Der Flüssigkeit-Gas-Phasenübergang in Kernen

Simulationsrechnungen mit der Fermionischen Molekulardynamik

Die Kräfte, die zwischen den einzelnen Nukleonen im Kern wirken, zeigen ein ähnliches Abstandsverhalten wie die zwischen Molekülen in einer Flüssigkeit. Somit stellt sich die interessante Frage, ob es möglich ist, analog zum Phasendiagramm von z.B. Wasser einen Flüssigkeit-Gas-Phasenübergang in Kernen im Labor zu beobachten. Allgemein wird angenommen, daß die Kennzeichen eines solchen Phasenübergangs in kleinen Systemen, wie sie ein Kern mit maximal einigen hundert Nukleonen repräsentiert, aufgrund der endlichen Größe ausgeschmiert sind. Simulationsrechnungen mit der Fermionischen Molekulardynamik haben jedoch gezeigt, daß auch kleine Systeme alle Eigenschaften eines Phasenüberganges aufweisen können, vorausgesetzt, daß sich die Gesamtenergie für jedes Mitglied des statistischen Ensembles genau genug bestimmen läßt. Die Ergebnisse dieser Modellrechnungen werden mit der am ALADIN-Spektrometer bestimmten kalorischen Kurve von Kernmaterie verglichen.

Die experimentelle Bestimmung der Zustandsgleichung von Kernmaterie stößt auf viele Hindernisse und Schwierigkeiten. Zum einen kann man lediglich endliche Kerne untersuchen, zum anderen ist die gemessene Information nur indirekt. Der Unterschied zur Makrophysik besteht nicht nur in der kleinen Größe des Systems, sondern auch darin, daß man thermodynamische Größen wie Volumen oder Druck nicht definiert vorgeben kann, da im Experiment Druck und Anregungsenergie nur mittels der Kollision zweier Kerne aufgebaut werden können. Ohne äußeren Behälter expandiert das System jedoch sofort ins Vakuum. Deshalb befindet sich das System die gesamte Zeit in einem Übergangszustand, d. h. man erreicht keinen zeitunabhängigen stationären makroskopischen Gleichgewichtszustand.

Trotz oder vielleicht gerade wegen dieser Schwierigkeiten gehört die Bestimmung der nuklearen Zustandsgleichung zu den großen Herausforderungen und zentralen Themen der modernen Kernphysik. Man verspricht sich nicht nur Einblicke in astrophysikalische Phänomene wie Supernova-Explosionen oder Neutronensterne, sondern das Kernsystem ist grundsätzlich auch deswegen interessant, weil es

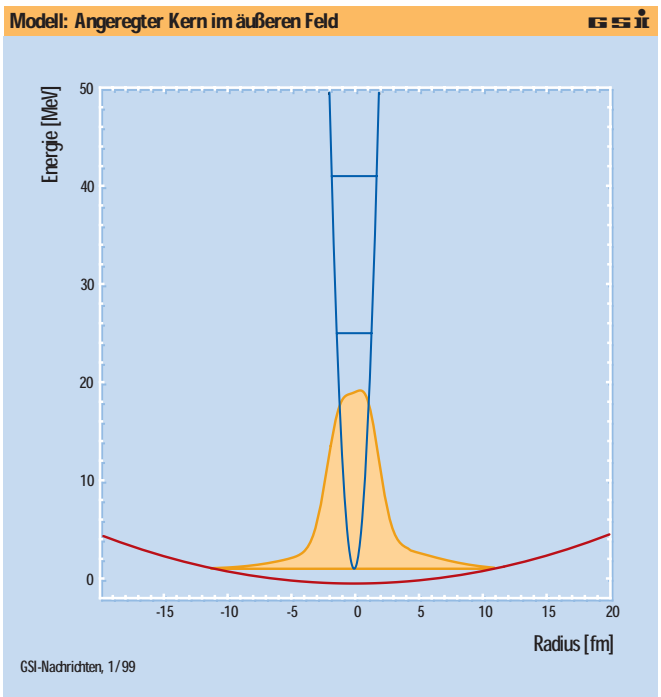


Abb. 1: Das selbstgebundene angeregte Kernsystem, dessen Nukleonendichte durch den gelben Bereich dargestellt ist, befindet sich in einem parabolischen Behälter-Potential (rote Linie). Das Thermometer, das an alle Nukleonen koppelt, ist durch das blau eingezeichnete Oszillatorpotential zusammen mit den niedrigsten Eigenzuständen dargestellt.

sich dabei um einen kleinen, geladenen und selbstgebundenen Quantenflüssigkeitstropfen handelt.

