \dot{c}_7 = \lambda_4 c_4 - \sigma_7 \Phi c_7
 \end{array}$$

Bild 6: Reaktionsschema und Differentialgleichungssystem für die Umwandlung von Gold in Quecksilber durch Neutronenbeschuß

Für die Aktivierungsphase gilt bei zeitlich konstantem Neutronenfluß Φ

$$\mathbf{c}(t_a) = e^{(\mathbf{S}\Phi + \mathbf{L})t_a} \mathbf{c}(0) \quad (46)$$

Der Konzentrationsverlauf für die Abklingphase ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \mathbf{c}(t) &= e^{\mathbf{L}t} \mathbf{c}(t_a) \\
 &= e^{\mathbf{L}t} e^{(\mathbf{S}\Phi + \mathbf{L})t_a} \mathbf{c}(0). \quad (47)
 \end{aligned}$$

Die Matrix der Wirkungsquerschnitte hat die Gestalt

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -\sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sigma_1 & -\sigma_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & -\sigma_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 & -\sigma_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_4 & -\sigma_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_5 & -\sigma_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_6 & -\sigma_7 \end{pmatrix}. \quad (48)$$

Für die Matrix der Umwandlungskonstanten gilt

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_1 & 0 & 0 & -\lambda_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Der dem polnischen Rechenautomaten Odra 1204 eingegebene Datenstreifen berücksichtigt folgende Werte:

$$\begin{aligned} \Phi &= 10^{14} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \\ \lambda_1 &= 0; \lambda_2 = 0,297129 \cdot 10^{-5} \text{s}^{-1}; \lambda_3 = 0,254682 \cdot 10^{-5} \text{s}^{-1}; \lambda_4 = 0,238685 \cdot 10^{-5} \text{s}^{-1}; \\ \lambda_5 &= 0; \lambda_5 = 0; \\ \sigma_1 \Phi &= 9,88 \cdot 10^{-9} \text{s}^{-1}; \sigma_2 \Phi = 2,58 \cdot 10^{-6} \text{s}^{-1}; \sigma_3 \Phi = 3 \cdot 10^{-9} \text{s}^{-1}; \end{aligned}$$

σ_4 ist bisher nicht bekannt; in der Rechnung wurde $\sigma_4 = 0$ gesetzt.

Die mit diesen Angaben berechneten Aktivitäts- bzw. Konzentrationsverläufe sind im Bild 7 dargestellt. Man entnimmt dieser Darstellung, daß die Gesamtaktivität sowie die Teilaktivitäten der Gold-Isotope 198, 199 und 200 abklingen, wenn die Aktivierungsphase beendet ist. Während der Abklingphase, die im vorliegenden Fall bei $t = 8,64 \cdot 10^5 \text{s}$ beginnt, hält die Nachbildung der Quecksilber-Isotope durch Zerfall der Gold-Isotope noch weiter an und erreicht für $t_a \rightarrow \infty$ einen Sättigungswert.

