Fermionische Molekulardynamik

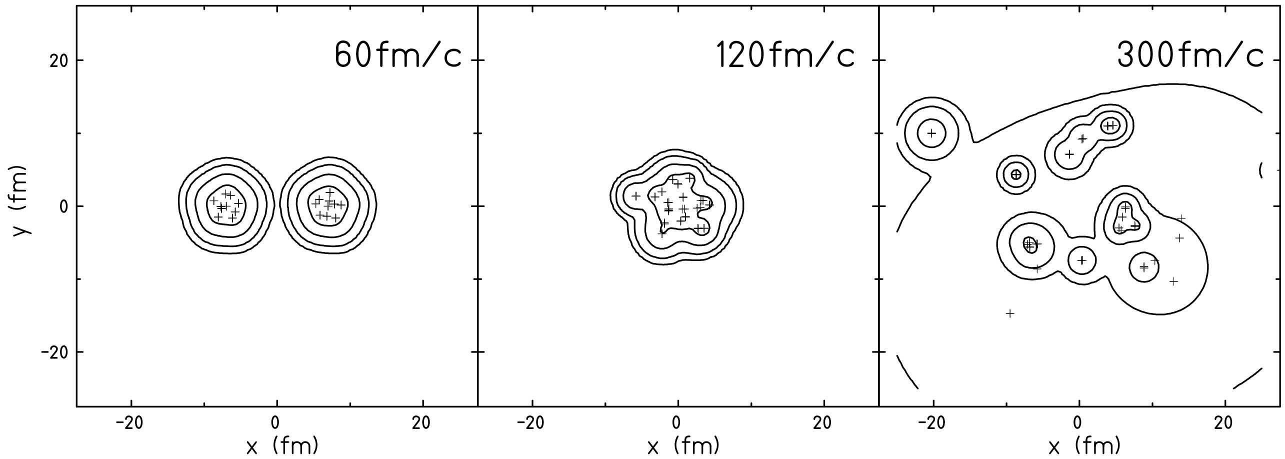
Beschreibung wechselwirkender Fermisysteme mittels Variationsverfahren

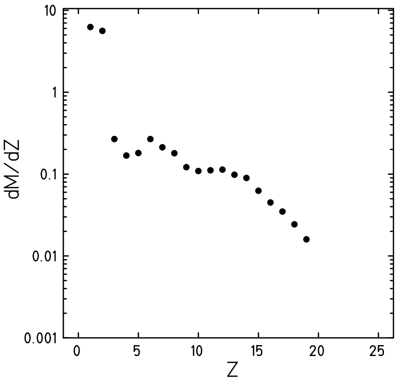
H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth;
GSI & Technische Universität Darmstadt
Jürgen Schnack; Universität Osnabrück

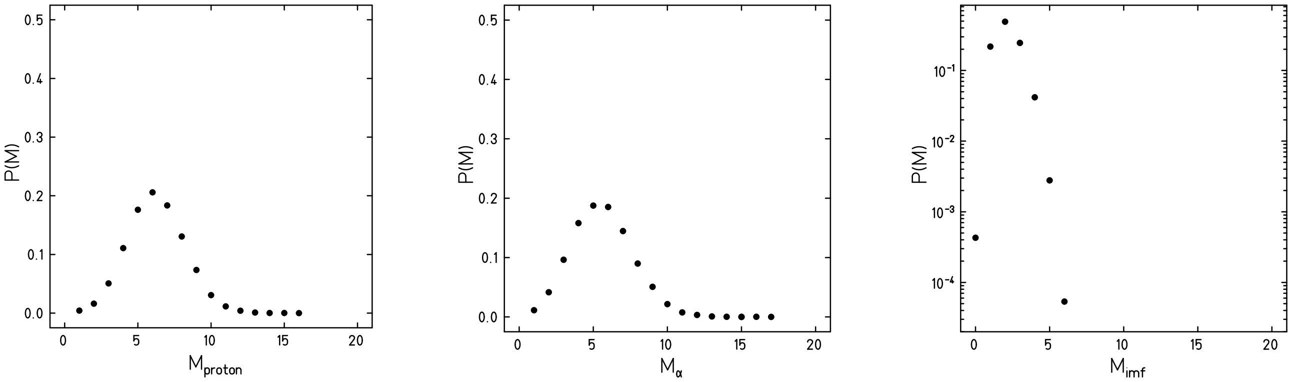
Gliederung:

