

# Computational Physics Lab HS 22/23

## Radioaktive Zerfälle

Nandor Kovacs & Celine Schuster

19. Dezember 2022

### Zusammenfassung

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Formulierung der Fragestellung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Hintergründe</b>	<b>2</b>
2.1	Die Menge eines Isotops als Funktion der Zeit . . . . .	2
2.2	Die kumulativ freigesetzte Energie aller Zerfälle als Funktion der Zeit . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Programmiertechnik</b>	<b>3</b>
3.1	Simulations Algorithmus . . . . .	3
3.1.1	Zerfallstyp auswählen . . . . .	3
3.1.2	Generation eines einzelnen Zerfall-Events . . . . .	3
3.1.3	Simulation des Schicksals eines Partikels . . . . .	4
3.2	Allgemeine Struktur . . . . .	4
<b>4</b>	<b>Resultate</b>	<b>5</b>
4.1	Die Menge eines Isotops als Funktion der Zeit . . . . .	5
4.2	Die kumulativ freigesetzte Energie aller Zerfälle als Funktion der Zeit . . . . .	7

## 1 Formulierung der Fragestellung

Wir untersuchen in diesem Bericht radioaktive Zerfälle. Wir simulieren den Zerfall von einer gegebenen Menge von einem Isotop. Dabei simulieren wir auch den Zerfall von den entstehenden Isotopen, bis ein stabiles Isotop erreicht wird. Jedes Isotop in so einer Simulation hat eine Funktion  $F(t)$ , wo die Menge des Isotops als Funktion der Zeit angibt.

Bei jedem radioaktivem Zerfall wird eine gewisse Menge von Energie freigesetzt. Die Funktion  $E(t)$  ist die kumulative Energiemenge zur Zeit  $t$  die aus dem Zerfall des jeweiligen Isotops freigesetzt wurde.

Wir schauen uns folgende Fragestellungen an:

1. Sind die Funktionen  $F$  der Isotope ähnlich, oder unterscheiden sie sich fest?
2. Verglichen mit der theoretischen Funktion, sind unsere erhaltene Daten aus der Simulation ähnlich?
3. Sind die Funktionen  $E$  der Isotope ähnlich, oder unterscheiden sie sich fest?

## 2 Physikalische Hintergründe

### 2.1 Die Menge eines Isotops als Funktion der Zeit

Schauen wir zuerst die Funktion an, die das Ausgangsisotop beschreibt. Für ein einzelnes Atom ist die Wahrscheinlichkeit  $p$  gegeben, dass es in einer gegebenen Zeit  $dt$  zerfällt.

$$\begin{aligned}E[-dN_1] &= 0 \cdot (1 - p) + 1 \cdot p \\E[-dN_1] &= p\end{aligned}$$

Wegen der Linearität des Erwartungswerts  $E[X] + E[Y] = E[X + Y]$  folgt also:

$$E[-dN] = p \cdot N$$

$\lambda$  ist gleich  $\frac{p}{dt}$ . Dann folgt:

$$\begin{aligned}-dN &= \lambda \cdot N \cdot dt \\ \frac{dN}{dt} &= -\lambda N \\ (e^{-\lambda t}) &= e^{-\lambda t} \cdot (-\lambda)\end{aligned}$$

$$N = N_0(e^{-\lambda t})$$

$\lambda$  ist eine konstante, und kann in der Natur beobachtet werden. Die Menge des Ausgangsisotops als Funktion der Zeit ist also  $N_0(e^{-\lambda t})$ .

Für die nächsten Isotopen wird es schwieriger. Dort nämlich ist  $-dN$  nicht mehr gleich  $p \cdot N \cdot dt$ . Dies ist so weil Isotope nicht nur Zerfallen, sondern auch entstehen durch den Zerfall eines höhergeordneten Isotops. Das höhergeordnete Isotop zerfällt mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit  $p_v$  in dieses, und einer gewisser Wahrscheinlichkeit in ein anderes Isotop. Darum:

$$-dN_b = \delta \cdot N \cdot dt - dN_a \cdot p_v$$

Angenommen das Ausgangsisotop a kann nur in das Isotop b zerfallen, sieht die Differentialgleichung für  $F(t)_b$  folgendermassen aus:

$$\begin{aligned}-dN_b &= \lambda_b \cdot N \cdot dt - dN_a \cdot 1 \\ -dN_b &= \lambda_b \cdot N \cdot dt - e^{-\lambda_a t} \\ \frac{dN_b}{dt} &= \frac{e^{-\lambda_a t}}{dt} - \lambda_b N \\ \frac{dN_b}{dt} &= -e^{-\lambda_a t} \cdot \lambda_a - \lambda_b N \\ N_b &= \frac{\lambda_a}{\lambda_b - \lambda_a} N_a^0 (e^{-\lambda_a t} - e^{-\lambda_b t}) + N_b^0 e^{-\lambda_b t}\end{aligned}$$

