

Kurzreichweitige Korrelationen in der Fermionischen Molekulardynamik

Vom Fachbereich Physik
der Technischen Hochschule Darmstadt

zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

genehmigte Dissertation von
Dipl.–Phys. Jürgen Schnack
aus Berlin

Darmstadt 1996
D17

Referent : Prof. Dr. W. Nörenberg
Korreferent : Prof. Dr. F. Beck

Tag der Einreichung : 24. April 1996
Tag der Prüfung : 05. Juni 1996

„Die Quantenmechanik ist so ein wunderbares Beispiel dafür, daß man einen Sachverhalt in völliger Klarheit verstanden haben kann und gleichzeitig doch weiß, daß man nur in Bildern und Gleichnissen von ihm reden kann.“

Werner Heisenberg

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung und Zusammenfassung	5
2. Das Modell der Fermionischen Molekulardynamik	11
2.1 Bewegungsgleichungen	12
2.2 Erhaltungsgrößen	13
2.2.1 Verallgemeinerte Poissonklammern	13
2.2.2 Gute Generatoren	14
2.3 Unkorrelierter Versuchszustand	15
2.4 Erwartungswerte	18
2.5 Bewegungsgleichungen für den unkorrelierten Versuchszustand	19
2.6 Freie Bewegung und harmonischer Oszillator	21
2.7 Grundzustände und Ereignisensemble	23
3. Statistische Eigenschaften	26
3.1 Vollständigkeitsrelation	28
3.1.1 Kohärente Zustände	28
3.1.2 Kohärente Zustände mit variablen Breiten	29
3.2 Kanonische Ensembles	30
3.2.1 Freie unterscheidbare Teilchen	31
3.2.2 Freie identische Fermionen	33
3.2.3 Unterscheidbare Teilchen im harmonischen Oszillator	35
3.2.4 Identische Fermionen im harmonischen Oszillator	36
3.3 Ergodenensemble	37
3.3.1 Fermionen im Oszillatorpotential – Kanonisches Ensemble	38
3.3.2 Fermionen im Oszillatorpotential – Ergodenensemble	39
3.3.3 Fermionen im Oszillator und der AMD-Versuchszustand	44
3.3.4 Unterscheidbare Teilchen im harmonischen Oszillator	45
3.3.5 Äquilibrierung zweier harmonischer Oszillatoren	47
3.4 Ausblick: Die Temperatur angeregter Kerne	52
4. Kurzreichweitige Korrelationen	57
4.1 Der unitäre Korrelationsoperator	60
4.1.1 Die Wirkung des unitären Korrelationsoperators	63
4.1.2 Korrelatoren als Koordinatentransformationen	64
4.1.3 Beispiele für Korrelatoren	68

4.2	Clusterentwicklung und Zweiteilchennäherung	72
4.2.1	Unkorrelierte Dichten	75
4.2.2	Korrelierte Dichten	76
4.2.3	Korrelierte Dichten für ${}^4\text{He}$	77
4.2.4	Korrelierte Dichten für Kernmaterie	80
4.3	Ableitung der Hamiltonfunktion	86
4.3.1	Erwartungswerte von Ein- und Zweiteilchenoperatoren	87
4.3.2	Der Zusammenhang Potential – Korrelator	90
4.3.3	Die genäherte Hamiltonfunktion	96
5.	Grundzustände und Schwerionenreaktionen	99
5.1	Grundzustandsdaten	100
5.2	Von Fusion bis Multifragmentation	106
5.2.1	Tief inelastische Reaktionen von ${}^{19}\text{F}$ und ${}^{27}\text{Al}$	106
5.2.2	Fragmentationsreaktionen von ${}^{12}\text{C}$ und ${}^{12}\text{C}$	111
5.2.3	${}^{40}\text{Ca}$ – ${}^{40}\text{Ca}$ bei $E = 35$ A MeV	114
A.	Grundlegende Formeln	117
A.1	Einteilchenwellenfunktion	117
A.2	Charakteristische Größen eines Wellenpaketes	118
A.3	Kinetische Energie	119
A.4	Äußerer harmonischer Oszillator	120
A.5	Ableitungen der Überlappmatrix	120
B.	Statistik	123
B.1	Matrizelemente zum statistischen Operator	123
B.1.1	Freie Bewegung	123
B.1.2	Harmonischer Oszillator	123
B.2	Kanonisches Ensemble des harmonischen Oszillators	124
B.3	Eigenfunktionen des Harmonischen Oszillators	124
C.	Kurzreichweitige Korrelationen	126
C.1	Schwerpunkt- und Relativkoordinaten	126
C.2	Wirkungsweise des unitären Korrelationsoperators	126
C.3	Wechselwirkungen und ihre Matrizelemente	127
C.3.1	Coulombwechselwirkung	127
C.3.2	Gaußförmige Potentiale	131
C.4	Alternative Parametrisierung	132
	Literaturverzeichnis	135

Abbildungsverzeichnis

3.1	Anregungsenergie freier Fermionen	34
3.2	Anregungsenergie identischer Fermionen im harmonischen Oszillator	36
3.3	Fermionen im harmonischen Oszillator	39
3.4	Anordnung der Zustände im Oszillator	40
3.5	Zeitentwicklung im HO ohne und mit Wechselwirkung	41
3.6	Besetzungswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von der Zeit	41
3.7	Besetzungszahlen im Ergodenensemble	42
3.8	Varianz der Fluktuationen der Besetzungszahlen	43
3.9	Mit dem AMD-Versuchszustand berechnete Besetzungszahlen	44
3.10	Besetzungswahrscheinlichkeiten mit Boltzmannstatistik	46
3.11	Unterscheidbare Teilchen in zwei Oszillatorpotentialen	48
3.12	Der nukleare Flüssig-Gas-Phasenübergang	54
3.13	Radiale Dichteverteilung beim Phasenübergang	55
4.1	Wirkung des Korrelationsoperators – Beispiel 1	69
4.2	Wirkung der Koordinatentransformation – Beispiel 2	70
4.3	Wirkung der Koordinatentransformation – Beispiel 3	71
4.4	Wirkung der Koordinatentransformation – Beispiel 4	72
4.5	Dichten von ${}^4\text{He} - 1$	79
4.6	Dichten von ${}^4\text{He} - 2$	80
4.7	Dichten von Kernmaterie	83
4.8	Spezielle Koordinatenwahl	85
4.9	Differenzterm zur kinetischen Energie	89
4.10	Potentialterm zur kinetischen Energie	90
4.11	Schematisches Modell: Potential und Energie	92
4.12	Schematisches Modell: Relativwellenfunktion	92
4.13	Dichten von ${}^4\text{He} - 3$	94
4.14	Dichten von ${}^4\text{He} - 4$	95
4.15	Effektives Potential	97
5.1	Bindungsenergien und Radien für Kerne mit $N = Z$	103
5.2	Bindungsenergien und Radien für Kerne mit $N = Z - 1$	103
5.3	Bindungsenergien und Radien für Kerne mit $N = Z + 1$	104
5.4	Bindungsenergien der Kohlenstoff- und Magnesiumisotope	104
5.5	Bindungsenergien der $A = 24$ - und $A = 27$ -Isobare	105
5.6	Definition der Winkel	107

5.7	$^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: TKE-1	108
5.8	$^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: TKE-2	109
5.9	$^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: TKE-3	109
5.10	$^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: TKE-4	110
5.11	$^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: $b = 6.7\text{fm}$	111
5.12	$^{12}\text{C}-^{12}\text{C}$: Zeitentwicklung	112
5.13	$^{12}\text{C}-^{12}\text{C}$: Totaler Wirkungsquerschnitt	113
5.14	$^{40}\text{Ca}-^{40}\text{Ca}$: Zeitentwicklung	115
B.1	Qualität der genäherten Eigenbasis	125
C.1	Approximation von $1/r$	128
C.2	Näherung zur Coulombenergie	129

1. Einführung und Zusammenfassung

Korrelierte Fermionensysteme stehen seit geraumer Zeit im Brennpunkt experimenteller Untersuchungen und theoretischer Beschreibungen. Das Feld korrelierter Fermionensysteme erstreckt sich dabei von der Atomphysik, in der z.B. die Eigenschaften flüssigen, atomaren Heliums studiert werden, bis zur Kernphysik, in der Nukleon–Nukleon–Korrelationen in Kernen untersucht werden, die vom kurzreichweitigen und abstoßenden Anteil der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung induziert werden.

Es ist das Ziel dieser Arbeit, Kerne und Reaktionen von Kernen in einem Modell zu beschreiben, das diese kurzreichweitigen Korrelationen einschließt.

In vielerlei Hinsicht kann und wird die Bewegung der Nukleonen als Bewegung in einem mittleren Feld aufgefaßt, das von allen anderen Nukleonen des Kerns aufgebaut wird. Diesem Konzept folgen das Fermigasmodell, das Hartree–Fock–Modell oder Schalenmodelle [30, 31]. Mit Hilfe dieser Modelle kann ein Großteil der grundlegenden Eigenschaften von Kerngrundzuständen und angeregten Zuständen erklärt werden.

Das Konzept des mittleren Feldes stößt jedoch an seine Grenzen, soll der Einfluß von Korrelationen untersucht werden. Die von der starken Abstoßung der Nukleonen bei kleinen Abständen herrührenden kurzreichweitigen Korrelationen unterdrücken die Vielteilchenwellenfunktion für kleine Relativabstände der Nukleonen, was sich in den experimentellen Daten auf vielerlei Art niederschlägt.

Zum einen spiegeln sich kurzreichweitige Korrelationen in den Kerndichten der Grundzustände wider. Aufgrund der kurzreichweitigen Abstoßung ist die Zweiteilchendichte für kleine Relativabstände unterdrückt. Sie zeigt damit zusätzlich zum Austauschloch ein Korrelationsloch. Dieses korrespondiert direkt mit einer Impulsverteilung, in der hohe Impulse, oberhalb des Fermiimpulses, besetzt und kleine Impulse, unterhalb des Fermiimpulses, entvölkert sind. In Elektronenstreuexperimenten kann nicht nur die räumliche, sondern auch die Impulsverteilung mit großer Genauigkeit gemessen werden [38, 39], so daß inzwischen ein guter Vergleich mit theoretischen Berechnungen möglich ist. An der Einteilchendichte im Ortsraum läßt sich die Sättigungseigenschaft der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung ablesen, die aus einem Zusammenspiel von starker kurzreichweitischer Abstoßung und Anziehung mit endlicher Reichweite resultiert.

Zum anderen ist der Einfluß der kurzreichweitigen Korrelationen in der Dynamik an-

geregter Kerne, zum Beispiel in Schwerionenreaktionen deutlich erkennbar. Dort bewirkt die kurzreichweitige Abstoßung harte Stöße zwischen den einzelnen Nukleonen, die dabei große Impulsüberträge erfahren können. Im Verlauf der Reaktion verdichtet sich die Kernmaterie, und es entsteht ein seitwärts gerichteter Fluß von Nukleonen und Fragmenten. Dabei ist die Streuung der Nukleonen am kurzreichweitigen abstoßenden Teil der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung in hohem Maße für die thermische Äquilibrierung der Reaktionsprodukte verantwortlich.

Viele theoretische Methoden haben sich bisher mit der Beschreibung kurzreichweitiger Korrelationen, insbesondere in Grundzuständen, befaßt. Es sind dies zum Beispiel die Methode der Jastrow–Korrelationsfunktionen [32], die Brücknersche G –Matrix–Theorie [40], die Generatorkoordinatenmethode [41] oder die explizite Verwendung von Superpositionen sehr vieler Slaterdeterminanten [42]. Alle diese Methoden gehen über die Beschreibung des Systems durch eine einzelne Slaterdeterminante hinaus. Sie sind in der Lage, die Einteilchendichte sowohl im Ortsraum, als auch im Impulsraum richtig wiederzugeben. Mit einer einzelnen Slaterdeterminante ist dies unmöglich. Deshalb kann man mit dem Hartree–Fock–Verfahren entweder die Dichte im Ortsraum oder im Impulsraum reproduzieren, niemals jedoch beide zugleich [43, 44].

Im Gegensatz zu der erfolgreichen Behandlung kurzreichweitiger Korrelationen in Grundzuständen steht ihre Beschreibung in dynamischen Modellen noch am Anfang. In dynamischen Modellen wird die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung zumeist in ein langreichweitiges mittleres Feld und eine kurzreichweitige Abstoßung, die als Stoßterm realisiert wird, aufgeteilt. Der Stoßterm, der aus einer G –Matrixrechnung motiviert werden kann [45, 46], nimmt dabei oft die Form einer Langevinkraft an, so z.B. in der Quantenmolekulardynamik [13, 14, 15, 16, 17] und der Antisymmetrischen Molekulardynamik [10, 11, 12]. Neben dem konzeptionellen Problem, wie eine solche Aufteilung der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung durchgeführt werden kann, zerstört eine Beschreibung der kurzreichweitigen Abstoßung durch Zufallskräfte möglicherweise empfindliche langreichweitige Korrelationen (Cluster), die sich im Verlauf der Reaktion ausbilden wollen.

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit ist es deshalb, einen Ansatz für die Behandlung der kurzreichweitigen Abstoßung vorzustellen, mit dem sowohl die Grundzustandseigenschaften der Kerne, d.h., ihre Bindungsenergien, ihre Ladungsradien und ihre Dichten, als auch Schwerionenreaktionen konsistent beschrieben werden können.

Dieser Ansatz besteht darin, einen Versuchszustand für das Vielteilchensystem aufzustellen, der die relevanten physikalischen Freiheitsgrade und Symmetrien enthält. Physikalische Größen ergeben sich dann als Erwartungswerte der entsprechenden Observablen bezüglich dieses Versuchszustandes. Grundzustand eines Kernes ist derjenige Versuchszustand, für den der Erwartungswert des Hamiltonoperators minimal ist (Ritzsches Variationsverfahren). Die Dynamik des Systems folgt aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip, das Bewegungsgleichungen für die Parameter liefert, die den Versuchszustand charakterisieren.

Für Nukleonen im Kern, die Fermionen sind und dem Pauliprinzip gehorchen, muß der

Versuchszustand antisymmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung sein, da die Dichte im Kern so hoch ist, daß sich die Nukleonen wie ein entartetes Fermigas verhalten. Diese Symmetrieeigenschaft des Versuchszustandes, die sich nicht durch eine Wechselwirkung simulieren läßt, garantiert, daß der modellierte Kern Schalenstrukturen besitzt und die richtigen thermodynamischen Eigenschaften der Fermi–Dirac–Statistik aufweist, die sich sowohl in angeregten Kernen als auch in den Fragmentverteilungen bei Schwerionenreaktionen zeigen.

Weiterhin soll der Versuchszustand aus Einteilchenzuständen aufgebaut sein, die als Gaußsche Wellenpakete im Phasenraum lokalisiert sind. Diese Wellenpakete enthalten als zeitabhängige Freiheitsgrade ihren mittleren Ort, ihren mittleren Impuls, die komplexe Breite des Paketes, die die Varianz der Orts- und Impulsverteilung wiedergibt, sowie Spin- und Isospinfreiheitsgrade. Gaußsche Wellenpakete sind das quantenmechanische Analogon, das klassischen Punktteilchen am nächsten kommt, ohne die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation zu verletzen. Sie sind weiterhin für die freie Bewegung und die Bewegung im gemeinsamen Potential eines harmonischen Oszillators mit der Lösung der Schrödingergleichung identisch. Die Verwendung lokalisierter Einteilchenzustände, die die „Moleküle“ des Modells bilden, dient dazu, die großen Fluktuationen zu beschreiben, die im Ausgangskanal von Schwerionenreaktionen beobachtet werden. Diese Fluktuationen sind schon bei kleinen Anregungsenergien im Bereich tief inelastischer Reaktionen zu beobachten und führen bei höheren Energien von $E_{\text{Lab}} \gtrsim 15 A \text{ MeV}$ zur Multifragmentation, da die Nukleonen zu schnell sind, um ein gemeinsames mittleres Feld auszubilden.