1. Einführung
2. klassische Molekulardynamik
3. Bemerkungen zur Quantenmechanik
4. Fermionische Molekulardynamik (FMD)
   - Ansatz des Versuchszustandes
   - Grundzustände
   - Dynamik
   - Thermodynamik

Reaktionen

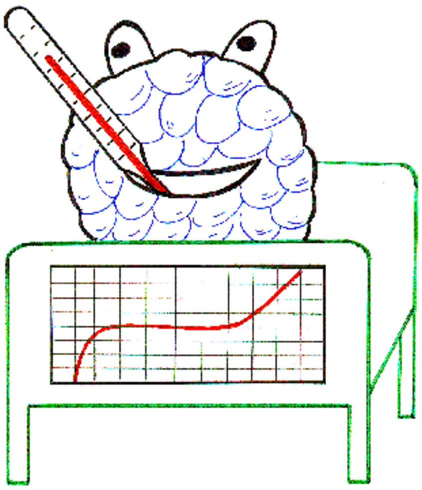


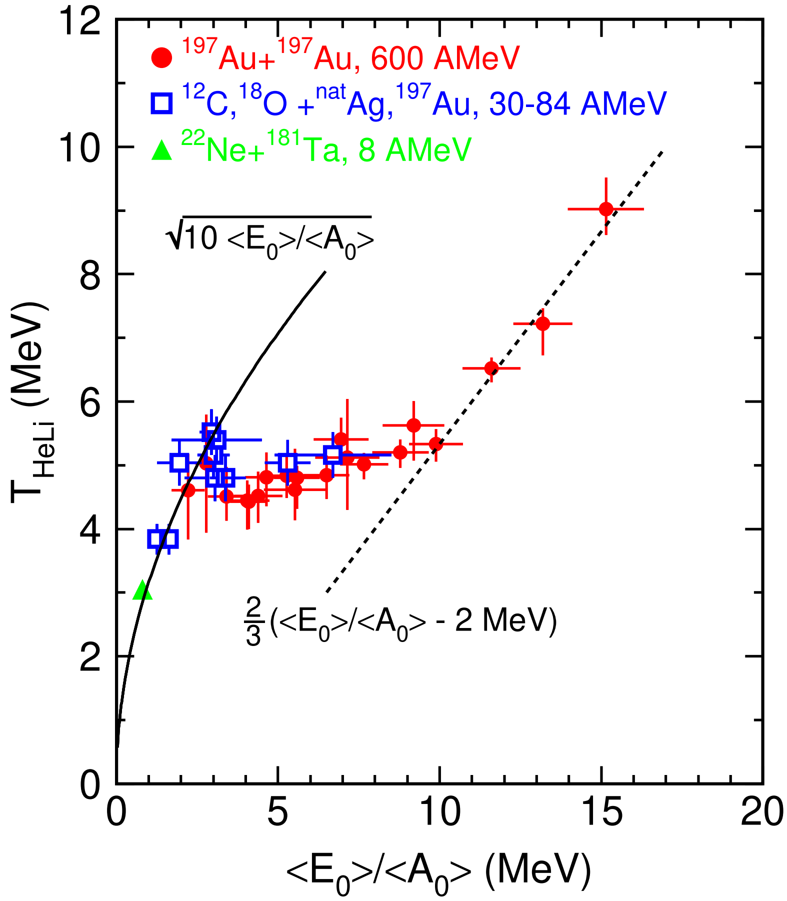




K. Hagel et al., Phys. Rev. **C50** (1994) 2017

Thermodynamische Eigenschaften





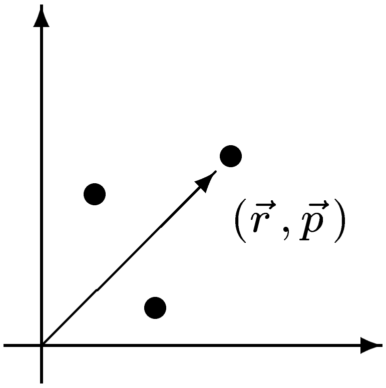
J. Pochodzalla et al., Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 1040

Motivation

Ziel: Ein Modell zur Beschreibung wechselwirkender Fermisysteme, d.h. zur Beschreibung von

- Grundzustandseigenschaften: Energie, quadratischer Radius, Dichte, lang- und kurzreichweitige Korrelationen;
- dynamischen Vorgängen: (kollektive) Anregungen und Stöße, Fusion, dissipative Reaktionen, Fragmentation, Evaporation; Transport- und Wachstumsprozesse,
- thermodynamischen Eigenschaften: kalorische Kurve, Phasenübergänge.