### 2.2 Die kumulativ freigesetzte Energie aller Zerfälle als Funktion der Zeit

Wenn wir die Zerfallsreihe beobachten, sehen wir dass zwar oft riesige Unterschiede in der Halbwertszeit zwischen Isotopen vorkommen, jedoch die freigesetzte Energie bei einem Zerfall meist viel ähnlicher ist. Wir erwarten also, dass die Kurven der kumulativ freigesetzter Energie der Isotope viel vergleichbarer sind wie die Menge der existierenden Exemplare.

## 3 Programmiertechnik

### 3.1 Simulations Algorithmus

Wir hatten zwei verschiedene Möglichkeiten: den Zerfall pro Zeiteinheit zu simulieren, oder den Schicksal der einzelnen Teilchen zu simulieren, und die resultierenden Daten zu vereinigen. Wegen dem grossen Unterschied der verschiedenen Halbwertszeiten ist die erste Methode nicht sinnvoll. Die kommenden Code-Snippets illustrieren die Hauptteile der zweiten Methode.

#### 3.1.1 Zerfallstyp auswählen

```
1 if rng.uniform(0.0, 100.0) < self.alpha_decay.probability:
2     return self.alpha_decay
3 return self.beta_decay
```

#### 3.1.2 Generation eines einzelnen Zerfall-Events

Nachdem der Zerfallstyp ausgelöst ist, wird der Zerfallszeitpunkt ausgewählt, indem man aus der exponentiellen Verteilung einen Wert zufällig zieht.

```
1 decay = isotope.pick_decay(self.rng)
2 if decay is None:
3     return None
4
5 decay_time = t + self.rng.exponential(1.0 / decay.rate)
```

#### 3.1.3 Simulation des Schicksals eines Partikels

Ausgehend aus dem Ausgangsisotop generieren wir solange Zerfalls-Events, bis wir die gesamte Simulationszeit nicht übertreten, oder das stabile Isotop erreichen.

```
1 events: list[DecayEvent] = []
2 t = 0.0
3 isotope_id = 0
4
5 while True:
6     isotope = self.cfg.decay_chain.isotopes[isotope_id]
7     decay_event = self._generate_decay_event(particle, isotope, t)
8     if decay_event is None:
9         break
10    if decay_event.time > self.cfg.total_time: design
11        break
12    events.append(decay_event)
13    t = decay_event.time
14    isotope_id = decay_event.to_isotope
```