Im folgenden untersuchen wir den Flüssigkeit-Gas-Phasenübergang im Modell der Fermionischen Molekulardynamik (FMD), in dem Kern-Kern-Stöße sowie Gleichgewichtssituationen simuliert werden können. Wir konzentrieren uns auf die experimentell nicht realisierbare Situation eines angeregten Kernes im äußeren Feld. Dieses Feld stellt den Behälter dar, so daß evaporierte Nukleonen nicht entweichen können, sondern mit dem Restkern (heißer Flüssigkeitstropfen) äquilibrieren.

Die FMD [1] beschreibt das Quantensystem mittels einer parametrisierten antisymmetrischen Vielteilchenwellenfunktion, in der jedes Nukleon durch ein Gaußsches Wellenpaket repräsentiert wird. Wellenpakete sind die quantenmechanischen Zustände, die klassischen Punktteilchen am nächsten kommen. Sie sind durch ihren mittleren Ort und Impuls sowie deren Varianzen (Breiten) charakterisiert. Diese Parameter sind zeitabhängig und ihre FMD-Bewegungsgleichungen werden aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip der Quantenmechanik abgeleitet. Obwohl in der Herleitung einfach, sind die resultierenden Gleichungen sehr komplex, so daß Systeme mit Nukleonenzahlen $A \geq 80$ numerisch noch nicht handhabbar sind. Die Ursache liegt in der Antisymmetrisierung, die jedoch nötig ist, um dem fermionischen Charakter der Nukleonen gerecht zu werden. Ohne Antisymmetrisierung wäre der Kern keine Quantenflüssigkeit mit Fermi-Dirac-Statistik, sondern ein klassisches System.

Für die folgende Untersuchung wurde eine effektive Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung verwendet, die aus einem kurzreichweitig abstoßenden und einem langreichweitig anziehenden zentralen Potential mit Spin-Isospin-Austausch sowie dem Coulombpotential besteht [2]. Diese Wechselwirkung wurde an die Grundzustandsdaten von Kernen mit $4 \leq A \leq 40$ angepaßt.

Neben der kinetischen Energie und der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung enthält der Hamiltonoperator auch noch ein externes Feld, das den Behälter beschreibt. Der Behälter ist ein wichtiger Bestandteil des Modells, da er die evaporierten Nukleonen – das Nukleonengas – in der Umgebung des verbliebenen Flüssigkeitstropfens hält und somit eine Äquilibrierung von Flüssigkeit und Gas ermöglicht. Der Gasdruck wird dabei durch die Größe des Behälters bestimmt. Das Modell trägt sowohl der Quantenmechanik als auch dem stark wechselwirkenden Charakter des Kernsystems Rechnung. Deshalb kann man die Temperatur nicht aus der Verteilung der kinetischen