Bis zu diesem Punkt entspricht dieser Ansatz der Fermionischen Molekulardynamik, wie sie in den Ref. [2, 8, 23] vorgestellt ist. Ihr Versuchszustand $|Q(t)\rangle$ ist eine Slaterdeterminante aus Einteilchenwellenpaketen $|q_k(t)\rangle$

$$|Q(t)\rangle = \mathcal{A}(|q_1(t)\rangle \otimes \cdots \otimes |q_A(t)\rangle) . \quad (1.1)$$

Der neue Ansatz dieser Arbeit bezieht kurzreichweitige Korrelationen in den Versuchszustand mit ein und geht damit über die Beschreibung des wechselwirkenden Fermionensystems durch eine einzelne Slaterdeterminante hinaus. Dies geschieht mit Hilfe eines unitären Korrelationsoperators \mathcal{C} , der den unkorrelierten Versuchszustand $|Q(t)\rangle$ in den korrelierten Versuchszustand

$$\mathcal{C} |Q(t)\rangle \quad (1.2)$$

transformiert, der keine einzelne Slaterdeterminante mehr ist, sondern einer Superposition so vieler Slaterdeterminanten entspricht, daß eine explizite Entwicklung praktisch unmöglich ist. Der Operator \mathcal{C} wirkt dabei auf die Vielteilchenwellenfunktion, indem er deren Amplitude für kleine Relativabstände der Nukleonen unterdrückt. Seine Wirkungsweise ähnelt der der Jastrowschen Korrelationsfunktionen [32], die aber nicht unitär wirken. Die Unitarität des Korrelationsoperators bringt jedoch große Vorteile mit sich [36, 37].

Da \mathcal{C} die Norm des Versuchszustandes erhält, lassen sich Erwartungswerte eines beliebigen Operators \mathcal{B} bezüglich des korrelierten Versuchszustandes ebenso gut als Er-

wartungswerte des effektiven Operators $\underline{B}_{\text{eff}} = \underline{C}^\dagger \underline{B} \underline{C}$ bezüglich des unkorrelierten Versuchszustandes berechnen, d.h.

$$\langle Q(t) | \underline{C}^\dagger \underline{B} \underline{C} | Q(t) \rangle = \langle Q(t) | \underline{B}_{\text{eff}} | Q(t) \rangle . \quad (1.3)$$

Wenn \underline{C} , wie in dieser Arbeit angenommen, zeitunabhängig ist, zeigt sich weiterhin, daß auch die Bewegungsgleichungen, sowohl die Schrödingergleichung als auch Näherungslösungen des zeitabhängigen Variationsprinzips, ihre Form behalten. Es ist äquivalent, die Zeitentwicklung des korrelierten Versuchszustandes mit dem vollen Hamiltonoperator \underline{H} oder die des unkorrelierten Versuchszustandes mit dem effektiven Hamiltonoperator $\underline{H}_{\text{eff}}$ zu beschreiben, d.h.

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \underline{C} | Q(t) \rangle &= \underline{H} \underline{C} | Q(t) \rangle \\ \Leftrightarrow i \frac{d}{dt} | Q(t) \rangle &= \underline{H}_{\text{eff}} | Q(t) \rangle . \end{aligned} \quad (1.4)$$

Der Wirkungsweise des unitären Korrelationsoperators, für den bisher keine explizite Darstellung angegebbar schien [36, 37], liegt folgende Idee zugrunde. Da es das Ziel ist, die Wellenfunktion für kleine Relativabstände von Nukleonenpaaren zu unterdrücken, ist der Korrelator als ortsabhängiger Translationsoperator in den Relativkoordinaten konstruiert. Diese Transformation läßt sich nicht mehr durch einen Ein- oder Zweiteilchenoperator ausdrücken, vielmehr ist der Operator \underline{C} aus Operatoren zu allen möglichen Teilchenzahlen zusammengesetzt.

Aus diesem Grund wird in der Arbeit eine Clusterentwicklung vorgestellt, die für Zweiteilchencluster abgebrochen wird. In dieser Zweiteilchennäherung lassen sich die Erwartungswerte von Ein- und Zweiteilchenoperatoren sowie die korrelierten Ein- und Zweiteilchendichten explizit ausrechnen.

Der in dieser Arbeit verwendete Korrelator ergibt sich ebenfalls aus dem Ritzschen Variationsprinzip [35]. Da die Auswirkungen des kurzreichweitigen abstoßenden Anteils der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung ähnlich einer Randbedingung wirken, wird derselbe Korrelationsoperator für alle Grundzustände und angeregten Zustände angesetzt. Das heißt, man nimmt an, daß der stark abstoßende Teil des Potentials unabhängig von der Größe des Kerns oder der Anregung die Vielteilchenwellenfunktion für jedes Nukleonenpaar aus dem Bereich des abstoßenden Anteils ($|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| \lesssim 0.5 \text{ fm}$) verdrängt. Die Parameter des Korrelationsoperators werden an einem Kern, dem ${}^4\text{He}$ -Kern, durch Minimierung der Energie angepaßt.

In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, daß die mit diesem Korrelator schlußendlich berechneten Grundzustände und Reaktionen Eigenschaften besitzen, wie man sie für eine realistische Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung erwartet.

Die korrelierten Kerngrundzustände weisen die Sättigungseigenschaft der Bindungsenergie auf. Trotz der Verwendung einer recht einfachen realistischen Wechselwirkung ergeben sich hervorragende Werte für die Bindungsenergien und Ladungsradien. Die Wiedergabe dieser grundlegenden Kerneigenschaften ist eine unumgängliche Voraussetzung, um Schwerionenreaktionen sinnvoll und glaubwürdig simulieren zu können

und Vorhersagen zu treffen, die über die durch Erhaltungssätze dominierten globalen Phänomene hinausgehen.

Die untersuchten Schwerionenreaktionen zeigen, daß mit dem Modell der Fermionischen Molekulardynamik Reaktionen bei unterschiedlichen Energien untersucht werden können. Fusion, unvollständige Fusion, tief inelastische Reaktionen und Fragmentationsreaktionen mit den jeweils typischen Phänomenen können mit einem Ansatz beschrieben werden. Das Modell zeigt die Dissipation der kinetischen Energie für tief inelastische Reaktionen ebenso, wie es Fragmentation, Evaporation von Nukleonen und Nukleonenfluß bei höheren Energien wiedergibt.

Da die zeitliche Entwicklung eines einzelnen Ausgangszustandes durch deterministische Bewegungsgleichungen beschrieben wird, werden statistische Größen durch Ensemblemittelung gewonnen.

Das Ereignisensemble faßt bei Schwerionenreaktionen alle Simulationen zusammen, die zu einer Einschußenergie gehören. Die einzelnen Mitglieder des Ensembles, die sich zum Beispiel durch ihren Stoßparameter oder die Orientierung der intrinsischen Deformation unterscheiden, werden ihrem Gewicht entsprechend berücksichtigt. Obwohl die Bewegungsgleichungen der Fermionischen Molekulardynamik deterministisch sind, kommt es innerhalb des Ereignisensembles zu großen Fluktuationen. Ursache dafür ist die Nichtlinearität der Bewegungsgleichungen für die Parameter, durch die die Dynamik stark von den Anfangsbedingungen abhängt. Selbst wenn die Vielteilchenzustände zweier Mitglieder des Ensembles am Beginn der Reaktion einen großen Überlapp besaßen, können sie sich am Ende der Reaktion stark voneinander unterscheiden, zum Beispiel eine ganz andere Fragmentpartition aufweisen. Dieses stochastische Verhalten ist auch der Grund dafür, daß anfänglich vorhandene Phasenkorrelationen zerstört werden und die Mittelung über die Anfangszustände inkohärent erfolgen kann.

Das Ergodenensemble ermöglicht die Untersuchung thermodynamischer Eigenschaften des Modells durch Zeitmittelung der zu untersuchenden Erwartungswerte. Über die Ergodenhypothese hängen diese zeitgemittelten Erwartungswerte mit den Mittelwerten des kanonischen Ensembles zusammen. An mehreren Beispielsystemen wird demonstriert, daß die untersuchten Systeme ergodisch sind und die zeitgemittelten Erwartungswerte mit denen des kanonischen Ensembles übereinstimmen. Aufgrund dieser Äquivalenz ist es möglich, die kalorische Kurve angeregter Kerne dynamisch aufzunehmen und den nuklearen Flüssigkeit–Gas–Phasenübergang zu studieren.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert.

Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit den allgemeinen Grundlagen der Fermionischen Molekulardynamik, d.h. mit dem zeitabhängigen Variationsprinzip, den aus dem Variationsprinzip folgenden Erhaltungssätzen und der Dynamik, wie sie sich für eine Slaterdeterminante als Versuchszustand ergibt.

Im dritten Kapitel werden die thermostatischen und thermodynamischen Eigenschaften der Fermionischen Molekulardynamik untersucht. Dabei wird in der ersten Hälfte

die Vollständigkeitsrelation für die nicht orthogonalen Versuchszustände des Modells entwickelt, die zur Berechnung der Zustandssumme nötig ist. In der zweiten Hälfte wird das Ergodenensemble definiert, in dem die thermodynamischen Eigenschaften des Modells am Beispiel von vier Fermionen im gemeinsamen Potential des harmonischen Oszillators untersucht werden. Als Ausblick wird ein Verfahren untersucht, mit dem die kalorische Kurve angeregter Kerne im Modell bestimmt werden kann.

Das vierte Kapitel stellt das Konzept eines unitären Korrelationsoperators ausführlich vor. Es werden verschiedene Korrelatoren diskutiert und ihre Wirkungsweise erläutert. Die Clusterentwicklung wird definiert und eine Zweiteilchennäherung für die Erwartungswerte von Operatoren durchgeführt. Am Ende des Kapitels wird der als Hamiltonfunktion bezeichnete Erwartungswert des Hamiltonoperators in der Zweiteilchennäherung berechnet.

Im letzten Kapitel wird gezeigt, daß sich mit der abgeleiteten Hamiltonfunktion, die die kurzreichweitige Abstoßung der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung enthält, die Grundzustandseigenschaften sowohl der stabilen Isotope als auch vieler instabiler Isotope beschreiben lassen. Die Bindungsenergien stimmen sehr gut mit den experimentellen Werten überein. Im Gegensatz zu Rechnungen mit einem effektiven Potential, zum Beispiel dem Potential V_2 von Volkov [49, 5], das keine starke kurzreichweitige Abstoßung besitzt, tritt jetzt eine Sättigung der Bindungsenergie ein. Auch die Ladungsradien der Kerne stimmen mit den experimentellen innerhalb von etwa 5% überein. Als Anwendung der Fermionischen Molekulardynamik in der Schwerionenphysik werden Kern–Kern–Stöße bei verschiedenen Energien untersucht. Für die tief inelastische Reaktion von ^{19}F und ^{27}Al , die Fragmentationsreaktion von ^{12}C und ^{12}C und als Ausblick die Fragmentationsreaktion von ^{40}Ca und ^{40}Ca zeigt die FMD die für diese Reaktionen typischen Phänomene.

Die Fermionische Molekulardynamik erweist sich damit als ein Modell, das die Grundzustandseigenschaften der Kerne und Reaktionen zwischen ihnen mit einem konsistenten Ansatz beschreibt. Sie beinhaltet dabei nicht nur das Pauliprinzip, sondern auch die in dieser Arbeit neu eingeführten kurzreichweitigen Korrelationen des Vielteilchenzustandes. In der weiteren Entwicklung des Modells wird die Verbesserung der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung im Vordergrund stehen. Derzeitig werden erste Untersuchungen mit dem Bonn–Potential [47] durchgeführt [50]. Insbesondere kann man erwarten, daß durch die Hinzunahme der Spin–Bahn- und Tensorterme des Potentials die etwas zu dominant ausgeprägte Alphaclustersymmetrie der Grundzustände gebrochen wird, was zu einer Vergrößerung der Fluktuationen führen kann.

2. Das Modell der Fermionischen Molekulardynamik

Das Ziel der Fermionischen Molekulardynamik (FMD) ist es, fermionische Vielteilchensysteme, ihre Grundzustände und ihre Dynamik in Schwerionenreaktionen zu beschreiben. Im Modell wird das betrachtete System durch einen parametrisierten antisymmetrischen Versuchszustand dargestellt, der die physikalisch relevanten Freiheitsgrade enthält. Im einfachsten Fall handelt es sich dabei um eine Slaterdeterminante von Einteilchenzuständen. Dieser Fall wird in den Abschnitten 2.3 bis 2.6 betrachtet. Als Versuchszustände können aber ebensogut korrelierte Vielteilchenzustände angesetzt werden, die den repulsiven und kurzreichweitigen Anteil der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung berücksichtigen. Wie sich Systeme verhalten, wenn sie mit korrelierten Versuchszuständen beschrieben werden, wird im Kapitel „Kurzreichweitige Korrelationen“ untersucht. In jedem Fall handelt es sich bei den Versuchszuständen der FMD um antisymmetrische Vielteilchenzustände – dafür steht das Attribut „fermionisch“.

Als Einteilchenzustände, aus denen der Vielteilchenzustand gebildet wird, werden in der Fermionischen Molekulardynamik Gaußsche Wellenpakete verwendet, die im Phasenraum lokalisiert sind. Sie bilden die „Moleküle“ der Molekulardynamik und sind den klassischen Punktteilchen am nächsten verwandt, ohne dabei die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation zu verletzen.

Die „Dynamik“ des Vielteilchensystems wird über die Zeitabhängigkeit der den Versuchszustand charakterisierenden Parameter beschrieben. Diese Bewegungsgleichungen ergeben sich aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip. Sie bestimmen die Zeitentwicklung des Versuchszustandes eindeutig.

Die Wahl des Versuchszustandes und des Hamiltonoperators sind nicht unabhängig voneinander möglich. Insbesondere in der Kernphysik kann eine realistische Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung nicht zusammen mit einer Slaterdeterminante als Versuchszustand benutzt werden, da diesem Versuchszustand die nötigen Freiheitsgrade fehlen, um kurzreichweitige Korrelationen auszubilden. Soll der Einfluß solcher kurzreichweitigen Korrelationen untersucht werden, muß der Versuchszustand um die nötigen Freiheitsgrade erweitert werden.

In Kernstrukturrechnungen werden deshalb oft einfache Versuchszustände und effekti-

ve Hamiltonoperatoren verwendet, die die Mängel des Versuchszustandes wieder ausgleichen. Dazu zählen die Brücknersche G -Matrixtheorie, Hartree-Fock-Rechnungen mit der Skyrme-Kraft und Schalenmodellrechnungen. Diese Methoden sind ausführlich untersucht und dargestellt worden, einen Überblick gibt zum Beispiel das Buch von P. Ring und P. Schuck [30].