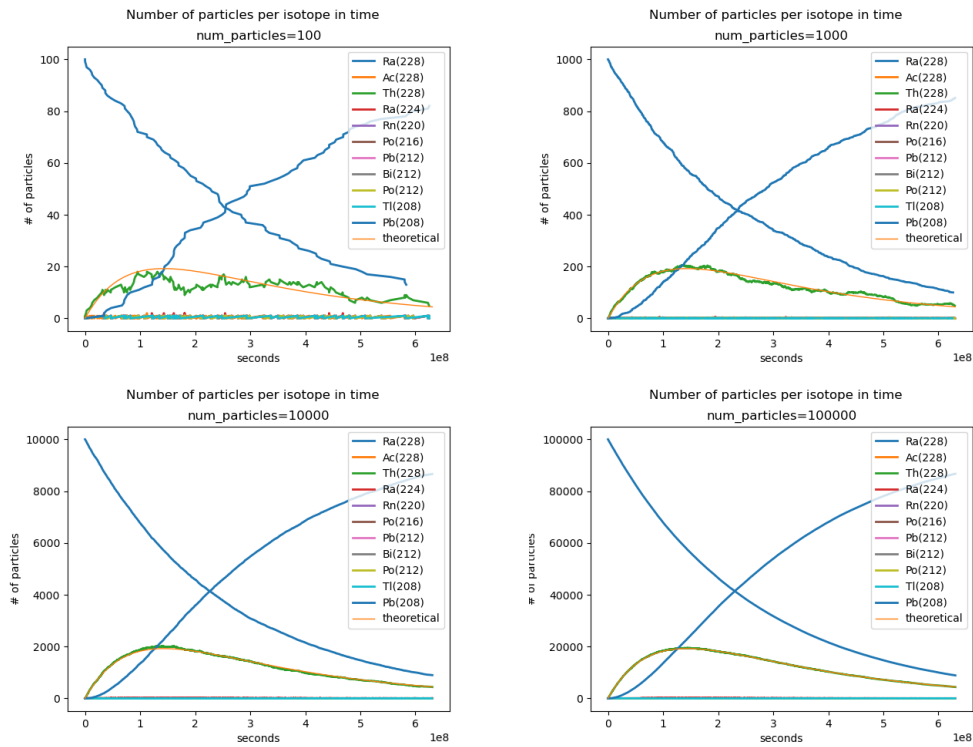
### 3.2 Allgemeine Struktur

Wir haben das Programm so entworfen, dass die Simulation einen Datenfile produziert, und die Visualisierungsprogramme diesen Datenfile interpretieren. Dies ermöglicht das Experimentieren mit verschiedenen Parametern während der Entwicklung des Programms.

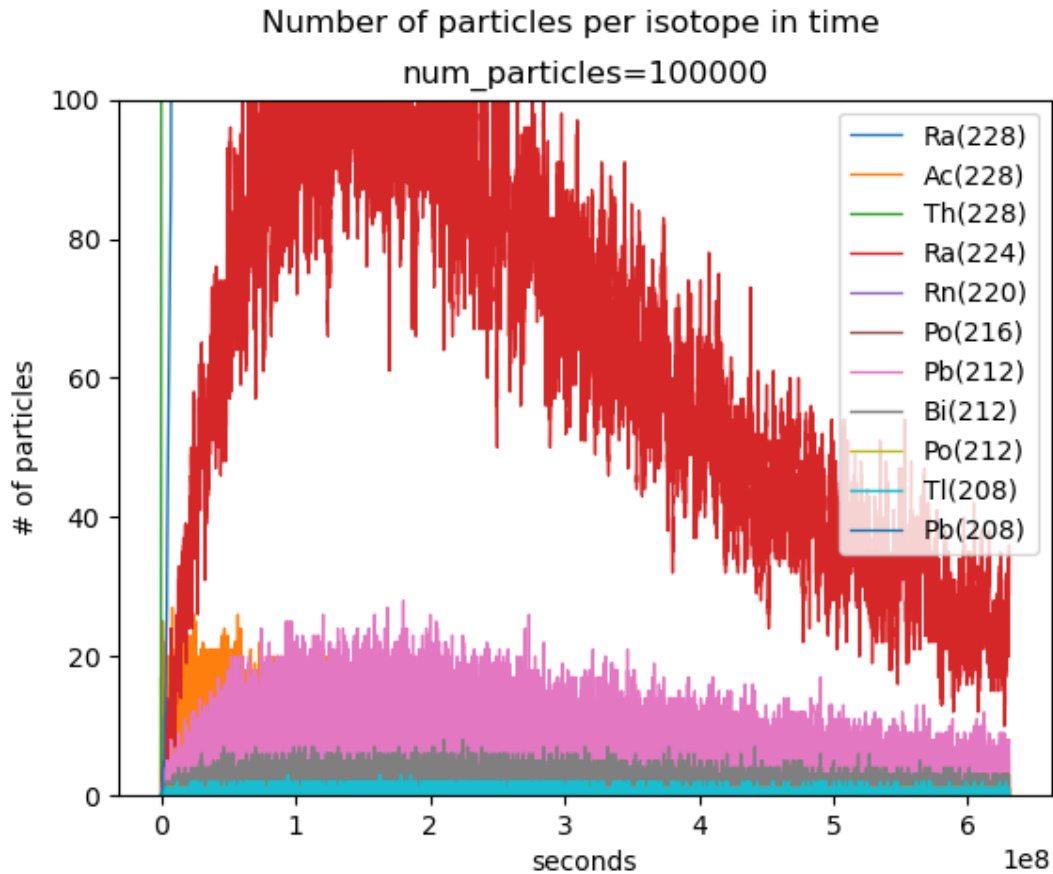
```
1 model.SimulationResults(cfg, events).write_file()
2 ...
3 sr = model.SimulationResults.from_file(args.input)
```