Momentaufnahmen eines angeregten ^{16}O-Kerns GSI

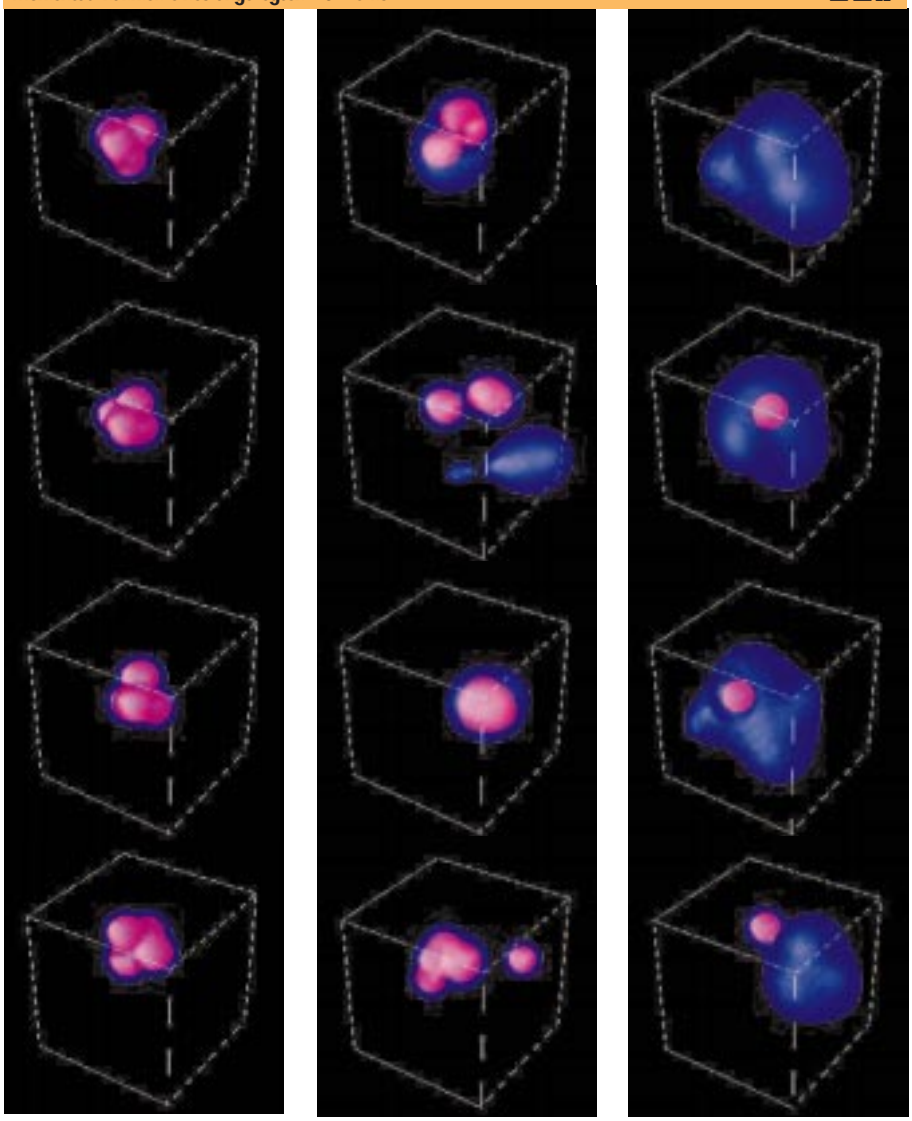


Abb. 2: Momentaufnahmen eines angeregten ^{16}O-Kerns, der in ein flaches Oszillatorpotential mit Niveauabstand $\hbar\omega = 1$ MeV eingeschlossen ist. Die Anregungsenergien pro Teilchen betragen 3.5 MeV (links), 7 MeV (Mitte) und 11 MeV (rechts). Helle Oberflächen entsprechen Dichten $\rho_0 > 0{,}1\ \rho_0$, d.h. Flüssigkeitstropfen, dunklere Oberflächen Dichten $0{,}01\ \rho_0 < \rho < 0{,}1\ \rho_0$, d.h. Gas (Sättigungsdichte $\rho_0 = 0.16$ fm^{-3}). Der Würfel hat eine Kantenlänge von 20 fm.

PHASENÜBERGANG UND ZUSTANDSDICHTE

In einem makroskopischen System, in dem die Teilchenzahl sehr groß ist (z.B. N = 10^{20}), ist die Zahl der Mikrozustände, $\rho_N(E)\Delta E$, in einem Energieintervall ΔE so groß, daß die Zustandsdichte $\rho_N(E)$ als hinreichend glatt für die Definition einer ersten und zweiten Ableitung angenommen werden kann.