Klassische Molekulardynamik



- unterscheidbare Teilchen
- Punkte im Phasenraum $(\vec{r}\,,\vec{p}\,)$
- BOLTZMANN–Statistik

A–**Teilchen–Zustand:** $\{\vec{r}_1,\vec{p}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_A,\vec{p}_A\}$

Grundzustand:

$$H = H(\vec{r}_1,\vec{p}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_A,\vec{p}_A) \qquad \text{minimal}$$

$$\forall i: \quad 0 = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \quad \& \quad 0 = \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \qquad \text{notwendig}$$

Dynamik:

$$\frac{d}{dt}\,\vec{r}_i = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \quad \& \quad \frac{d}{dt}\,\vec{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i}$$

Klassische Molekulardynamik

Thermodynamik:

$$\text{sei} \qquad V = V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_A)$$

$$\text{dann} \qquad \left\langle\left\langle \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} \right\rangle\right\rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

Temperaturbestimmung (Ergodenhypothese)

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} \right\rangle\right\rangle &= \lim_{t_2 \to \infty} \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \quad \frac{\vec{p}_i^{\,2}(t)}{2m_i} \\ &= \frac{3}{2} k_B T \end{aligned}$$

Temperaturregelung (Hoover–Nosé–Thermostat)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\, \vec{r}_i &= \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \\ \frac{d}{dt}\, \vec{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} - \xi\, \vec{p}_i \\ \frac{d}{dt}\, \xi &= \frac{1}{Q} \left(\sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}(t)}{2m_i} - \frac{3A}{2} k_B T \right) \end{aligned}$$

Quantenmechanik

Grundzustand – zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\underset{\sim}{H} \mid \Psi_n \rangle = E_n \mid \Psi_n \rangle$$

Dynamik – zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$i \frac{d}{dt} \mid \Psi(t) \rangle = \underset{\sim}{H} \mid \Psi(t) \rangle$$

Temperaturbestimmung

$$\begin{aligned}
\langle\langle\, \underset{\sim}{T} \,\rangle\rangle &= \langle\langle \sum_i \frac{\underset{\sim}{\vec{k}}_i^{\,2}}{2m_i} \rangle\rangle = \mathrm{Sp}\,(\underset{\sim}{R}\, \underset{\sim}{T}) \\
&= \lim_{t_2 \to \infty} \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \quad \langle\, \Psi(t) \,|\, \sum_i \frac{\underset{\sim}{\vec{k}}_i^{\,2}}{2m_i} \,|\, \Psi(t) \,\rangle \\
&\neq \frac{3A}{2} k_B T
\end{aligned}$$

Temperaturregelung ungelöst

Quantenmechanik
Näherungslösungen

Grundzustand – Variationsverfahren von Ritz:

$$\mathcal{H} := \langle\, Q \,|\, \underset{\sim}{H} \,|\, Q \,\rangle \qquad \text{minimal; } Q \equiv \{q_1, q_2, \dots\}$$

$$\forall q_\mu : \qquad 0 = \frac{\partial}{\partial q_\mu} \; \langle\, Q \,|\, \underset{\sim}{H} \,|\, Q \,\rangle \qquad \text{notwendig}$$

Dynamik – zeitabhängiges Variationsprinzip:

$$\begin{aligned} 0 &= \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{dt} \; \langle\, Q(t) \,|\; i\frac{d}{dt} - \underset{\sim}{H} \;|\, Q(t) \,\rangle \\ &= \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{dt} \; \Big(\mathcal{L}_0(Q(t), \dot{Q}(t), t) - \mathcal{H}(Q(t), t) \Big) \end{aligned}$$

Euler – Lagrange – Gleichungen:

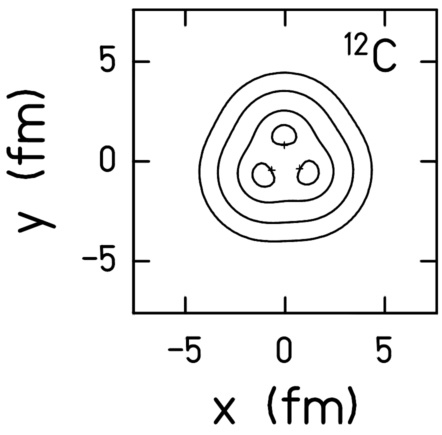
$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\nu} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\nu} = 0 \qquad , \qquad \nu = 1, 2, \dots$$