## 4 Resultate

### 4.1 Die Menge eines Isotops als Funktion der Zeit

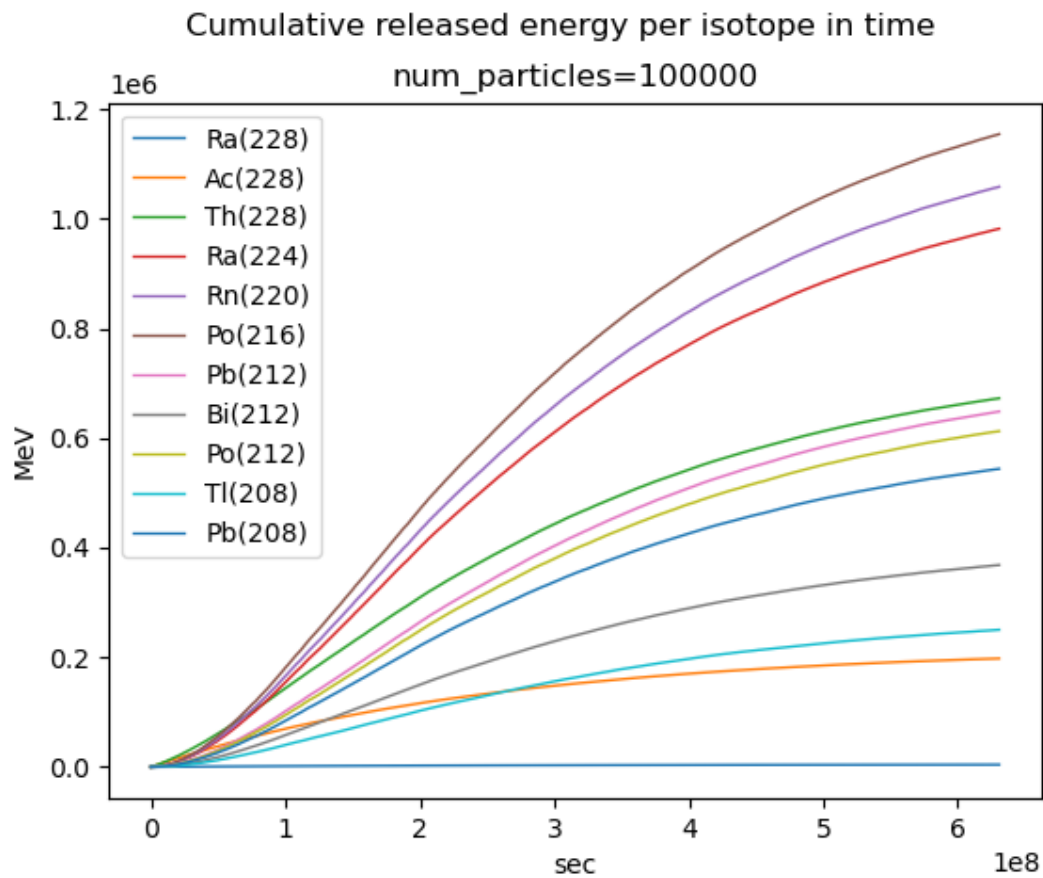


Dies sind Resultate von Experimenten mit dem Simulator. Wir beobachten dass die meisten Isotope kaum bis nicht sichtbar sind auf dem Graph. Das ist, da die im Vergleich zu den drei Isotopen mit der grössten Halbwertszeit eine so kleine Halbwertszeit haben, dass sie in jedem Zeitschritt so oft zerfallen, wie neue Partikel entstehen.



Das sieht man an diesem Beispiel gut. Hier ist das Bild sehr fest vergrößert. Es ist sichtbar, dass viele Isotope sofort zerfallen sobald Partikel entstehen. Wir beobachten dass die Funktionen deutlich unterschiedlich sind. Das kommt daher dass die Menge von Zerfällen die in einem Moment geschehen zu der Menge der Partikel proportional ist. Dies ändert sich aber mit der Funktion des Mutterisotops. Die Differentialgleichung für die Funktion wird für jedes folgende Isotop immer komplizierter. Wir haben die Funktion für das erste und zweite Isotop ausgerechnet. In den vier Beispielen ist die Funktion für das zweite Isotop auch dargestellt. Sie passt sehr gut mit dem Verlauf des dritten Isotops überein. Grund dafür ist, dass das zweite Isotop, wie vorher beschrieben, sofort zerfällt wenn es entsteht. Das heisst, dass es genau gleich schnell Partikel 'abgibt' wie dessen Mutterisotop, also wird die Funktion des folgenden Isotops nicht beeinträchtigt wie im Normalfall.

## 4.2 Die kumulativ freigesetzte Energie aller Zerfälle als Funktion der Zeit



Wie erwartet unterscheiden sich die Energiemengen die durch die Zerfälle der Isotope freigesetzt werden nicht so extrem wie deren Mengen. Nur das letzte Isotop setzt keine Energie frei, da es nicht Zerfällt. Die Funktionen sind sehr ähnlich, und von der Grössenordnung her gleich.