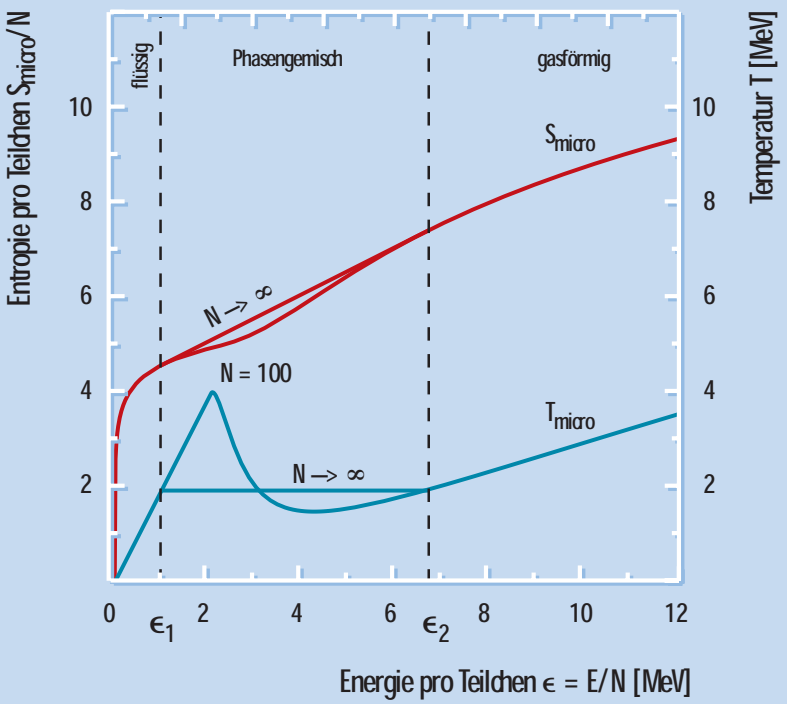
Wird in einem Experiment ein System mit einer Energie E innerhalb einer Auflösung ΔE präpariert, so nennt man das zugehörige Ensemble mikrokanonisch und definiert eine Entropie

$$S_{micro}(E) = \ln(\rho_N(E)\Delta E),$$

die in den thermodynamischen Beziehungen verwendet werden kann, solange E nicht in der Nähe der Grundzustandsenergie liegt, wo die Zustandsdichte zu klein ist.

Mit wachsender Energie können neue Freiheitsgrade angeregt werden und einen Phasenübergang bewirken, z.B. vom neutralen atomaren Gas zu Ionen und Elektronen oder von einer Flüssigkeit mit hoher Dichte zu einem Gas mit niedriger Dichte. Dieser Übergang ist mit einem Zuwachs im Anstieg der Zustandsdichte $\rho_N(E)$ verbunden.

In der Abbildung ist eine typische Situation dargestellt, in der ein Phasenübergang zwischen ϵ_1 und ϵ_2 stattfindet. Die roten Linien zeigen die Entropie des mikrokanonischen Ensembles geteilt durch die Teilchenzahl N als Funktion der Energie pro Teilchen ϵ = E/N. Diese Darstellung wurde gewählt, da für Systeme mit kurzreichweitigen Kräften die Form der Kurven nur wenig von der Teilchenzahl N abhängt. Insbesondere variieren die Energien ϵ_1 und ϵ_2, die die flüssige von der gasförmigen Phase trennen, nur wenig mit N (sobald N groß genug ist). Im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ wächst die Zustandsdichte exponentiell mit E in der Koexistenzphase, d. h. die Temperatur (blaue Kurven)



$$T_{micro} = \left(\frac{\partial S_{micro}}{\partial E}\right)^{-1}$$

bleibt konstant. Bei endlicher Teilchenzahl (z.B. N=100) hat die Entropie in dieser Region eine Delle. Die Abweichung von der Einhüllenden ($N \to \infty$) entspricht dabei der Oberflächenentropie pro Teilchen, die durch die Oberflächen der Blasen und Tropfen zustande kommt und die proportional zu $1/N^{1/3}$ ist.