2.1 Bewegungsgleichungen

Die Bewegungsgleichungen der Fermionischen Molekulardynamik basieren auf dem zeitabhängigen Variationsprinzip

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \langle Q(t) | i \frac{d}{dt} - \underline{H} | Q(t) \rangle = 0 , \quad (2.1)$$

in welchem der Zustand $\langle Q(t) |$ variiert wird. Erstreckt sich die Variation des Zustandes $\langle Q(t) |$ über den gesamten Hilbertraum, so liefert das Variationsprinzip als Bewegungsgleichung für $| Q(t) \rangle$ die zeitabhängige Schrödingergleichung. Ist der Versuchszustand eingeschränkt, so ergeben sich Bewegungsgleichungen für die den Zustand beschreibenden Parameter.

Aber nicht nur die Bewegungsgleichungen der FMD können aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip abgeleitet werden, auch die Bewegungsgleichungen anderer Modelle, wie etwa die des Hartree-Fock-Verfahrens, der Antisymmetrisierten Molekulardynamik (AMD) [10, 11, 12] oder der Quantenmolekulardynamik (QMD) [13, 14, 15, 16, 17, 18], soweit sie keinen Stoßterm beinhalten, ergeben sich aus dem Variationsprinzip. Trotz dieser Gemeinsamkeit unterscheiden sich die aufgeführten Modelle deutlich, da sie von verschiedenen Versuchszuständen ausgehen.

Im Modell der Fermionischen Molekulardynamik bezeichnet $Q(t)$ die Menge der Parameter $Q(t) = \{q_\mu(t) | \mu = 1, 2, \dots\}$, die einen Versuchszustand eindeutig charakterisieren. Der Operator \underline{H} ist der Hamiltonoperator des Systems (In dieser Arbeit werden alle Operatoren durch eine Wellenlinie unter dem Buchstaben gekennzeichnet.).

Die Variation (2.1) erfolgt bezüglich eines jeden Parameters $q_\mu(t)$, wobei die Endpunkte festgehalten werden, d.h. $\delta q_\mu(t_1) = \delta q_\mu(t_2) = 0$.

Als Resultat erhält man Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\nu} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_\nu} = 0 \quad , \quad \nu = 1, 2, \dots , \quad (2.2)$$

denen die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L}(Q(t), \dot{Q}(t)) = \langle Q(t) | i \frac{d}{dt} - \underline{H} | Q(t) \rangle = \mathcal{L}_0(Q(t), \dot{Q}(t)) - \mathcal{H}(Q(t)) \quad (2.3)$$

zugrunde liegt.

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik ist diese Lagrangefunktion linear in den Geschwindigkeiten

$$\mathcal{L}_0(Q(t), \dot{Q}(t)) = \langle Q(t) | i \frac{d}{dt} | Q(t) \rangle = \sum_{\mu} \langle Q(t) | i \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} | Q(t) \rangle \dot{q}_{\mu}, \quad (2.4)$$

enthält dafür aber die Zeitableitungen aller Parameter, d.h. sowohl der Koordinaten als auch der Impulse.

$\mathcal{H}(Q(t))$ bildet die Hamiltonfunktion und ist als Erwartungswert des Hamiltonoperators definiert.

Die Euler–Lagrange–Gleichungen lassen sich in allgemeiner Form als gekoppelte Hamiltonsche Bewegungsgleichungen schreiben

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu}(Q) \dot{q}_{\nu} = - \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \langle Q(t) | \tilde{H} | Q(t) \rangle. \quad (2.5)$$

Dabei ist $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ eine schiefsymmetrische Matrix, die im allgemeinen von allen Parametern $Q(t) = \{q_{\mu}(t)\}$ abhängt

$$\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q) = \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_{\mu} \partial q_{\nu}} - \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_{\nu} \partial q_{\mu}}, \quad (2.6)$$

und die die geometrische Struktur der Parametermannigfaltigkeit widerspiegelt, wie sie durch den Versuchszustand vorgegeben ist. Diese Struktur ist unterschiedlich für antisymmetrische, symmetrische und einfache Produktzustände.

2.2 Erhaltungsgrößen

Die Untersuchung von Operatoren, deren Erwartungswerte in einem durch die Bewegungsgleichungen (2.5) beschriebenen System zeitunabhängig sind, führt auf den Begriff der verallgemeinerten Poissonklammern. Die Verallgemeinerung der aus der klassischen Mechanik bekannten Poissonklammern besteht darin, sie für nichtkanonische Variable zu definieren. Dies geschieht mit Hilfe der schiefsymmetrischen Matrix $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$, die die symplektische Struktur der Bewegungsgleichungen bestimmt.

Weiterhin kann eine Klasse von Operatoren angegeben werden, deren Zeitabhängigkeit zusätzlich durch die Vertauschung mit dem Hamiltonoperator gegeben ist. Es sind dies Generatoren, unter denen die Menge der Versuchszustände invariant ist. Mit Hilfe dieser Klasse von Operatoren ist es möglich, den Zusammenhang von Lösungen des Variationsprinzips mit der Lösung der Schrödingergleichung zu beleuchten.

2.2.1 Verallgemeinerte Poissonklammern

Sei \mathcal{B} ein zeitunabhängiger Operator mit dem Erwartungswert

$$\mathcal{B}(t) = \langle Q(t) | \mathcal{B} | Q(t) \rangle. \quad (2.7)$$

Da die Zeitabhängigkeit von $\mathcal{B}(t)$ durch die Zeitabhängigkeit der Parameter gegeben ist, läßt sich die Zeitableitung des Erwartungswertes über die Zeitableitung der Parameter bestimmen

$$\frac{d}{dt} \mathcal{B}(t) = \sum_{\nu} \dot{q}_{\nu} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial q_{\nu}} = \sum_{\mu, \nu} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{\mu}} \mathcal{A}_{\mu\nu}^{-1} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial q_{\nu}} = \{\mathcal{H}, \mathcal{B}\} . \quad (2.8)$$

Die letzte Identität definiert die verallgemeinerten Poissonklammern [1]

$$\{\mathcal{H}, \mathcal{B}\} := \sum_{\mu, \nu} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{\mu}} \mathcal{A}_{\mu\nu}^{-1} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial q_{\nu}} , \quad (2.9)$$

in denen $\mathcal{A}_{\mu\nu}^{-1}$ die Inverse der Matrix $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ bezeichnet. Die Gleichung (2.9) besitzt damit die symplektische Struktur der Hamiltonschen Dynamik, allerdings für nicht kanonische Variable q_{μ} .

Somit ist der Erwartungswert eines zeitunabhängigen Operators \underline{B} erhalten, wenn die Poissonklammer mit dem Erwartungswert des Hamiltonoperators verschwindet

$$\frac{d}{dt} \mathcal{B}(t) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \{\mathcal{H}, \mathcal{B}\} = 0 . \quad (2.10)$$

Da $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ und damit auch $\mathcal{A}_{\mu\nu}^{-1}$ schief-symmetrisch sind, ist die Energie stets erhalten. Dies gilt unabhängig von der konkreten Parametrisierung des Versuchszustandes, vorausgesetzt, die Bewegungsgleichungen werden aus dem Variationsprinzip (2.1) abgeleitet.

2.2.2 Gute Generatoren

Eine weitere wichtige Klasse von Operatoren wird durch hermitesche Generatoren gebildet, die die Menge der Versuchszustände in sich selbst überführen.

Sei \underline{G} ein hermitescher Generator und \underline{U} die unitäre Transformation

$$\underline{U} = \exp(i\epsilon \underline{G}) \quad , \quad \epsilon \in \mathbb{R} , \quad (2.11)$$

dann gilt der folgende Satz [5, 8].

Satz: Bildet \underline{U} die Menge der Versuchszustände auf sich selbst ab

$$\underline{U} |Q\rangle = |Q'\rangle \in \{|Q\rangle\} , \quad (2.12)$$

dann folgt aus den Bewegungsgleichungen für den Erwartungswert von \underline{G}

$$\mathcal{G}(t) = \langle Q(t) | \underline{G} | Q(t) \rangle , \quad (2.13)$$

daß seine Zeitableitung sowohl durch die verallgemeinerten Poissonklammern als auch durch den Erwartungswert des Kommutators mit $i\underline{H}$ gegeben ist

$$\frac{d}{dt} \mathcal{G}(t) = \{\mathcal{H}, \mathcal{G}\} = \langle Q(t) | i[\underline{H}, \underline{G}] | Q(t) \rangle . \quad (2.14)$$

Die Beziehung (2.14) ist aus zwei Gründen sehr nützlich. Zum einen ist der Erwartungswert von \mathcal{G} automatisch erhalten, wenn \mathcal{G} mit dem Hamiltonoperator vertauscht. Dies gilt zum Beispiel für den Gesamtimpuls, wenn ein im Ort verschobener Versuchszustand wieder ein gültiger Versuchszustand ist und der Hamiltonoperator translationsinvariant ist, d.h., der Gesamtimpuls mit ihm vertauscht.

Zum anderen stellt die Beziehung (2.14) eine Verbindung zu Ehrenfests Theorem her und erläutert, inwiefern eine Lösung des Variationsprinzips die Lösung der Schrödingergleichung approximiert. Der Erwartungswert eines Generators \mathcal{G} , der die Menge der Versuchszustände unverändert läßt, entwickelt sich für eine kurze Zeit Δt so wie der mit der exakten Lösung berechnete Erwartungswert, wobei die exakte Lösung gegeben ist durch

$$\mathcal{G}_{\text{exact}}(t + \Delta t) = \langle Q(t) | e^{i\Delta t \mathcal{H}} \mathcal{G} e^{-i\Delta t \mathcal{H}} | Q(t) \rangle = \mathcal{G}(t + \Delta t) + O(\Delta t^2), \quad (2.15)$$

das heißt

$$\frac{d}{dt} \mathcal{G}(t) = \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{\text{exact}}(t). \quad (2.16)$$

Ein Beispiel eines solchen Generators ist der Operator der kinetischen Energie. Da die Versuchszustände der Fermionischen Molekulardynamik (2.18) eine Lösung der Schrödingergleichung im wechselwirkungsfreien Fall sind, gilt für sie

$$\exp(-i\tau \mathcal{T}) | Q(t) \rangle = | Q(t + \tau) \rangle. \quad (2.17)$$

Mit Wechselwirkung sind die Versuchszustände $| Q(t) \rangle$ zwar keine Lösung der Schrödingergleichung mehr, im Sinne von Gleichung (2.16) wird der Erwartungswert von \mathcal{T} aber gut approximiert.

Gute Generatoren spielen also für die Versuchszustände des Modells die Rolle guter Quantenzahlen, diese Operatoren führen nicht aus der Menge der Versuchszustände heraus und ihre Erwartungswerte entwickeln sich für kurze Zeiten wie die exakten.

2.3 Unkorrelierter Versuchszustand

Die klassische Molekulardynamik beschreibt Vielteilchensysteme durch Newtonsche Bewegungsgleichungen für die Schwerpunktskoordinaten der Moleküle.

An die Stelle klassischer Punktteilchen werden in der Fermionischen Molekulardynamik Wellenpakete gesetzt, die im Phasenraum lokalisiert sind. Sie stellen die größtmögliche Annäherung an die klassischen Punktteilchen dar, ohne die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation zu verletzen. Jedes Nukleon — es entspricht dem Molekül —

wird durch ein Gaußsches Wellenpaket parametrisiert.

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x} | q(t) \rangle &= \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{b}(t))^2}{2 a(t)} + i\eta(t) \right\} \otimes | \chi(t), \phi(t) \rangle \otimes | \xi \rangle \quad (2.18) \\
&\propto \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{r}(t))^2}{2 a(t)} + i \vec{x} \cdot \vec{p}(t) \right\} \otimes | \chi(t), \phi(t) \rangle \otimes | \xi \rangle \\
a(t) &= a_R(t) + i a_I(t) \\
\vec{b}(t) &= \vec{r}(t) + i a(t) \vec{p}(t)
\end{aligned}$$

Das Gaußsche Wellenpaket ist durch die Parameter $q(t) = \{ \vec{r}(t), \vec{p}(t), a(t), \chi(t), \phi(t), \xi \}$ gekennzeichnet. Dabei entsprechen $\vec{r}(t)$ und $\vec{p}(t)$ den klassischen Größen Ort und Impuls und ergeben sich als Erwartungswerte des Orts- und Impulsoperators

$$\vec{r}(t) = \langle q(t) | \vec{x} | q(t) \rangle, \quad \vec{p}(t) = \langle q(t) | \vec{k} | q(t) \rangle. \quad (2.19)$$

Der komplexe Parameter $a(t)$ ist mit den Verteilungen des Einteilchenzustandes in Orts- und Impulsraum verknüpft. Der Realteil der Breite $a_R(t)$ bestimmt die Varianz der Impulsverteilung des Zustandes

$$\frac{3}{2} \frac{1}{a_R(t)} = \langle q(t) | (\vec{k} - \vec{p}(t))^2 | q(t) \rangle, \quad (2.20)$$

Real- und Imaginärteil zusammen die Varianz der Ortsverteilung

$$\frac{3 a_R^2(t) + a_I^2(t)}{2 a_R(t)} = \langle q(t) | (\vec{x} - \vec{r}(t))^2 | q(t) \rangle. \quad (2.21)$$

Der nichtklassische Freiheitsgrad der Breite ermöglicht es dem Wellenpaket, Ort- oder Impulsverteilung im Zeitverlauf zu ändern. Verschwindet der Imaginärteil $a_I(t)$ von $a(t)$, so handelt es sich bei dem Wellenpaket um ein Paket minimaler Unbestimmtheit.

Der komplexe Parameter $\eta(t)$ trägt der Phase und der Norm Rechnung. Er wird im weiteren nicht benötigt, da die Normierung explizit ausgeführt wird und sich die Phase bei der Bildung von Erwartungswerten weghebt.

Weiterhin kann der Spinfreiheitsgrad des Einteilchenzustandes durch zwei Winkel $\chi(t)$ und $\phi(t)$ parametrisiert werden, so daß sich die folgende Beziehung zwischen dem Erwartungswert des Spinoperators und den Parametern ergibt

$$\vec{\sigma}(t) = \langle q(t) | \vec{\sigma} | q(t) \rangle = \begin{pmatrix} \sin \chi(t) \cos \phi(t) \\ \sin \chi(t) \sin \phi(t) \\ \cos \chi(t) \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

$\vec{\sigma}(t)$ ist ein Vektor im dreidimensionalen Raum mit der Quantisierungsachse in z -Richtung und hat die Bedeutung einer „klassischen“ Spinrichtung, obwohl es natürlich keinen klassischen Spin gibt, der lediglich die Richtung, aber nicht den Betrag ändern kann.

Auch für die Isospinkomponente $|\xi\rangle$ könnte dieser Formalismus angewandt werden, was bedeuten würde, daß sich Proton und Neutron ineinander umwandeln können. Im Sinne der Interpretation der Einteilchenwellenpakete als Moleküle werden in der Fermionischen Molekulardynamik Rotationen im Isospinraum nicht zugelassen; $|\xi\rangle$ beschreibt entweder ein Proton $|\xi\rangle = |\text{Proton}\rangle$ oder ein Neutron $|\xi\rangle = |\text{Neutron}\rangle$.