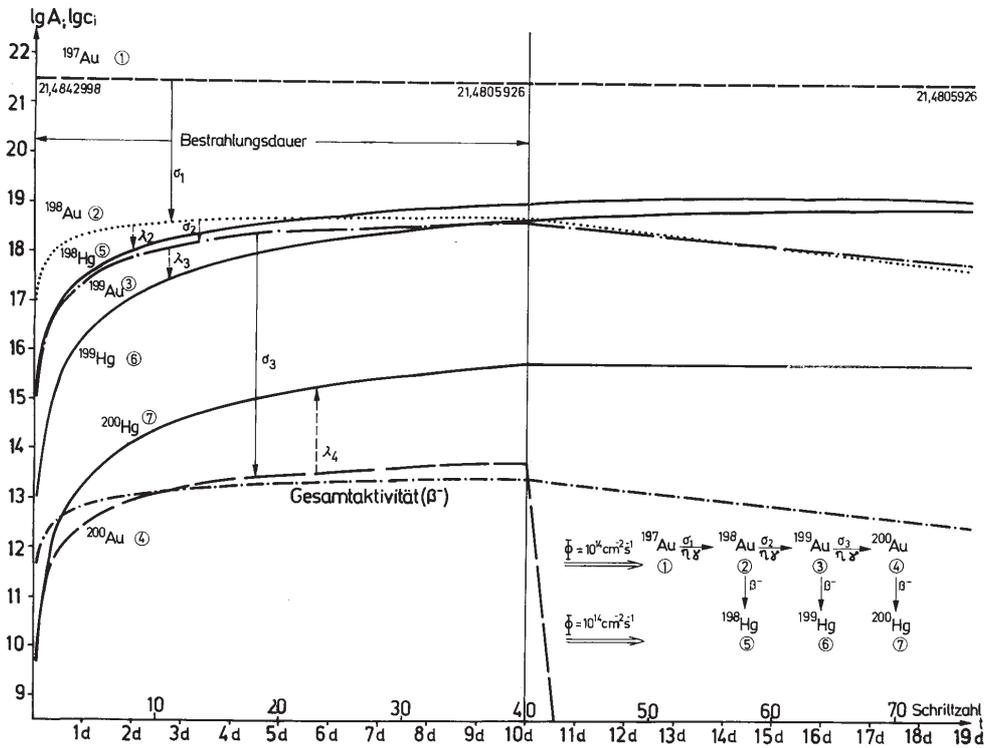


Bild 7: Umwandlung von Gold in Quecksilber durch Neutronenbeschuß (Die eingekreisten Ziffern kennzeichnen die Konzentrationsverläufe der Komponenten. Die oben im Bild angegebene Differenz $21,4842988 - 21,4805926$ ist ein Maß für die umgewandelten ^{197}Au -Kerne.)

Im Bild 8 ist der Verlauf der Gesamtaktivität dargestellt, wenn die Aktivierungsdauer $t_a = 2,88 \cdot 10^5 \text{ s} = 3 \text{ d } 8 \text{ h}$ beträgt. Man erkennt deutlich, daß sich der Kurvenverlauf aus drei (quasi)geraden Teilstücken zusammensetzt. Die Analyse einer solchen Umwandlungskurve würde entsprechend drei verschiedene Halbwertzeiten für die drei Radionuklide liefern.

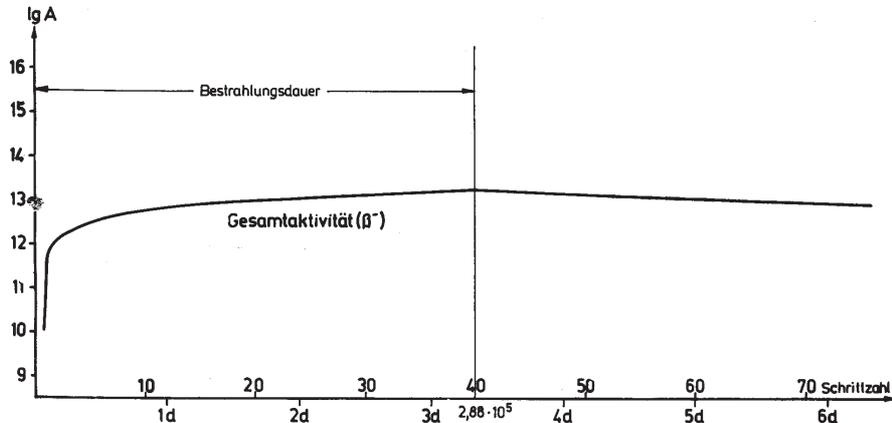


Bild 8: Kurve für die Gesamtaktivität, die sich in drei (quasi)-gerade Teilkurven für drei aktive Gold-Isotope zerlegen bzw. zusammensetzen läßt

Die Verfasser danken den Herren Detlefs, Michaelis und Sujata von der Rechenstelle des Instituts für Schiffbau Rostock (Schiffbauversuchsabteilung Potsdam-Marquardt) für die Unterstützung bei der Aufstellung des Rechenprogramms und die Durchführung der Rechnungen.

Literatur

- [1] *Bach, A.*: Die mathematische Beschreibung der Umwandlung von Nukliden. Atomkernenergie **11** (1966) 115 bis 119
- [2] *Endler, A.*: Berechnung des Verlaufes der Xenonvergiftung eines Reaktors mit Hilfe einer digitalen Rechenmaschine. Zentralinstitut für Kernforschung Rossendorf bei Dresden Bericht ZfK - 154 (1968)
- [3] *Gerth, E.*: Analytische Darstellung der Kinetik des Keimaufbaus beim photographischen Prozeß, Habilitationsschrift, TU Dresden 1972
- [4] *Melcher, H.*: Transmission und Absorption. Ein allgemeines Gesetz für ionisierende Strahlungen. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1970
- [5] *Melcher, H. und Gerth, E.*: Behandlung von Strahlungstransportproblemen mit Matrixfunktionen. Wiss. Zeitschr. der Päd. Hochschule Erfurt/Mühlhausen **8** (1972) Heft 1 S. 3 bis 10
- [6] *Melcher, H., und Gerth, E.*: Lösung des stationären Strahlungstransportproblems für Energiestreuung mit Hilfe von Matrizenfunktionen. Kernenergie **16** (1973) 47 bis 52
- [7] *Melcher, H.*: New Aspects for the Interpretation of Dose-Effect- and Transmission-Curves. Wiss. Zeitschr. der Päd. Hochschule Erfurt/Mühlhausen **9** (1973) Heft 2 S. 31