Äquivalente Formulierung:

$$\sum_\nu \mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)\; \dot{q}_\nu = -\frac{\partial}{\partial q_\mu} \; \langle\, Q(t) \,|\, \underset{\sim}{H} \,|\, Q(t) \,\rangle$$

$$\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q) = \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\mu \partial q_\nu} - \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\nu \partial q_\mu}$$

Fermionische Molekulardynamik



- ununterscheidbare Teilchen
- lokalisierte Wellenpakete
- FERMI–DIRAC–Statistik

Probleme ⇒ Ansatz:

- ununterscheidbare Fermionen ⇔ Pauliprinzip
  ⇒ antisymmetrisierter Vielteilchenzustand
- Quantenobjekte ⇔ Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation
  ⇒ Einteilchenwellenpakete
- kurzreichweitiger abstoßender Anteil der „van der Waals–artigen" Wechselwirkung ⇔ kurzreichweitige Korrelationen
  ⇒ korrelierter Versuchszustand
  ⇒ **Vortrag am 3.11.1997 im Seminar Theoretische Physik**

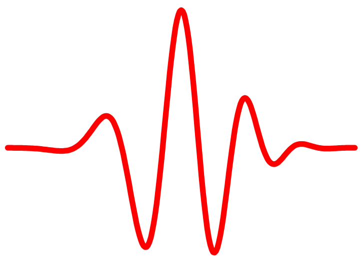
FMD: Modellzustände

Vielteilchenzustand (Slaterdeterminante):

$$
\begin{aligned}
|\, Q(t) \,\rangle &= \frac{1}{\langle\, \widehat{Q}(t) \,|\, \widehat{Q}(t) \,\rangle^{\frac{1}{2}}} \;|\, \widehat{Q}(t) \,\rangle \\
|\, \widehat{Q}(t) \,\rangle &= \frac{1}{A!} \sum_{\pi} \mathrm{sgn}(\pi) \;|\, q_{\pi(1)}(t) \,\rangle \otimes \cdots \otimes \;|\, q_{\pi(A)}(t) \,\rangle
\end{aligned}
$$

Einteilchenzustände (Gaußsche Wellenpakete):

$$
\langle\, \vec{x} \,|\, q(t) \,\rangle = \exp\left\{ -\frac{(\, \vec{x} - \vec{b}(t) \,)^2}{2\, a(t)} \right\} \otimes |\, \chi(t), \phi(t) \,\rangle \otimes |\, m_t \,\rangle
$$



$\vec{b}(t) = \vec{r}(t) + i a(t) \vec{p}(t)$

$\vec{r}(t)$: mittlere Ort

$\vec{p}(t)$: mittlerer Impuls

$a(t)$: komplexe Breite

$\chi(t), \phi(t)$: Spinwinkel

m_t : Isospin–3–Komponente

Für Gaußsche Wellenpakete gilt:

$$
\langle\, \underset{\sim}{\vec{x}} \,\rangle = \vec{r} \quad , \quad \langle\, \underset{\sim}{\vec{k}} \,\rangle = \vec{p}
$$

$$
(\Delta x)^2 = \frac{3}{2} \frac{a_R^2 + a_I^2}{a_R} \quad , \quad (\Delta k)^2 = \frac{3}{2} \frac{1}{a_R}
$$

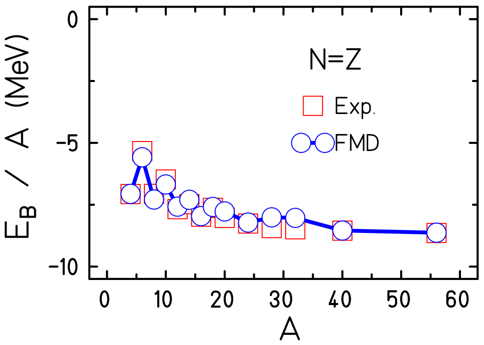
FMD: Grundzustände

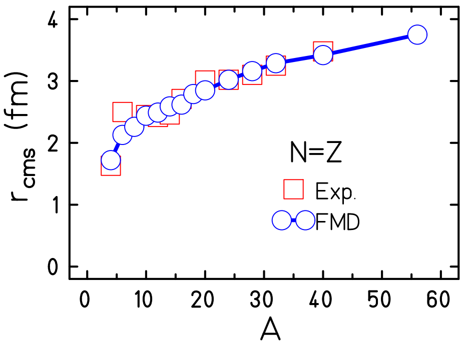
Grundzustand (Ritz):