Um ein System aus A Fermionen zu beschreiben, wird aus den Einteilchenzuständen $|q(t)\rangle$ ein antisymmetrischer Vielteilchenzustand gebildet. Im einfachsten Fall ist dies eine Slaterdeterminante, die im folgenden mit $|Q(t)\rangle$ bezeichnet wird

$$|Q(t)\rangle = \frac{1}{\langle \widehat{Q}(t) | \widehat{Q}(t) \rangle^{\frac{1}{2}}} |\widehat{Q}(t)\rangle \quad (2.23)$$

$$|\widehat{Q}(t)\rangle = \frac{1}{A!} \sum_{\pi} \text{sgn}(\pi) |q_{\pi(1)}(t)\rangle \otimes |q_{\pi(2)}(t)\rangle \otimes \cdots \otimes |q_{\pi(A)}(t)\rangle .$$

Dabei läuft die Summe über alle Permutationen π , $\text{sgn}(\pi)$ gibt das Vorzeichen der Permutation wieder. Die Einteilchenzustände $|q_k(t)\rangle$ sind jetzt durchnummeriert, wobei k die Einteilchenzustände zählt und $q_k(t) = \{\vec{r}_k(t), \vec{p}_k(t), a_k(t), \chi_k(t), \phi_k(t), \xi_k\}$ die Parameter des Einteilchenzustandes $|q_k(t)\rangle$ umfaßt. Die Menge der Parameter des Vielteilchenzustandes setzt sich aus den Parametern der Einteilchenzustände zusammen

$$Q(t) = \{\vec{r}_1(t), \vec{p}_1(t), a_1(t), \chi_1(t), \phi_1(t), \xi_1; \vec{r}_2(t), \dots, \xi_2; \dots; \vec{r}_A(t), \dots, \xi_A\} \quad (2.24)$$

$$= \{q_{\mu}(t) | \mu = 1, NA\} ,$$

dabei steht N für die Anzahl der zeitabhängigen reellen Parameter des Einteilchenzustandes, also 10 in diesem Fall. Ein griechischer Index wie μ kennzeichnet q_{μ} als konkreten Parameter. Auf diese Definition nehmen die schon angeführten Bewegungsgleichungen Bezug

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu} \dot{q}_{\nu} = -\frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \langle Q(t) | \widehat{H} | Q(t) \rangle . \quad (2.5')$$

Aufgrund der Antisymmetrisierung des Vielteilchenzustandes verlieren die Parameter \vec{r}_k und \vec{p}_k ihre anschauliche Bedeutung. Für Einteilchenzustände, deren Skalarprodukt miteinander nicht verschwindet, d.h. die überlappen, geht die Lokalisierung im Vielteilchenzustand verloren, es werden statt dessen Schalenmodellstrukturen ausgebildet [5, 8].

Überlappen sich die Einteilchenzustände $|q_k\rangle$ nicht, so sind die Teilchen in den individuellen Wellenpaketen lokalisiert, und die Parameter \vec{r}_k und \vec{p}_k erhalten ihre anschauliche Bedeutung zurück.

Die Fermionische Molekulardynamik nähert sich in diesem Fall der Newtonschen Mechanik für die Parameter \vec{r}_k und \vec{p}_k , welche nichtsdestotrotz immer noch an die nichtklassischen Freiheitsgrade der Breite und der Spinrichtung gekoppelt sein können. Auch werden die Bewegungsgleichungen nach wie vor durch den nichtklassischen Austauschterm der Wechselwirkung beeinflusst.

2.4 Erwartungswerte

Wie in der Quantenmechanik üblich sind auch in der FMD physikalische Meßgrößen durch Erwartungswerte hermitescher Operatoren bezüglich des Zustandes $|Q\rangle$ gegeben. Da dieser Versuchszustand aus nichtorthogonalen Einteilchenzuständen, eben den Gaußschen Wellenpaketen, gebildet wird, gehen in die Berechnung von Erwartungswerten Überlappmatrizen ein [3].

Die Norm des Vielteilchenzustandes $|\hat{Q}\rangle$ ergibt sich aus der Determinante der Überlappmatrix der Einteilchenzustände $|q_k\rangle$

$$\langle \hat{Q} | \hat{Q} \rangle = \frac{1}{A!} \det(\{\langle q_k | q_l \rangle\}) . \quad (2.25)$$

Die Einteilchenüberlapps $\langle q_k | q_l \rangle$ sind im Anhang, Gleichung (A.3), angegeben.

Die Matrix \mathcal{O}_{kl} , die zur Berechnung der Erwartungswerte nötig ist, wird als inverse Überlappmatrix bezeichnet und ist wie folgt definiert

$$\left(\mathcal{O}^{-1}\right)_{kl} := \langle q_k | q_l \rangle ; \quad k, l = 1, \dots, A . \quad (2.26)$$

Da der unkorrelierte Versuchszustand hier als einzelne Slaterdeterminante gewählt wurde, können alle Erwartungswerte mit Hilfe der Einteilchendichte

$$\rho^{(1)} = \sum_{k,l=1}^A |q_l\rangle \mathcal{O}_{lk} \langle q_k| \quad (2.27)$$

ausgedrückt werden. Durch einfache Umformungen kann gezeigt werden, daß die Einteilchendichte ein Projektor ist

$$\left(\rho^{(1)}\right)^2 = \rho^{(1)} , \quad (2.28)$$

was bedeutet, daß die Besetzungszahlen der Einteilchenzustände entweder 0 oder 1 sind.

Die nichtorthogonalen Gaußschen Einteilchenzustände sind Eigenzustände zu $\rho^{(1)}$ mit dem Eigenwert 1. Gemeinsam spannen sie einen entarteten Unterraum auf.

Erwartungswerte von Einteilchenoperatoren ergeben sich durch Spurbildung mit der Einteilchendichte

$$\langle Q | \tilde{T} | Q \rangle = \text{Sp} \left(\rho^{(1)} \tilde{t} \right) = \sum_{k,l=1}^A \langle q_k | \tilde{t} | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} , \quad (2.29)$$

dabei bezeichnet ein kleiner Buchstabe mit Wellenlinie wie \tilde{t} den Operator im Einteilchenraum, während ein großer Buchstabe mit Wellenlinie wie \tilde{T} den Operator im A -Teilchenraum meint.

Die Zweiteilchendichte kann im Falle einer einzelnen Slaterdeterminante durch die Einteilchendichte ausgedrückt werden. Sie lautet

$$\rho^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n=1}^A |q_m q_n\rangle \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right) \langle q_k q_l| , \quad (2.30)$$

wobei Ausdrücke der Form $|q_k q_l\rangle$ Zweiteilchenzustände $|q_k\rangle \otimes |q_l\rangle$ bezeichnen.

Der Erwartungswert eines Zweiteilchenoperators ergibt sich wieder durch Spurbildung, diesmal jedoch mit der Zweiteilchendichte

$$\begin{aligned} \langle Q | \mathcal{V} | Q \rangle &= \text{Sp} \left(\rho^{(2)} \mathcal{V} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n=1}^A \langle q_k q_l | \mathcal{V} | q_m q_n \rangle \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right) . \end{aligned} \quad (2.31)$$

Auch hier bezeichnet der Großbuchstabe \mathcal{V} den Operator im A -Teilchenraum, der Kleinbuchstabe \mathcal{V} jetzt aber den entsprechenden Operator im Zweiteilchenraum.

Auf die gleiche Weise können Erwartungswerte von Operatoren höherer Ordnung berechnet werden.

2.5 Bewegungsgleichungen für den unkorrelierten Versuchszustand

An dieser Stelle sollen die im Abschnitt 2.1 für beliebig parametrisierte Versuchszustände hergeleiteten Bewegungsgleichungen für den Fall eines unkorrelierten Versuchszustandes, der einer einzelnen Slaterdeterminante (2.23) entspricht, spezifiziert werden.

Die Bewegungsgleichungen lauteten in ihrer allgemeinen Form

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu} \dot{q}_{\nu} = - \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \langle Q(t) | \mathcal{H} | Q(t) \rangle . \quad (2.5'')$$

Dabei enthalte der Hamiltonoperator \mathcal{H} im folgenden den Operator der kinetischen Energie \mathcal{T} und eine Zweiteilchenwechselwirkung \mathcal{V} . Der Erwartungswert von \mathcal{H} zerfällt dann in die beiden Bestandteile

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(Q) = \langle Q | \mathcal{H} | Q \rangle &= \langle Q | \mathcal{T} | Q \rangle + \langle Q | \mathcal{V} | Q \rangle \\ &= \mathcal{T}(Q) + \mathcal{V}(Q) , \end{aligned} \quad (2.32)$$

so daß die Bewegungsgleichungen jetzt lauten

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu}(Q) \dot{q}_{\nu} = - \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial q_{\mu}} - \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_{\mu}} . \quad (2.33)$$

Die schiefssymmetrische Matrix, die die geometrischen Eigenschaften der Parametermannigfaltigkeit des Versuchszustandes beinhaltet, ist durch Ableitungen des ersten Terms $\mathcal{L}_0(Q, \dot{Q})$ der Lagrangefunktion gegeben.

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\mu\nu} &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\mu \partial q_\nu} - \frac{\partial^2 \mathcal{L}_0}{\partial \dot{q}_\nu \partial q_\mu} = 2 \operatorname{Im} \left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} Q \middle| \frac{\partial}{\partial q_\nu} Q \right\rangle \\ &= 2 \operatorname{Im} \left\{ \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} q_m \middle| \frac{\partial}{\partial q_\nu} q_n \right\rangle - \sum_{r,s=1}^A \left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} q_m \middle| q_r \right\rangle \mathcal{O}_{rs} \left\langle q_s \middle| \frac{\partial}{\partial q_\nu} q_n \right\rangle \right] \mathcal{O}_{nm} \right\} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Die griechischen Indizes nummerieren die einzelnen Parameter und sind deshalb als Doppelindizes $\mu = \{m, i\}$ organisiert, die die Nummer des Wellenpaketes — m — und die Nummer des Parameters — i — dieses Wellenpaketes beinhalten.

Die generalisierten Kräfte

$$\mathcal{F}_\mu = -\frac{\partial}{\partial q_\mu} \mathcal{H} = -\frac{\partial}{\partial q_\mu} \mathcal{T} - \frac{\partial}{\partial q_\mu} \mathcal{V} \quad (2.35)$$

lassen sich unter Ausnutzung der Hermitizität und der Symmetrieeigenschaften bezüglich Teilchenpermutation schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \mathcal{T} &= \operatorname{Sp} \left(\frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial q_\mu} \tilde{t} \right) \\ &= 2 \operatorname{Re} \sum_{k=1}^A \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} q_m \middle| \tilde{t} \middle| q_k \right\rangle - \sum_{r,s=1}^A \left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} q_m \middle| q_r \right\rangle \mathcal{O}_{rs} \left\langle q_s \middle| \tilde{t} \middle| q_k \right\rangle \right] \mathcal{O}_{km} \end{aligned} \quad (2.36)$$

und als

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \mathcal{V} &= \operatorname{Sp} \left(\frac{\partial \rho^{(2)}}{\partial q_\mu} \tilde{v} \right) \\ &= 2 \operatorname{Re} \sum_{k,l,n=1}^A \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} q_m, q_n \middle| \tilde{v} (|q_k, q_l\rangle - |q_l, q_k\rangle) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sum_{r,s=1}^A \left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} q_m \middle| q_r \right\rangle \mathcal{O}_{rs} \left\langle q_s, q_n \middle| \tilde{v} (|q_k, q_l\rangle - |q_l, q_k\rangle) \right\rangle \right] \mathcal{O}_{km} \mathcal{O}_{ln} . \end{aligned} \quad (2.37)$$

Die Ableitungen eines Zweiteilchenzustandes

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial q_\mu} q_m, q_n \middle| := \left(\frac{\partial}{\partial q_\mu} \langle q_m \middle| \right) \otimes \langle q_n \middle| \quad (2.38)$$

sind so definiert, daß die Ableitung $\partial/\partial q_\mu$ nur auf den Einteilchenzustand $\langle q_m \middle|$ wirkt. Diese Ableitungen sind im Anhang gegeben.

Es ist wichtig, sich zu vergegenwärtigen, daß das Pauliprinzip die Parametertrajektorien sowohl durch die Matrix $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ als auch durch die generalisierten Kräfte

\mathcal{F}_μ beeinflusst. $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ spielt die Rolle einer Metrik, und das Pauliprinzip wirkt hier auf die Trajektorien wie Scheinkräfte in gekrümmten Räumen. In die generalisierten Kräfte \mathcal{F}_μ geht das Pauliprinzip über die Austauschterme ein. Da die effektive Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung sowieso nicht genau festgelegt ist, kann man sich auf den Standpunkt stellen, alle Effekte, auch die des Pauliprinzips durch ein phänomenologisches $\mathcal{H}(Q)$ zu nähern, etwa durch Hinzunahme eines Paulipotentials zu einer klassischen Hamiltonfunktion, wie dies in der QMD geschieht [15]. Man hat jedoch dieses Argument nicht, um $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ zu wählen, da diese Matrix eine rein geometrische Größe ist, die lediglich von der Parametrisierung des Versuchszustandes abhängt, aber nicht von der Wechselwirkung.

2.6 Freie Bewegung und harmonischer Oszillator

Die Einteilchenzustände der Fermionischen Molekulardynamik (2.18) stimmen mit der Lösung der Schrödingergleichung für zwei grundlegende Hamiltonoperatoren überein. Dies sind die freie Bewegung eines Wellenpaketes und die Bewegung im Potential des harmonischen Oszillators. In beiden Fällen wird das System durch Einteilchenhamiltonoperatoren beschrieben

$$\tilde{H} = \sum_{l=1}^A \tilde{h}(l), \quad (2.39)$$

die im Sinne von Abschnitt 2.2.2 gute Generatoren sind. Die freie Bewegung

$$\tilde{h}(l) = \frac{\vec{k}^2(l)}{2m} \Rightarrow \frac{d}{dt} \vec{b}_l = 0 \quad (2.40)$$

$$\frac{d}{dt} a_l = \frac{i}{m} \quad (2.41)$$

drückt sich in den Parametern des Einteilchenzustandes (2.18) so aus, daß der Vektor \vec{b}_l konstant bleibt und sich die Breite a_l nur im Imaginärteil ändert. Transformiert man den komplexen Vektor \vec{b}_l in die reellen Vektoren \vec{r}_l und \vec{p}_l , so lauten deren Bewegungsgleichungen $\frac{d}{dt} \vec{p}_l = 0$ und $\frac{d}{dt} \vec{r}_l = \vec{p}_l/m$ und stimmen damit mit den klassischen überein. Dennoch ist das durch die Parameter definierte Wellenpaket eine Lösung der Schrödingergleichung. Der Schwerpunkt des Wellenpaketes bewegt sich geradlinig gleichförmig. Außerdem läuft das Wellenpaket im Ortsraum entsprechend seiner stationären Impulsverteilung auseinander. Dies gilt auch für den aus diesen Einteilchenzuständen aufgebauten antisymmetrischen Vielteilchenzustand.