Am einfachsten läßt sich ein Phasenübergang in einem endlichen System bestimmen, indem man im mikrokanonischen Ensemble die Zustandsdichte mißt und die Energien ϵ_1 und ϵ_2 durch Anfitten der Doppeltangente ermittelt, die $\ln(\rho_N(N\epsilon)\Delta E)$ an zwei Punkten berührt. Die Zustandsdichte kann durch Untersuchung eines kleinen Teilsystems oder durch Ankopplung eines Thermometers bestimmt werden. Bei schwacher Ankopplung und im Gleichgewicht mit dem Restsystem mit der Zustandsdichte ρ_{rest} sind die Mikrozustände des Teilsystems mit der Energie $e_n \ll E$ dem Boltzmannfaktor $e^{-\beta e_n}$ entsprechend besetzt. Es gilt

$$\beta = \frac{\partial \ln(\rho_{rest}(E)\Delta E)}{\partial E},$$

$$\ln(\rho_{rest}(E)\Delta E) \approx \ln(\rho_N(E)\Delta E).$$

Im vorliegenden nuklearen System sind mögliche Untersysteme die intrinsischen Anregungen der Fragmente, die kinetischen Freiheitsgrade der Protonen oder die Multiplizitäten kleiner Cluster. Diese Betrachtungen setzen allerdings das Erreichen eines globalen Gleichgewichts voraus, was für Schwerionenreaktionen nicht von vornherein klar ist. ■

Energie ableiten, wie dies bei klassischen Systemen mit impulsunabhängigen Wechselwirkungen der Fall ist. Man denke nur an die Impulsverteilung im Grundzustand (Nullpunktsbewegung), die ja keine endliche Temperatur impliziert.

Daher wird zur Bestimmung der Temperatur ein externes Thermometer benutzt, das an die Nukleonen angekoppelt wird. Das Thermometer besteht aus einem Quantensystem unterscheidbarer Teilchen, die sich in ihrem eigenen Oszillatorpotential bewegen und mit den Nukleonen schwach wechselwirken (siehe Abb. 1). Die Zeitentwicklung des gesamten Systems wird durch die FMD-Bewegungsgleichungen beschrieben.

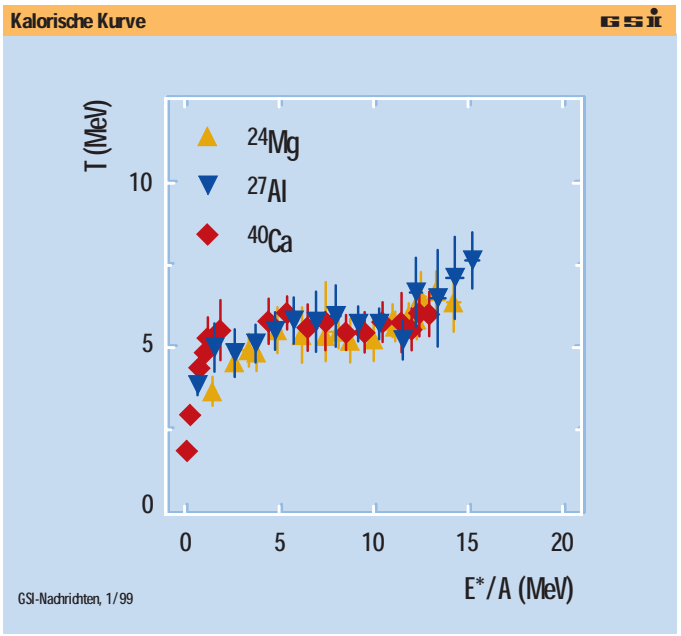


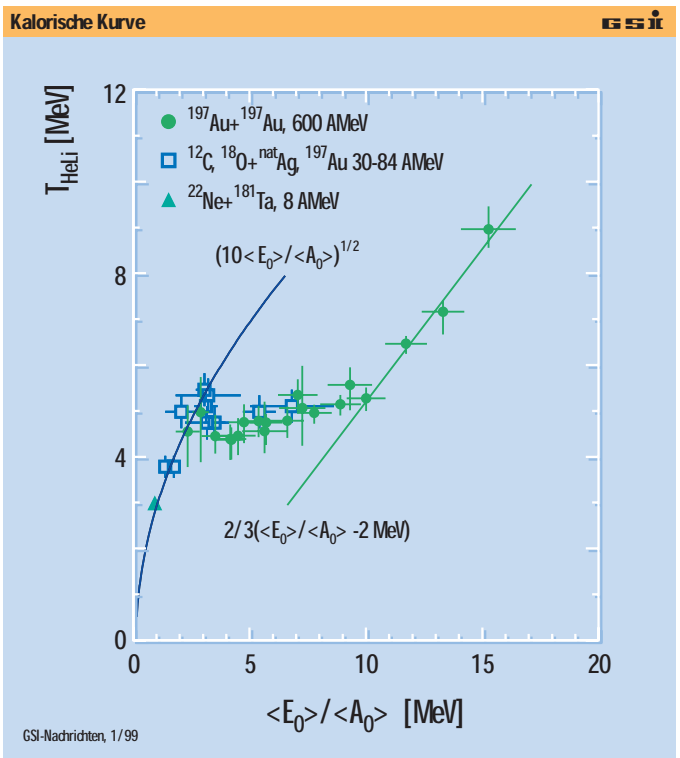
Abb. 3: Kalorische Kurve von ^{24}Mg, ^{27}Al und ^{40}Ca in einem externen Oszillator-Potential mit $\hbar\omega$=1 MeV.