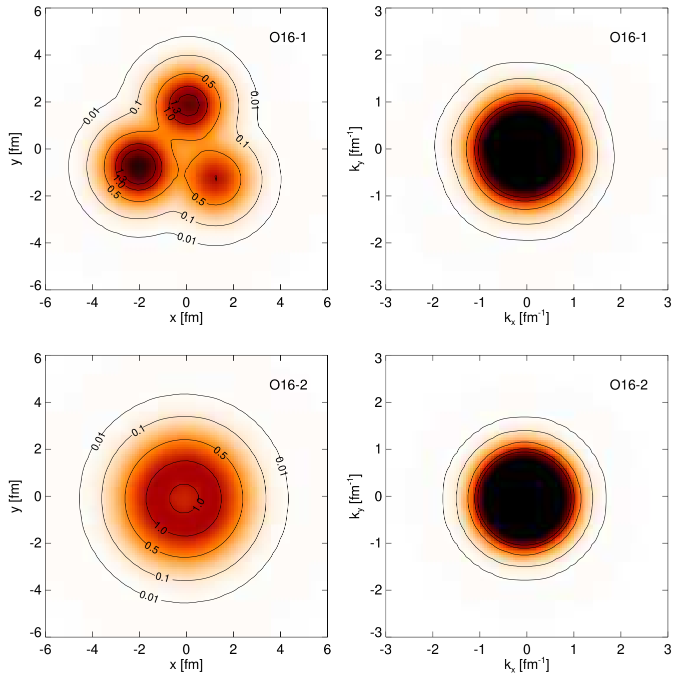
$$\mathcal{H} := \langle\, Q(t) \,|\, \underset{\sim}{H} \,|\, Q(t) \,\rangle \qquad \text{minimal}$$

$$\forall q_\mu : \qquad 0 = \frac{\partial}{\partial q_\mu} \; \langle\, Q(t) \,|\, \underset{\sim}{H} \,|\, Q(t) \,\rangle \qquad \text{notwendig}$$

Grundzustandseigenschaften mit phänomenologischer NN–Wechselwirkung:







FMD: Dynamik

Zeitabhängiges Variationsprinzip:

$$0 \quad = \quad \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, \langle \, Q(t) \, | \, i \frac{d}{dt} - \underset{\sim}{H} \, | \, Q(t) \, \rangle$$

Freie Bewegung:

$$\underset{\sim}{h}(l) = \frac{\underset{\sim}{\vec{k}}^{\,2}(l)}{2m} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\, \vec{b}_l = 0 \;, \quad \frac{d}{dt}\, a_l = \frac{i}{m}$$

$$\frac{d}{dt}\, \vec{p}_l = 0 \quad , \quad \frac{d}{dt}\, \vec{r}_l = \frac{\vec{p}_l}{m}$$

Äusserer harmonischer Oszillator:

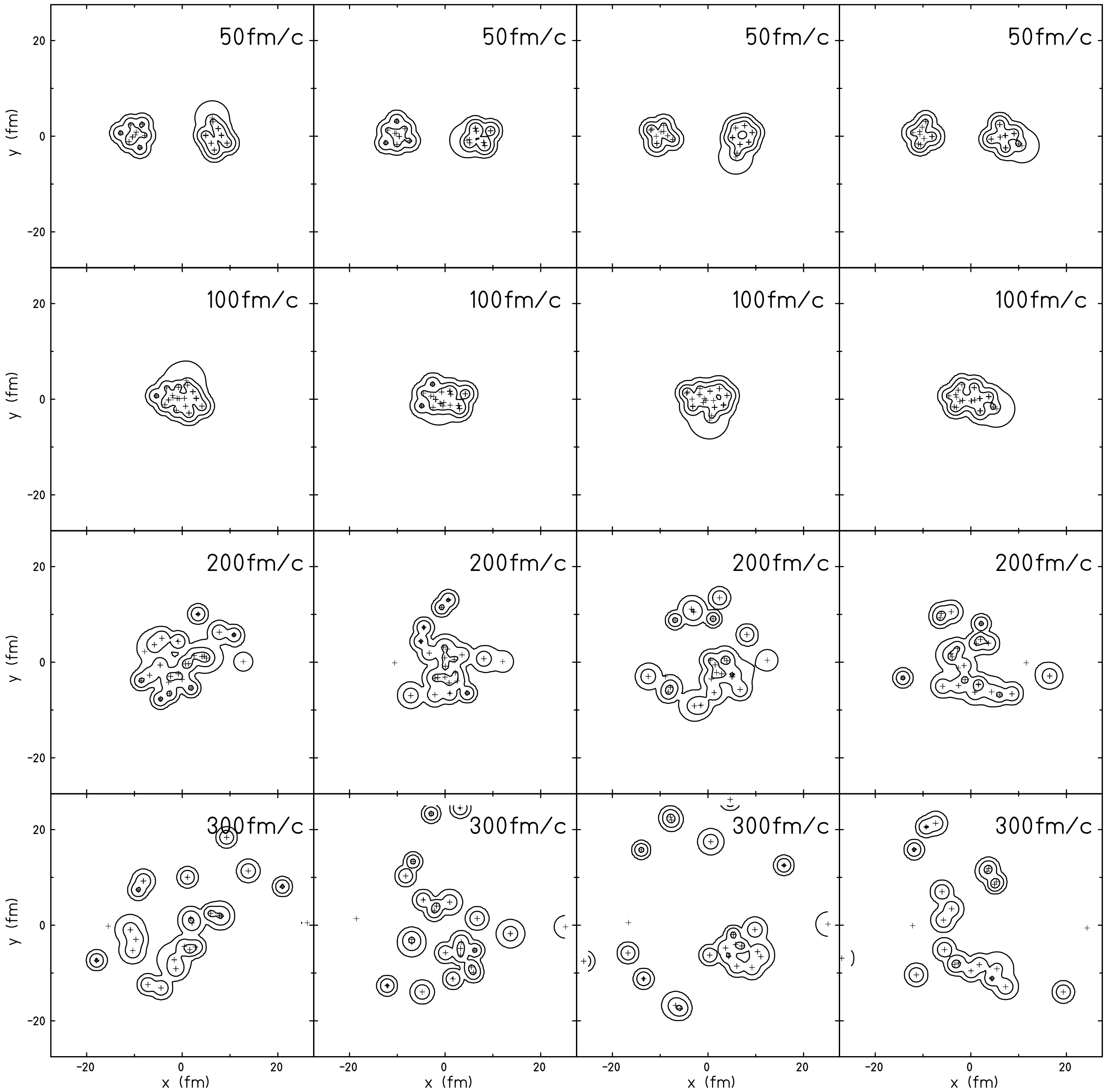
$$\underset{\sim}{h}(l) = \frac{\underset{\sim}{\vec{k}}^{\,2}(l)}{2m} + \frac{1}{2}\, m\omega^2 \underset{\sim}{\vec{x}}^{\,2}(l) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\, \vec{b}_l = -im\omega^2 a_l \vec{b}_l$$

$$\frac{d}{dt}\, a_l = -im\omega^2 a_l^2 + \frac{i}{m}$$

$$\frac{d}{dt}\, \vec{r}_l = \frac{\vec{p}_l}{m} \quad , \quad \frac{d}{dt}\, \vec{p}_l = -m\omega^2 \vec{r}_l$$

FMD: Multifragmentation

^{19}**F**–^{27}**Al bei** $E_{Lab} = 32A$**MeV und** $b = 0.5$**fm:**



Thermodynamische Eigenschaften Zeitmittelung

Statistischer Operator:

$$\underset{\sim}{R}_{\mathrm{erg}} \quad := \quad \lim_{t_2 \to \infty} \frac{1}{(t_2 - t_1)} \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \; |\, Q(t)\,\rangle\langle\, Q(t)\,|$$

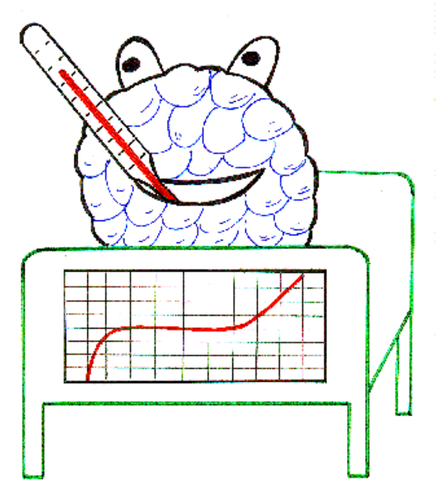
Zeitmittel des Erwartungswertes von $\underset{\sim}{B}$:

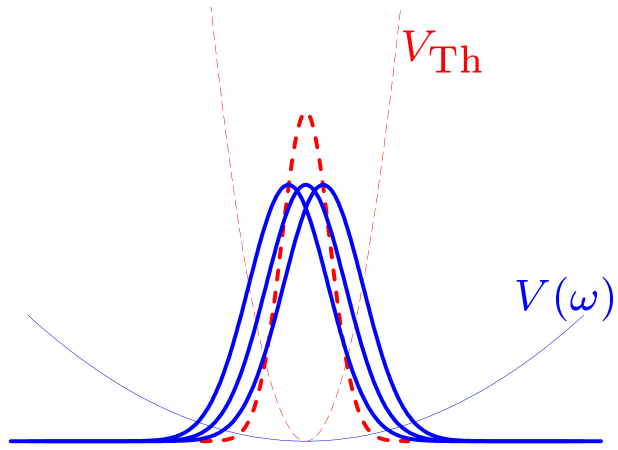
$$\overline{\langle\, \underset{\sim}{B}\, \rangle}\Big|_{\langle\, \underset{\sim}{H}\, \rangle} \quad := \quad \mathrm{Tr}\,(\underset{\sim}{R}_{\mathrm{erg}}\; \underset{\sim}{B})$$

$$= \quad \lim_{t_2 \to \infty} \frac{1}{(t_2 - t_1)} \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \; \langle\, Q(t)\,|\, \underset{\sim}{B}\,|\, Q(t)\,\rangle$$

- Ergodenhypothese: Zeitmittel statt Ensemblemittel,
- $\langle\, \underset{\sim}{H}\, \rangle$ ist Erhaltungsgröße,
- Wie bestimmt man die Temperatur?
  $\underset{\sim}{T}$ ungeeignet — Pauliprinzip sowie impulsabhängige Wechselwirkung,
  $\rho_k^{(1)}(\vec{k})$ ungeeignet — Wechselwirkung.

Ankopplung eines Thermometers





- **angeregter Kern:** „Flüssigkeitstropfen“ in einem Containerpotenital (HO)
  $\underset{\sim}{H}_{\rm N} = \underset{\sim}{T}_{\rm N} + \underset{\sim}{V}_{\rm NN} + \underset{\sim}{V}(\omega)$,

- **Thermometer:** Wellenpaket in einem zweiten Oszillator ω_{Th}, (ideales Gasthermometer)
  $\underset{\sim}{H}_{\rm Th} = \underset{\sim}{T}_{\rm Th} + \underset{\sim}{V}_{\rm Th}$,

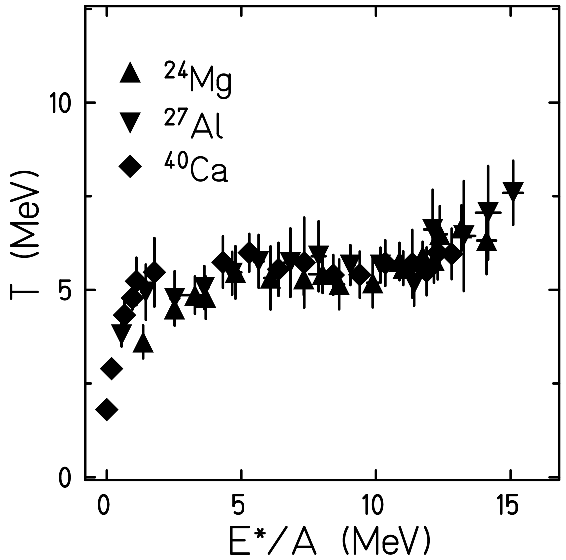
- **Ankopplung** der Nukleonen an das Thermometer:
  $\underset{\sim}{V}_{\rm N-Th}, \quad \underset{\sim}{H} = \underset{\sim}{H}_{\rm N} + \underset{\sim}{H}_{\rm Th} + \underset{\sim}{V}_{\rm N-Th}$,
  $|\, Q(t)\,\rangle = \;|\, Kern\,\rangle \otimes \;|\, Thermometer\,\rangle$,