[8] *Gantmacher, F. R.*: Matrizenrechnung Teil 1 : Allgemeine Theorie, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1958

o. Prof. Dr. rer. nat. habil. *Horst Melcher*,
Stellv. Direktor für Forschung der Sektion Mathematik/Physik

Dr. sc. nat. *Ewald Gerth*,
Wiss. Mitarb. am Zentralinstitut für Astrophysik der DAW, Potsdam

Anmerkung zur Wiedergabe des Textes:

Der vorliegende Artikel in der Wissenschaftlichen Zeitschrift der PH Erfurt wurde im Jahre 2008 mittels der modernen Computertechnik mit Schriftanalyse aufgenommen und textgetreu wiedergegeben. Die Originalschrift wurde mit dem Textverarbeitungsprogramm LaTeX 2e behandelt. Zum Zwecke der Vereinheitlichung mit anderen Arbeiten sowie der besseren Lesbarkeit auf dem Bildschirm wurde ein Umbruch auf eine Spalte pro Seite und eine Veränderung der Paginierung bis auf die Anfangsseite durchgeführt. Vektoren und Matrizen werden nicht – wie noch im Original – in Frakturbuchstaben, sondern **Fett** (sans serif, boldface) ausgedruckt.

Abstract: www.ewald-gerth.de/44abs.pdf

Analytical treatment and numerical calculation of conversion series of radionuclides by means of matrix functions

Horst Melcher¹ and Ewald Gerth²

¹ *Pedagogic College „Dr. Theodor Neubauer“, Erfurt-Mühlhausen, GDR*

² *Central Institute for Astrophysics of the Academy of Sciences of the GDR, Potsdam*

Abstract

The analytical treatment of a process of radioactive reactions accompanied with conversion of chemical elements (spontaneous decay or build-up of the nucleus by capture of neutrons) can be afforded advantageously by formulating the system of linear differential equations by matrices, which yields at once an exact solution in its full entirety.

The solution is given by a matrix transformation of the nuclide components arranged as a vector of the nuclides, which is transformed in a “reaction space” by a resolving matrix during a transition process from an initial composition to the end composition.

The resolving matrix is represented as an expansion of a matrix exponential function, yielding immediately the algorithm for the numerical calculation in a computer program.

The linearity of the system of differential equations offers also the solution by using the LAPLACE-transformation, which is discussed concerning advantages and disadvantages compared to the expansion of the matrix exponential function (NEUMANN’s row).

The application of vector algebra gives some interesting insight into the interconnection of the reacting components of the system: Thus, successive processes with different transition coefficients are commonly not commutative because of the non-commutativity of matrix-multiplication. The measured total radioactivity of the element composition is the scalar product of the column vector of nuclides and the row vector of detection probability. Every selected transition system is represented as a submatrix of the “global reaction matrix” comprising all possible nuclear transitions from hydrogen to transuranium.

Some numerical examples are given for the calculation of the uranium row and the conversion of gold to mercury.

Publication

WISSENSCHAFTLICHE ZEITSCHRIFT DER PÄDAGOGISCHEN HOCHSCHULE
„DR. THEODOR NEUBAUER“ ERFURT-MÜHLHAUSEN
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Reihe, 9. Jahrgang 1973, Heft 2, Nr. 219, S. 21–30
Eingegangen am 12. 4. 1973

SCIENTIFIC JOURNAL OF THE PEDAGOGIC COLLEGE
„DR. THEODOR NEUBAUER“ ERFURT-MÜHLHAUSEN
Mathematical-scientific row, 9. Year 1973, Volume 1, No. 219, p. 21–30
Received 1973, April 12th

Article available in German by the web-address: www.ewald-gerth.de/44.pdf

Institution of the authors in 1973

Professor Dr. rer. nat. habil. Horst Melcher
Pedagogic College “Dr. Theodor Neubauer” Erfurt-Mühlhausen,
leader of the scientific area of Experimental Physics I
of the section Mathematics/Physics
Dr. sc. nat. Ewald Gerth
Central Institute of Astrophysics of the Academy of Sciences of the GDR,
Potsdam, East Germany