Im Fall des harmonischen Oszillators [5]

$$\tilde{h}(l) = \frac{\vec{k}^2(l)}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{x}^2(l) \Rightarrow \frac{d}{dt} \vec{b}_l = -im\omega^2 a_l \vec{b}_l \quad (2.42)$$

$$\frac{d}{dt} a_l = -im\omega^2 a_l^2 + \frac{i}{m} \quad (2.43)$$

sind die Bewegungsgleichungen gekoppelt. Betrachtet man wiederum die Bestandteile des komplexen Vektors \vec{b}_l , so erhält man für \vec{r}_l und \vec{p}_l die klassischen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \vec{r}_l = \frac{\vec{p}_l}{m} \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt} \vec{p}_l = -m\omega^2 \vec{r}_l . \quad (2.44)$$

Der Freiheitsgrad der Breite (2.43) schwingt anharmonisch, die aus der Breite gebildeten Varianzen der Orts- und Impulsverteilung des einzelnen Wellenpaketes (Gleichungen 2.20 und 2.21) jedoch harmonisch mit der doppelten Frequenz

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\text{Re}(a_l)} - mE(a_l) \right) &= -(2\omega)^2 \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\text{Re}(a_l)} - mE(a_l) \right) \\ \frac{d^2}{dt^2} \left(\frac{3}{2} \frac{|a_l|^2}{\text{Re}(a_l)} - \frac{1}{m\omega^2} E(a_l) \right) &= -(2\omega)^2 \left(\frac{3}{2} \frac{|a_l|^2}{\text{Re}(a_l)} - \frac{1}{m\omega^2} E(a_l) \right) . \end{aligned} \quad (2.45)$$

Beide Varianzen oszillieren um einen Mittelwert, der mit der im Freiheitsgrad der Breite akkumulierten Energie $E(a_l)$ zusammenhängt.

$$E(a_l) = \frac{1}{2m} \frac{3}{2} \frac{1}{\text{Re}(a_l)} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{3}{2} \frac{|a_l|^2}{\text{Re}(a_l)} \quad (2.46)$$

Diese Größe ist eine Erhaltungsgröße und deshalb zeitunabhängig.

An dieser Stelle sollen noch einmal die Eigenschaften der freien Bewegung und der Bewegung im Potential des harmonischen Oszillators zusammengefaßt werden, da es bei der Frage, ob ein System klassisch oder quantenmechanisch ist, immer wieder zu Verwirrung kommt.

Obwohl in beiden Beispielen die Parameter \vec{r}_l und \vec{p}_l den klassischen Bewegungsgleichungen folgen und durch das Pauliprinzip nicht beeinflußt werden, stimmt der parametrisierte Vielteilchenzustand mit der Lösung der Schrödingergleichung überein und enthält per constructionem das Pauliprinzip.

Es gilt sogar, daß für die freie Bewegung und den harmonischen Oszillator die Bewegungsgleichungen der Parameter für antisymmetrisierte, symmetrisierte oder einfache Produktzustände dieselben sind. Anhand der Bewegungsgleichungen allein kann also nicht entschieden werden, welche Symmetrieeigenschaften die beschriebenen Teilchen besitzen. Allein der Vielteilchenzustand, der mit Hilfe der Parameter geschrieben wird, enthält diese Information, und es ist auch allein der Vielteilchenzustand, mit dem physikalische Größen durch die Bildung von Erwartungswerten berechnet werden können. Dieses Verhalten resultiert nicht aus dem Näherungsverfahren. Vielmehr existiert es analog für Lösungen der Schrödingergleichung. Die obigen Systeme bilden dafür ein gutes Beispiel, da sie ebenfalls Lösung der Schrödingergleichung sind. Auch aus der Lösung der Einteilchenschrödingergleichung für die freie Bewegung oder den harmonischen Oszillator kann man nicht ersehen, ob es sich bei den beschriebenen Teilchen um Fermionen, Bosonen oder unterscheidbare Teilchen handelt.

Abschließend sei noch erläutert, warum die Lösungen der Fermionischen Molekulardynamik für die beiden Hamiltonoperatoren mit den exakten Lösungen übereinstimmen. Zum einen ist der Hamiltonoperator, der mit dem Symmetrisierungs- und Antisymmetrisierungsoperator vertauscht, ein Einteilchenoperator. Zum anderen sind die Einteilchenzustände (2.18) Lösung der Einteilchenschrödingergleichung. Wären zum Beispiel die Breiten der Wellenpakete keine dynamischen Variable, sondern zeitlich konstant, so wären die Gleichungen (2.40) und (2.42) bzw. (2.44) für Fermionen nicht länger richtig. Aus dem Variationsprinzip würden andere Bewegungsgleichungen folgen, nach denen die Pakete Scheinkräften unterworfen wären. So würden ohne den Freiheitsgrad der Breite freie Fermionen auch ohne Wechselwirkung aneinander streuen [2].

2.7 Grundzustände und Ereignisensemble

In der Fermionischen Molekulardynamik ist der Grundzustand eines physikalischen Systems dadurch ausgezeichnet, daß er den Erwartungswert des Hamiltonoperators minimiert. Nach dem Ritzschen Variationsprinzip ist er damit der Zustand, der mit dem exakten Grundzustand den größten Überlapp hat. An der Stelle des Energieminimums verschwinden die Ableitungen der Energie nach allen Parametern des Versuchszustandes

$$\frac{\partial}{\partial q_\mu} \langle Q | \tilde{H} | Q \rangle = 0 \quad , \quad \forall \mu . \quad (2.47)$$

Aus den Bewegungsgleichungen (2.5) folgt damit sofort, daß der FMD-Grundzustand vollständig zeitunabhängig ist und die Zeitableitungen aller Parameter gleich Null sind

$$\frac{d}{dt} q_\mu = 0 \quad , \quad \forall \mu . \quad (2.48)$$

Die Forderung nach minimaler Energie legt alle Grundzustandsparameter bis auf äquivalente Konfigurationen eindeutig fest. Äquivalente Konfigurationen ergeben sich aufgrund der Symmetrieeigenschaften des Hamiltonoperators. Ein im Ortsraum an eine andere Stelle verschobener Grundzustand besitzt natürlich die gleiche Energie wie der unverschobene.

Ebenso ist die Energie unter Drehungen invariant. Die Zustände sind jedoch keine Eigenzustände zu \tilde{J}^2 und \tilde{J}_z , obwohl der Hamiltonoperator rotationssymmetrisch ist. Bei den Grundzuständen der Fermionischen Molekulardynamik handelt es sich vielmehr um intrinsisch deformierte Zustände, wie sie auch aus dem Hartree–Fock–Modell bekannt sind. Der Grund der Brechung der Rotationssymmetrie ist in der Tatsache zu suchen, daß es sich bei dem verwendeten Versuchszustand um eine einzelne Slaterdeterminante lokalisierter Wellenpakete handelt. Die Deformation spiegelt Vielteilchenkorrelationen zwischen den Nukleonen wider, die sich ergeben, damit der deformierte Grundzustand auf der Parametermannigfaltigkeit die niedrigste Energie erreicht. So

kann man sagen, daß das Ritzsche Variationsverfahren die „Unzulänglichkeiten“ des Versuchszustandes ausgleicht, indem die Symmetrie gebrochen wird.

Gute Drehimpulsquantenzahlen können durch Superposition verschiedener Orientierungen des intrinsisch deformierten Grundzustandes erzeugt werden [7, 8].

Zu diesem Zweck soll zuerst die Rotation eines Zustandes definiert werden. Eine Rotation sei durch die drei Euler–Winkel $\vec{\omega} = (\alpha, \beta, \gamma)$ gegeben. Dabei bezeichnet α den Winkel der Drehung um die raumfeste z -Achse, β den Winkel der Drehung um die raumfeste y -Achse und γ den Winkel der Drehung um die raumfeste x -Achse. Wie diese Drehung mit der Drehung um körperfeste Achsen zusammenhängt, kann man bei J.J. Sakurai [9] nachlesen. Der Drehoperator lautet nun

$$\mathcal{D}(\vec{\omega}) = \exp\{-i\alpha J_z\} \exp\{-i\beta J_y\} \exp\{-i\gamma J_x\} . \quad (2.49)$$

Seine Matrixelemente bezüglich J und M werden als Drehmatrix zusammengefaßt

$$\mathcal{D}_{M_1 M_2}^J(\vec{\omega}) = \langle JM_1 | \mathcal{D}(\vec{\omega}) | JM_2 \rangle . \quad (2.50)$$

Für die Drehmatrizen wird abschließend noch die folgende Orthogonalitätsrelation benötigt

$$\int d^3\omega \left(\mathcal{D}_{M_1 M_1'}^{J_1}(\vec{\omega}) \right)^* \mathcal{D}_{M_2 M_2'}^{J_2}(\vec{\omega}) = \frac{8\pi^2}{2J_1 + 1} \delta_{J_1 J_2} \delta_{M_1 M_2} \delta_{M_1' M_2'} , \quad (2.51)$$

bei der $d^3\omega = d\alpha d\cos(\beta) d\gamma$ gilt. Der Zustand mit gutem J und M ergibt sich als

$$|Q; JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \int d^3\omega \mathcal{D}_{MM}^J(\vec{\omega}) \mathcal{D}(\vec{\omega}) |Q\rangle . \quad (2.52)$$

Der Zustand $|Q_{\text{HIC}}(t)\rangle$, der eine Schwerionenreaktion beschreiben soll, besteht zur Startzeit aus dem antisymmetrischen Produkt zweier Grundzustände mit guten Drehimpulsquantenzahlen

$$|Q_{\text{HIC}}(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1 N_2}} \int d^3\omega_1 d^3\omega_2 \mathcal{D}_{M_1 M_1'}^{J_1}(\vec{\omega}_1) \mathcal{D}_{M_2 M_2'}^{J_2}(\vec{\omega}_2) |Q(t=0); \vec{\omega}_1 \vec{\omega}_2\rangle \quad (2.53)$$

$$\text{mit } |Q(t=0); \vec{\omega}_1 \vec{\omega}_2\rangle = \mathcal{A} \left[\mathcal{D}(\vec{\omega}_1) |Q_1\rangle \otimes \mathcal{D}(\vec{\omega}_2) |Q_2\rangle \right] .$$

Im Verlauf der Zeitentwicklung werden die Phasenkorrelationen in der ursprünglich kohärenten Summation über kollektive Freiheitsgrade jedoch durch die komplexe Wechselwirkung der inneren Freiheitsgrade zerstört. Dies gilt sowohl für die Phasen zwischen den gedrehten Zuständen als auch für die Phasen, die in der Entwicklung der einlaufenden ebenen Welle nach Stoßparametern enthalten sind. Für große Zeiten kann also angenommen werden, daß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle Q(t); \vec{\omega}'_1 \vec{\omega}'_2 | Q(t); \vec{\omega}_1 \vec{\omega}_2 \rangle \propto \delta_{\vec{\omega}'_1 \vec{\omega}_1} \delta_{\vec{\omega}'_2 \vec{\omega}_2} . \quad (2.54)$$

Für die Berechnung des Erwartungswertes eines beliebigen Operators \tilde{B} genügt es folglich, die kohärente Summation durch eine inkohärente Mittelung über die gewichteten Orientierungen zu ersetzen

$$\begin{aligned} & \lim_{t \rightarrow \infty} \langle Q_{\text{HIC}}(t) | \tilde{B} | Q_{\text{HIC}}(t) \rangle & (2.55) \\ & \approx \frac{1}{N_1 N_2} \int d^3 \omega_1 d^3 \omega_2 \mathcal{D}_{M_1 M_1}^{J_1}(\vec{\omega}_1) \mathcal{D}_{M_2 M_2}^{J_2}(\vec{\omega}_2) \langle Q(t); \vec{\omega}_1 \vec{\omega}_2 | \tilde{B} | Q(t); \vec{\omega}_1 \vec{\omega}_2 \rangle . \end{aligned}$$

Deshalb kann $|Q(t); \vec{\omega}_1 \vec{\omega}_2\rangle$ als Mitglied eines Ensembles angesehen werden; dieses Ensemble wird Ereignisensemble genannt [7, 8].

Das dargestellte Vorgehen unterscheidet sich von der klassischen Molekulardynamik oder der Quantenmolekulardynamik [16], in denen das Ensemble oft durch zufällige Orte und Impulse der Teilchen im Anfangszustand der Reaktion gebildet wird. Da sich die Grundzustände der Fermionischen Molekulardynamik aus der Forderung nach minimaler Energie ergeben und stationär sind, können die relativen Positionen und Impulse der Wellenpakete nicht zufällig gewählt werden. Das Ereignisensemble der FMD besteht aus den gewichteten Orientierungen der intrinsisch deformierten Grundzustände.

Weiterhin besteht das Ensemble aus der Summation der verschiedenen Stoßparameter. Auch für den Stoßparameter kann angenommen werden, daß die ursprünglich kohärente Überlagerung von Ausgangszuständen verschiedener Stoßparameter, die dazu dient, eine einlaufende ebene Welle aufzubauen, entsprechend Gleichung (2.54) in eine inkohärente Summation zerfällt.

Beide Mittelwertbildungen, die über die ursprünglichen Orientierungen und die über die Stoßparameter, beruhen auf derselben, wohl begründeten Annahme, daß zwischen den Endkanälen der Reaktion keine Phasenkorrelationen mehr bestehen.

3. Statistische Eigenschaften

Die Bewegungsgleichungen der Fermionischen Molekulardynamik besitzen die aus der klassischen Mechanik bekannte symplektische Struktur der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen. Aus diesem Grund wurde in der Literatur die Vermutung aufgestellt, die statistischen Eigenschaften der FMD seien klassisch [21, 22].

Das Kapitel „Statistische Eigenschaften“ untersucht diese Problematik und gibt Antworten auf zwei Fragestellungen, die in quantenmechanischen Molekulardynamikmodellen, die die Zeitentwicklung eines Vielteilchensystems durch einen Vielteilchenzustand lokalisierter Wellenpakete beschreiben, von grundlegender Natur sind. Dabei handelt es sich zum einen um die *thermostatischen* und zum anderen um die *thermodynamischen* Eigenschaften des verwendeten Modells.

Die erste Frage nach den thermostatischen Eigenschaften eines Systems bezieht sich auf die Eigenschaften des kanonischen statistischen Operators, die durch die Zustandssumme $Z(\beta) = \text{Sp}(\exp\{-\beta \hat{H}\})$ gegeben sind. Ist die Zustandssumme in dem verwendeten Modell einmal bestimmt, lassen sich thermostatische Mittel durch partielle Differentiation gewinnen, so z.B. die mittlere Energie durch Differentiation nach β oder andere Größen durch Ableitung nach Parametern des Hamiltonoperators. Demnach reduziert sich die Frage darauf, ob die Zustandssumme mit Hilfe der Versuchszustände berechnet werden kann, d.h., ob diese Versuchszustände ein Erzeugendensystem bilden und wie sich der Einsoperator durch diese Versuchszustände ausdrücken läßt.

Die Versuchszustände der Fermionischen Molekulardynamik bilden ein Erzeugendensystem, das übervollständig ist, da es vom Erzeugendensystem der kohärenten Zustände abgeleitet wird. Sowohl für identische Fermionen als auch für unterscheidbare Teilchen kann die Zerlegung der Einheit angegeben werden. Da die Berechnung der Zustandssumme nicht von der Darstellung abhängt, müssen sich folglich für das Modell der Fermionischen Molekulardynamik die richtigen thermostatischen Eigenschaften ergeben. Dies wird an den Beispielen freier Fermionen und Fermionen im gemeinsamen harmonischen Oszillatorpotential demonstriert.

Die zweite und weit bedeutendere Frage wendet sich den thermodynamischen Eigenschaften der Fermionischen Molekulardynamik zu. Da ein zeitentwickelter FMD-Versuchszustand in der Regel von der exakten Lösung der Schrödingergleichung abweicht, garantieren richtige *thermostatische* Eigenschaften nicht automatisch auch richtige *thermodynamische* Eigenschaften. Die zweite Frage lautet damit in anderen

Worten: Bevölkert ein FMD-Versuchszustand im Verlauf der Zeitentwicklung den Hilbertraum mit dem kanonischen Gewicht?