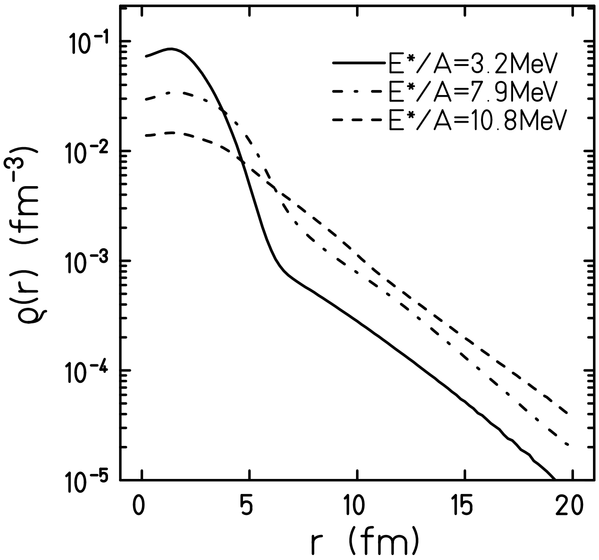
- **Zeitmittel:**
  $E_{\rm Th} = \overline{\langle\, \underset{\sim}{H}_{\rm Th}\,\rangle}\Big|_{\langle\, \underset{\sim}{H}\,\rangle} \quad , \quad E^* = \overline{\langle\, \underset{\sim}{H}_{\rm N} - E_0\,\rangle}\Big|_{\langle\, \underset{\sim}{H}\,\rangle} \quad ,$

- **0. Hauptsatz:** beide Untersysteme streben selbe Temperatur T an

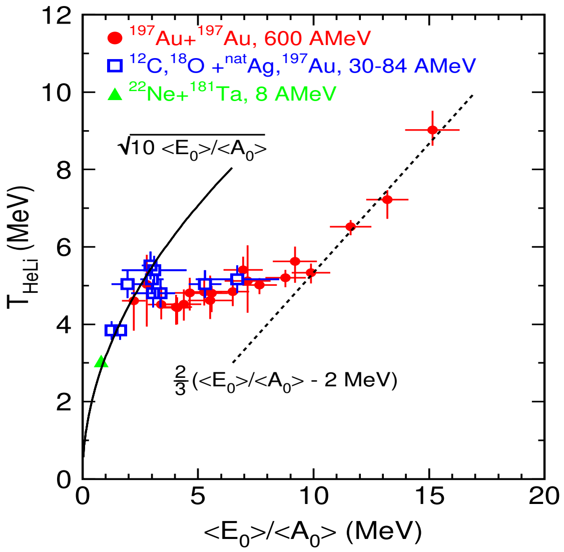
$$T = \omega_{Th} \left[\ln \left(\frac{E_{\rm Th} + \frac{3}{2}\omega_{Th}}{E_{\rm Th} - \frac{3}{2}\omega_{Th}} \right) \right]^{-1}$$

Phasenübergang
Kalorische Kurve





J. Pochodzalla et al., Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 1040:



- Simulation: Gleichgewicht im Container, lange Zeit, ideales Gasthermometer
- Experiment: Ereignisensemble zeigt Gleichgewichtsverhalten, kurze Zeit, chemisches Thermometer

Zusammenfassung

- Fermionische Molekulardynamik (FMD): quantenmechnisches Molekulardynamikmodell zur Beschreibung wechselwirkender Fermisysteme;
- Grundzustände (Ritz);
- Dynamik (Zeitabhängiges Variationsprinzip);
- Thermodynamik (Zeitmittelung & Thermometer);

- Grundzustände: Energien, Radien, Momente, Dichten, intrinsische Struktur (Korrelationen), exotische Systeme (z.B. Kerne an der „Dripline“)
- Dynamik: (kollektive) Anregungen, Fusion, dissipative Reaktionen, Fragmentation, Evaporation
- Thermodynamik: Temperaturbestimmung, kalorische Kurve, Phasenübergänge

---

- Aufwand:
  klassische Molekulardynamik — $\propto A^2$,
  Fermionische Molekulardynamik — $\propto A^4$
- Probleme:
  Spindynamik, Fluktuationen, realistische Wechselwirkungen

Literatur

[1] J.R. Klauder, B.-S. Skagerstam, *Coherent States*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (1985)

[2] P. Kramer, M. Saraceno, *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics,* Lecture Notes in Physics **140**, Springer, Berlin (1981)

[3] H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A515** (1990) 147

[4] H. Feldmeier, K. Bieler, J. Schnack, Nucl. Phys. **A586** (1995) 493

[5] J. Schnack, H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A601** (1996) 181

[6] H. Feldmeier, J. Schnack, Prog. Part. Nucl. Phys. **39** (1997) 393