Die kalorische Kurve wird wie folgt bestimmt. Durch zufällige Auslenkungen der Wellenpakete aus ihrer Grundzustandslage wird der Kern angeregt, dabei werden der Gesamtimpuls und der Gesamtdrehimpuls konstant gehalten. Um eine erste Äquilibrierung zwischen den Nukleonen und den Thermometerwellenpaketen zu erreichen, wird das System über eine lange Zeit (10 000 fm/c) propagiert (ein Nukleon braucht typischerweise 30 fm/c, um den Kern zu durchqueren). Danach werden die Energie des nuklearen Systems und des Thermometers jeweils nochmals über die gleichgroße Zeitspanne von 10 000 fm/c gemittelt. Für das Nukleonensystem ergibt sich so die mittlere Anregungsenergie. Aus der zeitgemittelten Energie des Thermometers kann die Temperatur bestimmt werden, da dieser Zusammenhang für ein ideales Quantengas unterscheidbarer Teilchen im harmonischen Oszillator bekannt ist.

Abbildung 2 zeigt die Einteilchendichte für ein System aus 8 Protonen und 8 Neutronen zu verschiedenen Zeiten. In der linken Spalte ist die Zeitentwicklung eines mit 3,5 AMeV angeregten ^{16}O-Kernes dargestellt. Die Anregungsenergie entspricht nach der Äquilibrierung einer Temperatur von 4 MeV. Man kann erkennen, daß sich aufgrund der verwendeten Zweiteilchenwechselwirkung im ^{16}O-Kern eine Alphateilchensubstruktur ausbildet. Bei dieser geringen Anregungsenergie ist kein Gas um den vibrierenden Kern zu sehen.

In der mittleren Spalte von Abb. 2 beträgt die Anregungsenergie 7 AMeV. Die hellen Gebiete, die mit einer hohen Dichte (Flüssigkeit) korrespondieren, sind von einer (dunklen) Gaswolke umgeben. Außerdem zerfällt das System oft in mehrere kleinere Tropfen, die in das Gas eingebettet sind.

Abb. 4: Die von der ALADIN-Kollaboration aus dem Aufbruch von Spektatorfragmenten bestimmte kalorische Kurve. Die Temperatur T_{Heli} wurde aus dem Verhältnis der Produktionsraten von ^{3}He zu ^{4}He und ^{6}Li zu ^{7}Li abgeleitet.



Die rechte Spalte zeigt das gleiche System, nun aber mit 11 AMeV Anregungsenergie. Hohe Dichten sind jetzt nur noch in der Hälfte der Momentaufnahmen zu sehen (erstes und drittes Bild), und wenn sich ein Tropfen bildet, ist er meistens nur klein.

Wie wir später sehen werden, entspricht den Anregungsenergien 7 und 11 AMeV eine Temperatur um 5 - 6 MeV im Koexistenzgebiet. Die zusätzliche Anregungsenergie von 4 AMeV führt dazu, daß mehr Flüssigkeit in Dampf umgewandelt wird, so daß ein Phasenübergang erster Ordnung klar zu beobachten ist. Das ist umso bemerkenswerter, als wir es mit einem System von nur 16 Nukleonen zu tun haben, das im FMD-Modell durch einen reinen Zustand mit einer kleinen Anzahl von Freiheitsgraden beschrieben wird (acht pro Nukleon, und zwar je drei für den mittleren Ort und den mittleren Impuls und zwei für die Breite dieser Größen). Außerdem ist wegen der Antisymmetrisierung die Zustandsdichte viel kleiner als in einem entsprechenden klassischen System.