Da die Parameter der Einteilchenzustände verallgemeinerten Hamiltonschen Bewegungsgleichungen folgen, könnte man versucht sein, auf ein klassisches statistisches Verhalten zu schließen, wie dies zum Beispiel in Ref. [21, 22] getan wird. Diese Annahme, daß klassische Bewegungsgleichungen stets klassische Statistik nach sich ziehen, wird im zweiten Teil dieses Kapitels widerlegt. Zu diesem Zweck werden zeitgemittelte Erwartungswerte mit dem FMD-Vielteilchenzustand berechnet und mit den äquivalenten Mittelwerten desjenigen kanonischen Ensembles verglichen, das die gleiche mittlere Energie besitzt.

Im Modell der Fermionischen Molekulardynamik wird im folgenden die Äquilibration eines Systems bestehend aus vier identischen Fermionen, die sich in einem gemeinsamen harmonischen Oszillatorpotential befinden, untersucht. Die Teilchen wechselwirken über ein schwaches Zweiteilchenpotential, das dazu dient, die integrierbaren harmonischen Oszillationen in ungeordnete Bewegung zu verwandeln. Man wird im dritten Teil dieses Kapitels sehen, daß der Zustand, der ursprünglich weit vom Gleichgewicht entfernt war, sich dem kanonischen Ensemble der Fermi-Dirac-Statistik im ergodischen Sinne nähert, d.h., die zeitgemittelten Besetzungszahlen der Eigenzustände des harmonischen Oszillators fallen praktisch mit denen des kanonischen Ensembles zusammen, wenn das kanonische Ensemble bei derselben mittleren Energie betrachtet wird.

Dieses Ergebnis ändert sich nicht, wenn man die Versuchszustände der FMD gegen die Versuchszustände der Antisymmetrisierten Molekulardynamik (AMD) [10] austauscht. Da jedoch die Versuchszustände der AMD auf zeitunabhängige Breiten eingeschränkt sind, kommt es aufgrund unphysikalischer Streuung sogar ohne Wechselwirkung zu einer Äquilibration.

Werden unterscheidbare Teilchen, die durch einen Produktzustand beschrieben werden, untersucht, so führen die Bewegungsgleichungen auf eine Boltzmann-Verteilung der Besetzungswahrscheinlichkeiten. Darüber hinaus äquilibriert das System aus vier unterscheidbaren Teilchen sogar dann, wenn sich eines in einem anderen Oszillator befindet als die anderen. In den Molekulardynamikrechnungen zeigt sich, daß im Zeitmittel alle Teilchen die gleiche Temperatur annehmen und sich deshalb die Anregungsenergie in einem Verhältnis teilen, das durch das quantenmechanische kanonische Ensemble gegeben ist. Dieses Verhältnis weicht von dem der klassischen Statistik ab, wo es Eins zu Drei ist, da für klassische Teilchen im Oszillator die Anregungsenergie nicht von der Frequenz abhängt. Wird für unterscheidbare Teilchen zusätzlich der Freiheitsgrad der Breite eingefroren, geht das thermodynamische Verhalten letztendlich in das der klassischen Statistik über.

Ein wichtiges Ergebnis der Untersuchungen thermodynamischer Eigenschaften besteht darin, daß durch Zeitmittelung Beziehungen zwischen wohldefinierten Größen einer Molekulardynamik, wie der mittleren Energie, und statistischen Größen, wie der Temperatur, aufgestellt werden können. Das ist ein erster Schritt, um die ther-

modynamischen Eigenschaften angeregter Kerne und zum Beispiel den nuklearen Flüssigkeit–Gas–Phasenübergang zu untersuchen, die derzeit von experimentellem Interesse sind [24].

3.1 Vollständigkeitsrelation

Das Ziel dieses Unterabschnittes besteht darin, die Vollständigkeitsrelation für FMD-Versuchszustände abzuleiten. Mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation wird dann im weiteren die Spur des statistischen Operators berechnet.

3.1.1 Kohärente Zustände

Den Ausgangspunkt der Untersuchungen bildet die Vollständigkeitsrelation für kohärente Zustände. Kohärente Zustände $|\vec{z}\rangle$ sind die Eigenzustände zum Absteigeoperator \tilde{a} des dreidimensionalen harmonischen Oszillators

$$\tilde{H}_{\text{HO}} = \omega \left(\tilde{a}^+ \tilde{a} + \frac{3}{2} \right) \quad (3.1)$$

$$\tilde{a} |\vec{z}\rangle = \vec{z} |\vec{z}\rangle .$$

Die kohärenten Zustände bilden ein übervollständiges Erzeugendensystem, ihre Vollständigkeitsrelation lautet

$$\begin{aligned} \mathbb{1}^{(1)} &= \int \frac{d^3\text{Re}(z) d^3\text{Im}(z)}{\pi^3} \frac{|\vec{z}\rangle\langle\vec{z}|}{\langle\vec{z}|\vec{z}\rangle} \\ &= \int \frac{d^3r d^3p}{(2\pi)^3} \frac{|\vec{r}, \vec{p}\rangle\langle\vec{r}, \vec{p}|}{\langle\vec{r}, \vec{p}|\vec{r}, \vec{p}\rangle} \\ &= \int \frac{d^3r d^3p}{(2\pi)^3} \frac{|q\rangle\langle q|}{\langle q|q\rangle} . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Gleichung (3.2) stellt weiterhin verschiedene Notationen für kohärente Zustände vor. Dabei wird die Notation $|\vec{r}, \vec{p}\rangle$ in der zweiten Zeile als Phasenraumdarstellung bezeichnet, die dritte Zeile definiert die im folgenden benutzte Kurznotation q für die einen Versuchszustand kennzeichnenden Parameter. Kohärente Zustände sind ausführlich untersucht und beschrieben worden; eine Übersicht über die grundlegenden Eigenschaften und die Zusammenstellung der Originalliteratur finden sich bei J.R. Klauder und B.-S. Skagerstam [20].

Im antisymmetrischen Zweiteilchenraum erhält man die Vollständigkeitsrelation durch Antisymmetrisierung eines Produktes aus zwei Einsoperatoren

$$\begin{aligned} \mathbb{1}^{(2)} &= \tilde{A}^{(2)} \left(\mathbb{1}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(1)} \right) \tilde{A}^{(2)} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - \tilde{P}_{12} \right) \left(\mathbb{1}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(1)} \right) \frac{1}{2} \left(1 - \tilde{P}_{12} \right) . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Unter Zuhilfenahme der antisymmetrischen Zweiteilchenzustände $|q_1, q_2\rangle_a$ läßt sich der Einsoperator im antisymmetrischen Zweiteilchenraum dann wie folgt ausdrücken

$$\mathbb{1}^{(2)} = \int \frac{d^3 r_1 d^3 p_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 r_2 d^3 p_2}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \frac{|q_1, q_2\rangle_a \langle q_1, q_2|}{\langle q_1 | q_1 \rangle \langle q_2 | q_2 \rangle} \quad (3.4)$$

$$\text{mit} \quad |q_1, q_2\rangle_a := |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle - |q_2\rangle \otimes |q_1\rangle .$$

Die Verallgemeinerung auf den antisymmetrischen A -Teilchenraum ergibt sich analog durch Antisymmetrisierung des Produktes der Einteilcheneinsoperatoren im A -Teilchenraum. Hierbei bezeichne $|\hat{Q}\rangle$ die unnormierte Slaterdeterminante aus Einteilchenzuständen $|q\rangle$ und $|Q\rangle$ die normierte Slaterdeterminante

$$\begin{aligned} |\hat{Q}\rangle &= \frac{1}{A!} \sum_{\pi} \text{sgn}(\pi) \left(|q_{\pi(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |q_{\pi(A)}\rangle \right) \\ |Q\rangle &= \frac{1}{\langle \hat{Q} | \hat{Q} \rangle^{\frac{1}{2}}} |\hat{Q}\rangle . \end{aligned} \quad (3.5)$$

Die Summation läuft über alle Permutationen π .

Somit läßt sich der Einsoperator schreiben als

$$\mathbb{1}^{(A)} = \int d\mu(Q) |Q\rangle \langle Q| . \quad (3.6)$$

Dabei wurde in Gleichung (3.6) ein Maß eingeführt, das sich aus dem Produkt der Einteilchenmaße und der Norm des unnormierten Vielteilchenzustandes zusammensetzt

$$d\mu(Q) = \langle \hat{Q} | \hat{Q} \rangle \prod_{k=1}^A \frac{1}{\langle q_k | q_k \rangle} \frac{d^3 r_k d^3 p_k}{(2\pi)^3} . \quad (3.7)$$

Das gefundene Maß erlaubt es, den Einsoperator in beliebigen A -Teilchenräumen darzustellen, vorausgesetzt bei den Einteilchenzuständen handelt es sich um kohärente Zustände, d.h. um Gaußsche Wellenpakete mit fester Breite, wie sie zum Beispiel in der Antisymmetrischen Molekulardynamik (AMD) Verwendung finden [21].

3.1.2 Kohärente Zustände mit variablen Breiten

Die Einteilchenwellenpakete der Fermionischen Molekulardynamik zeichnen sich im Unterschied zu kohärenten Zuständen durch einen weiteren Freiheitsgrad, die komplexe Breite, aus. Im folgenden wird diskutiert, wie dieser Freiheitsgrad die Vollständigkeitsrelation verändert. Da die Menge der Versuchszustände schon für eine feste Breite ein Erzeugendensystem bildet, wird die Integration über ein Intervall des Parameters Breite lediglich auf einen konstanten Vorfaktor führen.

In Ortsdarstellung sind die Einteilchenzustände durch lokalisierte Gaußsche Wellenpakete gegeben (vergleiche Gleichung (2.18))

$$\langle \vec{x} | q \rangle \propto \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{r})^2}{2a} + i\vec{p} \cdot \vec{x} \right\} . \quad (3.8)$$

Die Kurznotation q schließt jetzt nicht nur die Parameter \vec{r} und \vec{p} ein, sondern auch den Parameter der komplexen Breite a .

Die Zerlegung der Einheit lautet damit

$$\mathbb{1}^{(1)} = \frac{1}{A_R A_I} \int \frac{d^3 r \, d^3 p}{(2\pi)^3} \int_{A_R} da_R \int_{A_I} da_I \frac{|q\rangle\langle q|}{\langle q|q\rangle} , \quad (3.9)$$

wenn $\int_{A_R} da_R = A_R$, $\int_{A_I} da_I = A_I$.

Der Beweis von Gleichung (3.9) läßt sich z.B. in Ortsdarstellung erbringen. Dabei erkennt man, daß nach der Integration über $d^3 p$ und $d^3 r$ unter dem Integral lediglich eine Konstante zurückbleibt. Die Breitenintegration hebt sich deshalb mit den Konstanten A_R und A_I weg.

$$\begin{aligned} & \langle \vec{x} | \mathbb{1}^{(1)} | \vec{x}' \rangle \quad (3.10) \\ &= \frac{1}{A_R A_I} \int_{A_R} da_R \int_{A_I} da_I \int \frac{d^3 r \, d^3 p}{(2\pi)^3} \left(2\pi \frac{|a|^2}{a_R} \right)^{-\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{r})^2}{2a^*} + i\vec{x} \cdot \vec{p} \right\} \\ & \quad \times \exp \left\{ -\frac{(\vec{x}' - \vec{r})^2}{2a} - i\vec{x}' \cdot \vec{p} \right\} \\ &= \frac{\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')}{A_R A_I} \int_{A_R} da_R \int_{A_I} da_I \int d^3 r \left(2\pi \frac{|a|^2}{a_R} \right)^{-\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{r})^2}{2a^*} - \frac{(\vec{x}' - \vec{r})^2}{2a} \right\} \\ &= \frac{\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')}{A_R A_I} \int_{A_R} da_R \int_{A_I} da_I 1 = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \end{aligned}$$

Beim Übergang von der vorletzten zur letzten Zeile wurde davon Gebrauch gemacht, daß aufgrund der Deltafunktion $\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$ unter dem Integral \vec{x} und \vec{x}' als gleich angesehen werden können.

3.2 Kanonische Ensembles

Die gefundenen Ausdrücke für die Vollständigkeitsrelation erlauben es jetzt, thermostatische Eigenschaften von Vielteilchensystemen mit Hilfe lokalisierter Gaußscher Wellenpakete zu beschreiben. Das soll am Beispiel der kanonischen Ensembles freier

Fermionen, im gemeinsamen harmonischen Oszillator gebundener Fermionen sowie unterscheidbarer Teilchen demonstriert werden.

Der Hamiltonoperator dieser Systeme ist jeweils ein Einteilchenoperator

$$\underline{H} = \sum_{l=1}^A \underline{h}(l) . \quad (3.11)$$

Der statistische Operator $\underline{R}(\beta)$ des kanonischen Ensembles ergibt sich aus dem Prinzip maximaler Entropie unter der Nebenbedingung, daß das statistische Mittel der Energie vorgegeben sei. Er lautet

$$\underline{R}(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp \{-\beta \underline{H}\} , \quad \beta = \frac{1}{T} . \quad (3.12)$$

β wird inverse Temperatur genannt. Durch Bildung der Spur erhält man die Zustandssumme $Z(\beta)$

$$Z(\beta) = \text{Sp} \left(\exp \{-\beta \underline{H}\} \right) = \int d\mu(Q) \langle Q | \exp \{-\beta \underline{H}\} | Q \rangle . \quad (3.13)$$

In die Berechnung der Zustandssumme $Z(\beta)$ geht die Symmetrie des Vielteilchenzustandes $|Q\rangle$ ein.

$$d\mu(Q) = \langle \hat{Q} | \hat{Q} \rangle \prod_{k=1}^A \frac{1}{\langle q_k | q_k \rangle} \frac{d^3 r_k d^3 p_k da_{kR} da_{kI}}{(2\pi)^3 A_R A_I} \quad (3.14)$$

$$d\mu(q_k) = \frac{1}{\langle q_k | q_k \rangle} \frac{d^3 r_k d^3 p_k da_{kR} da_{kI}}{(2\pi)^3 A_R A_I}$$

Diese Symmetrie —Produktzustand für unterscheidbare Teilchen, antisymmetrischer Zustand für Fermionen — bestimmt das Maß $d\mu(Q)$ und damit die Eigenschaften der Zustandssumme.

Die folgenden vier Beispiele sollen die bisherigen Ausführungen illustrieren. Ihre Ergebnisse sind, nachdem die Vollständigkeit der FMD-Versuchszustände festgestellt und der Einsoperator bestimmt ist, nicht weiter überraschend.

3.2.1 Freie unterscheidbare Teilchen

Die Zustandssumme des kanonischen Ensembles nicht wechselwirkender unterscheidbarer Teilchen läßt sich in geschlossener Form darstellen. Da der Zustand des A -Teilchensystems durch ein Produkt aus Einteilchenzuständen beschrieben wird

$$|\hat{Q}\rangle = |q_1\rangle \otimes \cdots \otimes |q_A\rangle , \quad (3.15)$$

zerfällt die A -Teilchenzustandssumme des kanonischen Ensembles $Z(\beta)$ in ein Produkt von A Einteilchenzustandssummen $z_k(\beta)$.

$$\begin{aligned}
Z(\beta) &= \int d\mu(Q) \langle Q | \exp \left\{ -\beta \underline{H} \right\} | Q \rangle & (3.16) \\
&= \int d\mu(q_1) \langle q_1 | \exp \left\{ -\beta \underline{h}_1 \right\} | q_1 \rangle \int d\mu(q_2) \langle q_2 | \exp \left\{ -\beta \underline{h}_2 \right\} | q_2 \rangle \cdots \\
&= \prod_{k=1}^A z_k(\beta)
\end{aligned}$$

Für den Fall, daß die Einteilchenhamiltonoperatoren nur die kinetische Energie enthalten, $\underline{h}_k = \underline{t}$, und alle Teilchen die gleiche Masse besitzen, erhält man über die Impulsdarstellung der Einteilchenzustände (A.5) auf einfache Weise die Matrixelemente unter dem Integral (B.1). Damit ergibt sich die Einteilchenzustandssumme zu

$$\begin{aligned}
z_k(\beta) &= z(\beta) & (3.17) \\
&= \int d\mu(q) \langle q | \exp \left\{ -\beta \underline{t} \right\} | q \rangle \\
&= \int d\mu(q) \left(\frac{a_R}{a_R + \frac{\beta}{2m}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\beta \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{a_R}{a_R + \frac{\beta}{2m}} \right\} \langle q | q \rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3 A_R A_I} \int_V d^3r \int_{A_R} da_R \int_{A_I} da_I \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \left(\frac{a_R}{a_R + \frac{\beta}{2m}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\beta \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{a_R}{a_R + \frac{\beta}{2m}} \right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3 A_R A_I} \int_V d^3r \int_{A_R} da_R \int_{A_I} da_I \left(\pi \frac{2m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \\
&= \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\pi \frac{2m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} .
\end{aligned}$$

Aus der Zustandssumme $Z(\beta) = [z(\beta)]^A$ können jetzt durch Differentiation die mittlere Energie

$$\langle \langle \underline{H} \rangle \rangle |_T = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z(\beta)) \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned}
&= A \left[-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(z(\beta)) \right] \\
&= \frac{3}{2} A T \quad (3.19)
\end{aligned}$$

und die spezifische Wärmekapazität als Funktion der Temperatur $T = 1/\beta$ berechnet werden

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \langle \langle \underline{H} \rangle \rangle |_T = \frac{3}{2} A . \quad (3.20)$$

Wie nicht anders erwartet, ergeben sich dieselben Ergebnisse wie sie sich bei Verwendung von Eigenzuständen des Hamiltonoperators ergeben hätten.

3.2.2 Freie identische Fermionen

Das freie Fermigas wird durch Slaterdeterminanten von Einteilchenzuständen beschrieben. Die in diesem Beispiel betrachteten Fermionen sollen sich bezüglich des Spins und des Isospins alle im selben Zustand $|\uparrow\uparrow\rangle$ befinden

$$\begin{aligned}
 |\hat{Q}\rangle &= \frac{1}{A!} \sum_{\pi} \text{sgn}(\pi) \left(|q_{\pi(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |q_{\pi(A)}\rangle \right) \quad (3.21) \\
 \langle \vec{x} | q_l \rangle &= \exp \left\{ - \frac{(\vec{x} - \vec{b}_l)^2}{2 a_l} \right\} \otimes |\uparrow\uparrow\rangle .
 \end{aligned}$$

Die Zustandssumme ergibt sich wieder als Spur über $\exp\{-\beta \underline{H}\}$, diesmal faktorisiert sie jedoch nicht

$$\begin{aligned}
 Z(\beta) &= \int d\mu(Q) \langle Q | \exp \left\{ -\beta \underline{H} \right\} | Q \rangle \quad (3.22) \\
 &= \int d\mu(Q) \frac{\det \left(\langle q_k | \exp \{ -\beta \underline{t} \} | q_l \rangle \right)}{\det \left(\langle q_k | q_l \rangle \right)} .
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe zweier neuer Größen, dem Gewicht $\mathcal{W}(\beta)$ (siehe auch [22])

$$\mathcal{W}(\beta) := \frac{\det \left(\langle q_k | \exp \{ -\beta \underline{t} \} | q_l \rangle \right)}{\det \left(\langle q_k | q_l \rangle \right)} \quad (3.23)$$

und der inversen Matrix $\mathcal{O}_{lk}(\beta)$

$$\left(\mathcal{O}^{-1}(\beta) \right)_{kl} := \langle q_k | \exp \{ -\beta \underline{t} \} | q_l \rangle , \quad (3.24)$$

läßt sich die mittlere Energie auf die folgende Weise schreiben

$$\begin{aligned}
 \langle \langle \underline{H} \rangle \rangle |_{\mathcal{T}} &= - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z(\beta)) \quad (3.25) \\
 &= \frac{\int d\mu(Q) \mathcal{W}(\beta) \sum_{m,n}^A \mathcal{O}_{nm}(\beta) \left[- \frac{\partial}{\partial \beta} \langle q_m | \exp \left\{ -\beta \underline{t} \right\} | q_n \rangle \right]}{\int d\mu(Q) \mathcal{W}(\beta)} .
 \end{aligned}$$

Obwohl die Matrixelemente $\langle q_m | \exp\{-\beta \underline{t}\} | q_n \rangle$ analytisch bekannt sind (siehe (B.1)), läßt sich das Integral nicht mehr in geschlossener Form lösen. Mit Hilfe einer numerischen Integration oder des Metropolisverfahrens kann die mittlere Energie jedoch berechnet werden.

Das System, das hier als Beispiel untersucht werden soll, besteht aus fünf Fermionen, die sich in einer eindimensionalen Box der Länge $L = A \cdot d$ ($A = 5$, $d = 2.5\text{fm}$) mit periodischen Randbedingungen befinden sollen [5, 22]. Der statistische Operator

des kanonischen Ensembles, ausgedrückt in der Basis der Eigenfunktionen $|k\rangle$ des Impulsoperators, lautet für A Teilchen pro Box:

$$\tilde{R}(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \frac{1}{A!} \sum_{k_1 < \dots < k_A} |k_1, \dots, k_A\rangle_a \exp\{-\beta E(k_1, \dots, k_A)\} \langle k_1, \dots, k_A| \quad (3.26)$$

$$Z(\beta) = \sum_{k_1 < \dots < k_A} \exp\{-\beta E(k_1, \dots, k_A)\}$$

$$E(k_1, \dots, k_A) = \sum_{l=1}^A \frac{k_l^2}{2m}, \quad E_0(A) = \frac{1}{2m} \left(\frac{2\pi}{Ad}\right)^2 2 \sum_{l=1}^A l^2$$

Dabei bezeichnet $1/\sqrt{A!} |k_1, \dots, k_A\rangle_a$ die normierte Slaterdeterminante der A Einteilchenzustände und k_l die Wellenzahl des l -ten Teilchens. Aufgrund der periodischen Randbedingungen können die Wellenzahlen nur ganzzahlige Vielfache von $2\pi/L$ sein.

Die Abbildung 3.1 stellt die mittlere Anregungsenergie des Systems

$$\langle\langle \tilde{H} - E_0 \rangle\rangle|_T \quad (3.27)$$

dar, die zum einen mit der Zustandssumme des kanonischen Ensembles ausgedrückt in Eigenzuständen des Impulsoperators (3.26) und zum anderen mit der Zustandssumme des kanonischen Ensembles ausgedrückt im Erzeugendensystem der FMD-Einteilchenwellenpakete (3.22) berechnet wurde. Die Integration über die Orts- und Impulsparameter der Einteilchenwellenpakete erfolgte dabei mittels eines Monte-Carlo-Verfahrens.

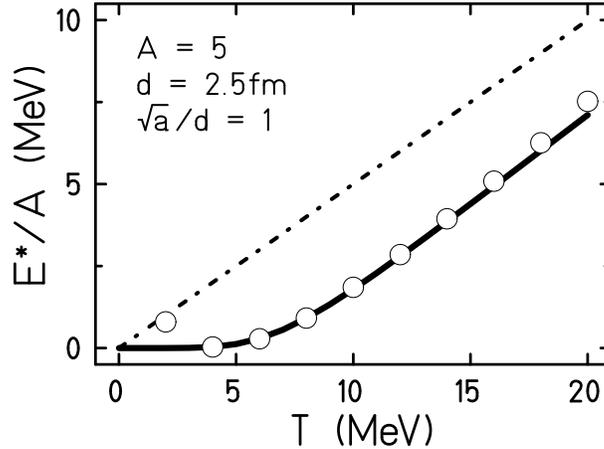


Abbildung 3.1: Anregungsenergie freier Fermionen in einer Dimension mit periodischen Randbedingungen. Die durchgezogene Linie stellt die aus (3.26), die Kreise die aus (3.22) folgende Anregungsenergie dar. Als Strich-Punkt-Linie ist das klassische Resultat zum Vergleich angegeben.

Auch hier ergibt sich die erwartete Übereinstimmung. Die Abweichung für kleine T ist numerischer Natur und hat ihren Ursprung in der Inversion der Matrix (3.24), die leichte Abweichung für große T resultiert aus der Beschränkung des Parameterraumes bei der Monte–Carlo–Integration.

Die Beschreibung freier Fermionen, wie sie in den Arbeiten von A. Ohnishi und J. Randrup erfolgt [21, 22], indem für die Zustandssumme

$$Z(\beta) = \int d\mu(Q) \exp \left\{ -\beta \langle Q | \underline{H} | Q \rangle \right\} \quad (3.28)$$

angesetzt wird, führt auf das falsche Ergebnis, wie die Autoren selbst bemerken. Die Grund liegt in der unzulässigen Annahme, das statistische Gewicht sei durch $\exp \left\{ -\beta \langle Q | \underline{H} | Q \rangle \right\}$ gegeben, anstatt durch $\langle Q | \exp \left\{ -\beta \underline{H} \right\} | Q \rangle$.

3.2.3 Unterscheidbare Teilchen im harmonischen Oszillator

Ebenfalls analytisch lösbar ist das Problem unterscheidbarer Teilchen gleicher Masse im gemeinsamen harmonischen Oszillatorpotential. Die A -Teilchenzustandssumme

$$Z(\beta) = \left[\int d\mu(q) \langle q | \exp \left\{ -\beta \underline{h}_{\text{HO}} \right\} | q \rangle \right]^A \quad (3.29)$$

zerfällt wieder in Einteilchenzustandssummen

$$\begin{aligned} z(\beta) &= \int d\mu(q) \langle q | \exp \left\{ -\beta \underline{h}_{\text{HO}} \right\} | q \rangle & (3.30) \\ &= \int d\mu(q) \exp \left\{ -\frac{3}{2} \beta \omega - \frac{m \omega}{2} \left(\vec{r}^2 + \frac{\vec{p}^2}{(m \omega)^2} \right) \left[1 - e^{-\beta \omega} \right] \right\} \langle q | q \rangle \\ &= \exp \left\{ -\frac{3}{2} \beta \omega \right\} \left[1 - e^{-\beta \omega} \right]^{-3}, \end{aligned}$$

und es ergibt sich die mittlere Energie von

$$\begin{aligned} \langle \langle \underline{H} \rangle \rangle \Big|_T &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z(\beta)) & (3.31) \\ &= \frac{3\omega}{2} A \coth \left(\frac{\omega}{2T} \right), \quad T = \frac{1}{\beta}. \end{aligned}$$

Diese Ergebnis ist identisch mit dem in der Eigenbasis des Hamiltonoperators berechneten und zeigt wiederum nur, daß die FMD–Versuchszustände den gesamten Hilbertraum aufspannen.

3.2.4 Identische Fermionen im harmonischen Oszillator

Zu guter Letzt sei noch das Beispiel identischer Fermionen im harmonischen Oszillator angeführt. Es läßt sich auf die im Abschnitt 3.2.2 beschriebene Weise lösen. Entsprechend ergibt sich die mittlere Energie zu

$$\begin{aligned} \langle\langle \underline{H} \rangle\rangle|_T &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(Z(\beta)) & (3.32) \\ &= \frac{\int d\mu(Q) \mathcal{W}(\beta) \sum_{m,n}^A \mathcal{O}_{nm}(\beta) \left[-\frac{\partial}{\partial\beta} \langle q_m | \exp\left\{ -\beta \underline{h}_{\text{HO}} \right\} | q_n \rangle \right]}{\int d\mu(Q) \mathcal{W}(\beta)}, \end{aligned}$$

wobei $\mathcal{W}(\beta)$ und $\mathcal{O}^{-1}(\beta)$ hier wie folgt lauten

$$\mathcal{W}(\beta) = \frac{\det\left(\langle q_k | \exp\{-\beta \underline{h}_{\text{HO}}\} | q_l \rangle\right)}{\det\left(\langle q_k | q_l \rangle\right)}, \quad (3.33)$$

$$\left(\mathcal{O}^{-1}(\beta)\right)_{kl} = \langle q_k | \exp\{-\beta \underline{h}_{\text{HO}}\} | q_l \rangle.$$

Die Matrixelemente sind in Gleichung (B.3) zusammengefaßt. Die Integration erfolgt mit Hilfe eines Monte-Carlo-Verfahrens im Parameterraum. Abbildung 3.2 zeigt das Ergebnis für die Anregungsenergie.

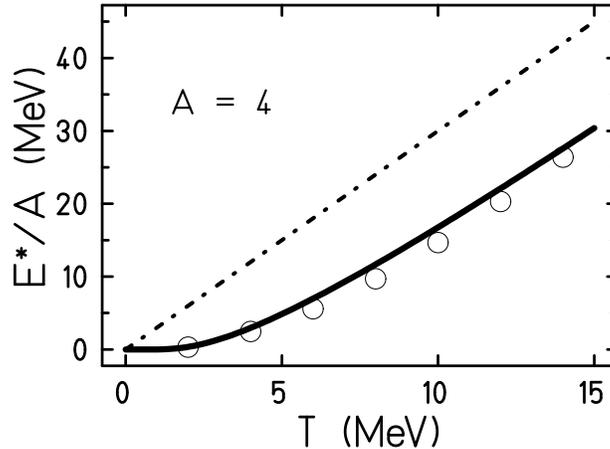


Abbildung 3.2: Anregungsenergie identischer Fermionen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator. Die durchgezogene Linie stellt die mit Hilfe der Eigenzustände des harmonischen Oszillators berechnete Anregungsenergie dar, die Kreise die aus (3.32) folgende Anregungsenergie. Die Strich-Punkt-Linie gibt das klassische Resultat wieder.

Die angeführten Beispiele verdeutlichen, daß die nichtorthogonalen Versuchszustände der Fermionischen Molekulardynamik ein Erzeugendensystem bilden, mit dem sich die

Zustandssumme eines statistischen Ensembles darstellen läßt. Diese Zustandssumme ist mit der in den Eigenzuständen des Hamiltonoperators ausgedrückten mathematisch identisch. Das bedeutet aber nichts anderes, als daß die thermostatischen Eigenschaften der Fermionischen Molekulardynamik die der Fermi–Dirac–Statistik sind. Näherungen, wie sie in Ref. [22] vorgeschlagen werden, sind unnötig.

3.3 Ergodenensemble

Die Fermionische Molekulardynamik ist eine deterministische Transporttheorie. Sind der Zustand eines Systems zu einer beliebigen Zeit $|Q(t_0)\rangle$ und der Hamiltonoperator bekannt, so ist es auch der Zustand $|Q(t)\rangle$ zu jeder anderen Zeit. Erwartungswerte, wie z.B. die Energie eines angeregten Systems oder die Wahrscheinlichkeit, das System in einem bestimmten Zustand zu finden, sind wohldefinierte Größen. Es ist aber keineswegs offensichtlich, wie thermodynamische Größen aus einer deterministischen Molekulardynamik extrahiert werden können.

In diesem Abschnitt wird an den Beispielen identischer und unterscheidbarer Teilchen im Potential des harmonischen Oszillators gezeigt, wie durch Zeitmittelung statistische Mittelwerte und die Temperatur des Systems bestimmt werden können. Es stellt sich heraus, daß die untersuchten Systeme ergodisch sind und die zeitgemittelten Erwartungswerte mit den entsprechenden Mittelwerten des kanonischen Ensembles zusammenfallen, d.h., daß Zeitmittelung und Scharmittelung im kanonischen Ensemble für diese Systeme äquivalent sind.