Da das Behälterpotential (Abb. 1) sehr flach ist, ist auch der Gasdruck klein. Abschätzungen ergeben Drücke von 10^{-4} bis 10^{-2} MeV/fm^3, die deutlich unter dem kritischen Druck von 0,5 MeV/fm^3 liegen. Das Behälterpotential ist an der Oberfläche der in Abb. 2 eingezeichneten Würfel nur 1,2 MeV höher als im Zentrum.

Wir haben den Zusammenhang von Temperatur und Anregungsenergie für ^{24}Mg, ^{27}Al und ^{40}Ca mit demselben Behälterpotential ($\hbar\omega = 1$ MeV) bestimmt und in Abb. 3 dargestellt. Um die Daten vergleichbar zu machen, sind von den ermittelten Gesamtenergien die jeweiligen Grundzustandsenergien abgezogen worden.

Alle kalorischen Kurven zeigen klar drei unterschiedliche Abschnitte. Bei kleinen Anregungsenergien steigt die Temperatur mit der Anregungsenergie stark an; das erwartet man auch im Schalenmodell. Die Nukleonen bleiben im Kern gebunden, der sich wie ein Flüssigkeitstropfen verhält. Bei einer Anregungsenergie von ~ 3 AMeV flacht die Kurve ab und bleibt bis etwa ~ 11 AMeV konstant, um dann bei noch höheren Anregungsenergien wieder anzusteigen. Diese Abflachung bei T = 5-6 MeV ist indikativ für einen Phasenübergang erster Ordnung, an dem Flüssigkeit und Gas koexistieren. An der Breite des Koexistenzplateaus liest man eine latente Wärme von ~ 8 AMeV ab. Es sei darauf hingewiesen, daß im Gegensatz zu Kernmaterierechnungen das Plateau nicht durch eine Maxwellkonstruktion entstanden ist. Im Plateaubereich sind mit steigender Temperatur immer mehr Nukleonen in der Gasphase außerhalb der Flüssigkeit zu finden (Abb. 2).

Die kalorische Kurve (Abb. 3) hat eine verblüffende Ähnlichkeit mit der von der ALADIN-Gruppe beobachteten Kurve (Abb. 4). Lage und Ausdehnung des Plateaus in den FMD-Rechnungen, die ein Behälterpotential mit $\hbar\omega = 1$ MeV annehmen, stimmen gut mit dem Experiment überein. Es gibt aber auch wichtige Unterschiede. Im Experiment wird ein expandierendes Nichtgleichgewichtssystem untersucht, in der Rechnung ein eingeschlossenes Gleichgewichtssystem. Auch die verwendeten Thermometer unterscheiden sich; das Experiment benutzt ein Isotopenthermometer, das auf chemischem Gleichgewicht beruht, die Rechnung verwendet ein ideales Gasthermometer.

Eine Erklärung, warum die Beschreibung des experimentellen Ergebnisses trotzdem so gut ausfällt, könnte darin liegen, daß die angeregte Spektator-Materie schneller in das Koexistenzgebiet hineinäquilibriert als sie expandiert und kühlt. Die Annahme eines solchen Durchgangsgleichgewichts scheint zumindest im Koexistenzgebiet gerechtfertigt zu sein. ■

Literatur

[1] H. Feldmeier, Nucl.Phys. A515, 147(1990); H. Feldmeier, K. Bieler, J. Schnack, Nucl.Phys. A586, 493 (1995); H.Feldmeier, J. Schnack, Nucl.Phys. A583, 347 (1995); H.Feldmeier, J. Schnack, Prog. Part.Nucl. Phys. 39 (1997)

[2] J. Schnack, Dissertation, TH Darmstadt (1996)

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

[4] J. Pochodzalla et al.; Phys. Rev. Lett. 75, 1040 (1995); Prog. Part. Nucl. Phys. 39, 443 (1997)