Die Zeitmittelung erfolgt im Ergodenensemble. Die folgenden beiden Gleichungen definieren den statistischen Operator des Ergodenensembles \tilde{R}_{erg}

$$\tilde{R}_{\text{erg}} := \lim_{t_2 \rightarrow \infty} \frac{1}{(t_2 - t_1)} \int_{t_1}^{t_2} dt |Q(t)\rangle\langle Q(t)| \quad (3.34)$$

und das mit diesem Operator berechnete Zeitmittel eines beliebigen Operators \tilde{B}

$$\overline{\langle \tilde{B} \rangle} \Big|_{\langle \tilde{H} \rangle} := \text{Sp}(\tilde{R}_{\text{erg}} \tilde{B}) = \lim_{t_2 \rightarrow \infty} \frac{1}{(t_2 - t_1)} \int_{t_1}^{t_2} dt \langle Q(t) | \tilde{B} | Q(t) \rangle. \quad (3.35)$$

Im allgemeinen hängt der statistische Operator \tilde{R}_{erg} vom Anfangszustand $|Q(t_1)\rangle$, dem Hamiltonoperator und den Bewegungsgleichungen ab. Erweist sich das System jedoch als ergodisch, bleibt lediglich eine Abhängigkeit bezüglich des Erwartungswertes des Hamiltonoperators $\langle \tilde{H} \rangle$ bestehen. Dieser ist aber eine Konstante der Bewegung

$$\langle Q(t) | \tilde{H} | Q(t) \rangle = \langle Q(0) | \tilde{H} | Q(0) \rangle, \quad \forall t. \quad (3.36)$$

Die Zeitmittelung im Ergodenensemble erfolgt deshalb stets bei konstanter Energie. In der Notation des Zeitmittels (3.35) wird dies durch den Index „ $\langle \tilde{H} \rangle$ “ verdeutlicht.

3.3.1 Fermionen im Oszillatorpotential – Kanonisches Ensemble

Mit Hilfe des statistischen Operators $\tilde{R}(\beta)$ des kanonischen Ensembles für A Fermionen im Potential eines eindimensionalen harmonischen Oszillators (siehe auch (B.5)), der im folgenden in der Eigenbasis des Hamiltonoperators dargestellt ist

$$\tilde{R}(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \frac{1}{A!} \sum_{n_1 < \dots < n_A}^{\infty} |n_1, \dots, n_A\rangle_a \exp\{-\beta E(n_1, \dots, n_A)\} {}_a\langle n_1, \dots, n_A| \quad (3.37)$$

$$Z(\beta) = \sum_{n_1 < \dots < n_A}^{\infty} \exp\{-\beta E(n_1, \dots, n_A)\} \propto \prod_{k=1}^A \frac{1}{1 + \exp(-\beta \omega k)}$$

$$E(n_1, \dots, n_A) = \omega \sum_{i=1}^A \left(n_i + \frac{1}{2}\right), \quad T = \frac{1}{\beta},$$

ergibt sich das statistische Mittel eines beliebigen Operators \tilde{B} als

$$\begin{aligned} \langle\langle \tilde{B} \rangle\rangle \Big|_T &:= \text{Sp}(\tilde{R}(\beta) \tilde{B}) \quad (3.38) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \frac{1}{A!} \sum_{n_1 < \dots < n_A}^{\infty} {}_a\langle n_1, \dots, n_A | \tilde{B} | n_1, \dots, n_A \rangle_a \exp\{-\beta E(n_1, \dots, n_A)\}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet $1/\sqrt{A!} |n_1, \dots, n_A\rangle_a$ die aus den Oszillatoreigenzuständen $|n_1\rangle, \dots, |n_A\rangle$ gebildete normierte Slaterdeterminante. Der Index „ T “ gibt an, daß das statistische Mittel des kanonischen Ensembles bei einer bestimmten Temperatur berechnet wird.

Im folgenden wird ein System untersucht, das aus vier Fermionen besteht, die in einem gemeinsamen harmonischen Oszillatorpotential gebunden sind. Die Frequenz des Oszillators beträgt $\omega = 0.04 \text{ fm}^{-1}$, so daß sich ein Abstand von 8 MeV zwischen den Einteilchenenergieniveaus ergibt.

Die Graphik auf der linken Seite von Abbildung 3.3 stellt die Abhängigkeit der Anregungsenergie von der Temperatur (durchgezogene Linie) dar, wie sie sich im kanonischen Ensemble ergibt (Gleichung (B.5) in Anhang B.2). In der Graphik auf der rechten Seite von Abbildung 3.3 sind die mittleren Besetzungswahrscheinlichkeiten der 21 niedrigsten Eigenzustände für fünf verschiedene Temperaturen aufgetragen.

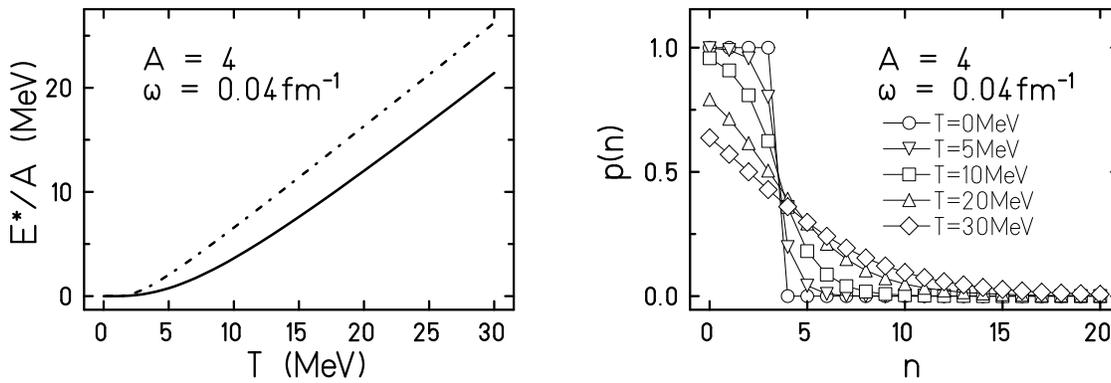


Abbildung 3.3: Fermionen mit gleichem Spin im eindimensionalen harmonischen Oszillator;
 links: Anregungsenergie als Funktion der Temperatur (durchgezogene Linie), zum Vergleich das Ergebnis für unterscheidbare Teilchen, die durch einen Produktzustand beschrieben werden (Strich-Punkt), rechts: Besetzungswahrscheinlichkeiten für fünf ausgewählte Temperaturen, dabei bezeichnet n den n -ten Eigenzustand und $p(n)$ die Besetzungswahrscheinlichkeit dieses Zustandes (Die Linien sollen lediglich das Auge leiten.)

Die mittleren Besetzungswahrscheinlichkeiten ergeben sich im kanonischen Ensemble zu

$$p(n) = \langle \langle \mathcal{L}_n^+ \mathcal{L}_n \rangle \rangle \Big|_T, \quad (3.39)$$

wobei \mathcal{L}_n^+ den Erzeugungsoperator eines Fermions im Oszillatoreigenzustand $|n\rangle$ bezeichnet. Sie bilden eine Fermiverteilung für das kanonische Ensemble, d.h. für ein Fermionensystem mit fester Teilchenzahl.

3.3.2 Fermionen im Oszillatorpotential – Ergodenensemble

In diesem Abschnitt werden die mittleren Besetzungswahrscheinlichkeiten im Ergodenensemble ermittelt und mit denen des kanonischen Ensembles verglichen.

Die Zeitentwicklung Gaußscher Wellenpakete im harmonischen Oszillator (Gleichungen (2.42) und (2.43)) wird durch die Fermionische Molekularodynamik exakt beschrieben, d.h., sie stimmt mit der Lösung der Schrödingergleichung überein und ist damit eine unitäre Transformation im Einteilchenhilbertraum. Der Überlapp zweier Einteilchenwellenpakete bleibt erhalten, und deshalb ändern sich insbesondere die Besetzungswahrscheinlichkeiten im Zeitverlauf nicht. Um die thermodynamischen Gleichgewichtseigenschaften des Systems bestimmen zu können, wird deshalb eine kurzreichweitige und abstoßende Zweiteilchenwechselwirkung eingeführt, die die integrierbaren

Oszillationen in ungeordnete Bewegung verwandelt. Der Hamiltonoperator besteht damit aus dem des harmonischen Oszillators \tilde{H}_{HO} und der Wechselwirkung \tilde{V}_{I}

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \tilde{H}_{\text{HO}} + \tilde{V}_{\text{I}} \quad (3.40) \\ \tilde{V}_{\text{I}} &= \sum_{k < l} V_0 \exp \left\{ -\frac{(\tilde{x}_k - \tilde{x}_l)^2}{r_0^2} \right\} ; \quad V_0 = (10^4 \dots 10^5)\omega, \quad r_0 = \frac{0.01}{\sqrt{m\omega}}. \end{aligned}$$

Die Stärke von \tilde{V}_{I} ist so gewählt, daß die resultierenden Matrixelemente klein gegen den Niveauabstand ω und die Anregungsenergie sind. Zur Gesamtenergie trägt die Wechselwirkung mit etwa 2% bei. Die Zweiteilchenwechselwirkung wird durch eine gaußförmige Abstoßung realisiert; die genaue Form der Wechselwirkung spielt aber für diese Untersuchung keine Rolle, wichtig ist nur die durch sie erreichte Äquilibration.

T (MeV)	E^*/A (MeV)
5	0.75
10	3.63
20	12.02
30	21.41

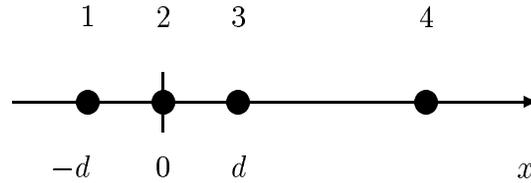


Abbildung 3.4: Links: Vier ausgewählte Temperaturen und die zugehörigen Anregungsenergien des kanonischen Ensembles; rechts: Schema der Anordnung der Gaußschen Wellenpakete im Ortsraum, die Punkte geben die Zentren der Pakete wieder.

Der Ausgangszustand dieser Untersuchung wird von vier Wellenpaketen gebildet, die in einer Dimension angeordnet sind (Abb. 3.4 rechts). Alle vier Pakete besitzen dieselbe Breite $a = 1/m\omega$. Drei Wellenpakete liegen symmetrisch zum Ursprung bei $x = (-d, 0, d)$ — wobei $d = 0.5/\sqrt{m\omega}$ — das vierte Paket hingegen ist ausgelenkt, um die angestrebte Energie einzustellen. Da die mittleren Impulse der Einteilchenwellenpakete alle Null sind, besteht die Anregungsenergie des Anfangszustandes nur aus potentieller Energie. Durch die schwache Wechselwirkung wird diese Energie auf alle Freiheitsgrade verteilt.

Der Ausgangszustand, dessen Besetzungswahrscheinlichkeiten von denen des Gleichgewichtszustandes weit entfernt sind, wird den Bewegungsgleichungen (2.5) folgend über etwa 2000 Perioden des harmonischen Oszillators ($2\pi/\omega = 157 \text{ fm}/c$) entwickelt. Um eine erste Äquilibration des Ausgangszustandes zu ermöglichen, beginnt die Zeitmittelung nach $t_1 = 10000 \text{ fm}/c$. Die verbleibende Zeit von etwa $300000 \text{ fm}/c$ ist deshalb so lang, weil eine sehr schwache Wechselwirkung gewählt wurde, um den ursprünglichen Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators nur wenig zu stören. Das System stellt deshalb ein ideales Gas in einem durch das Oszillatorpotential gebildeten Container dar.

Die folgenden beiden Graphiken (Abb. 3.5) vergleichen die Zeitentwicklung desselben Anfangszustandes ohne und mit Wechselwirkung. Im linken Bild erkennt man, daß die momentanen Besetzungswahrscheinlichkeiten $\langle Q(t) | \zeta_n^+ \zeta_n | Q(t) \rangle$ im Zeitverlauf konstant bleiben, da die Zeitentwicklung ohne Wechselwirkung eine unitäre Transformation im Einteilchenraum ist. Dieses erwartete Verhalten dient als Genauigkeitstest des Integrationsverfahrens.

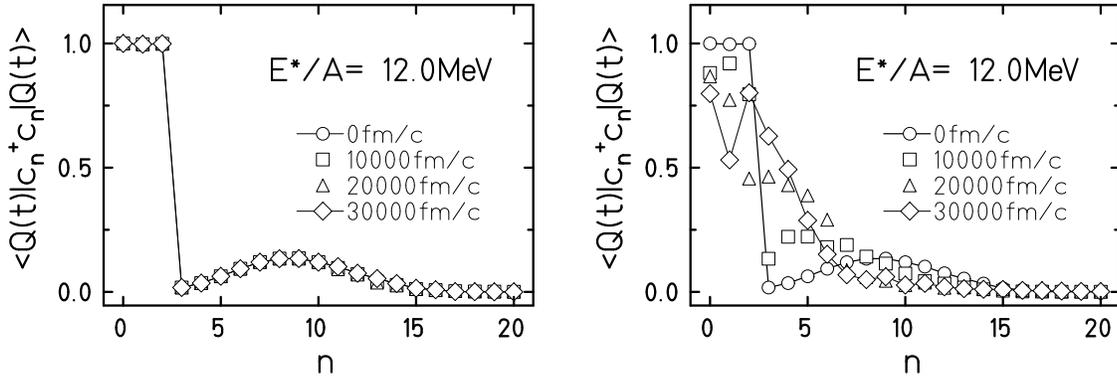


Abbildung 3.5: Zeitentwicklung der momentanen Besetzungswahrscheinlichkeiten $\langle Q(t) | \zeta_n^+ \zeta_n | Q(t) \rangle$ ohne (links) und mit (rechts) Zweiteilchenwechselwirkung. Die Verteilungen bei $t = 0$ und $t = 30000 \text{ fm/c}$ sind durch verbundene Symbole markiert.

Im rechten Bild, das die momentanen Besetzungswahrscheinlichkeiten zu drei späteren Zeiten darstellt, ist zu sehen, daß durch die Wechselwirkung eine Umbesetzung der Zustände stattfindet. In Abbildung 3.6 erkennt man, daß die momentanen Besetzungswahrscheinlichkeiten aufgrund dieser Umbesetzungen im Zeitverlauf stark und ungeordnet fluktuieren, obwohl das System durch deterministische Bewegungsgleichungen beschrieben wird.

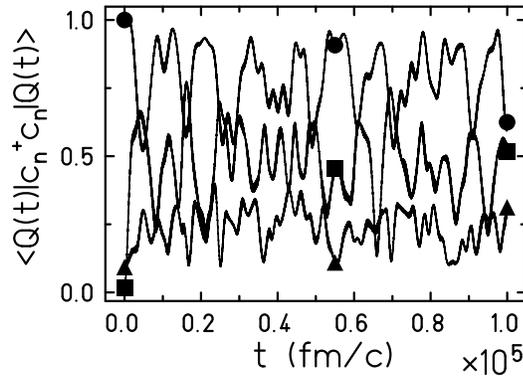


Abbildung 3.6: Besetzungswahrscheinlichkeiten $\langle Q(t) | \zeta_n^+ \zeta_n | Q(t) \rangle$ in Abhängigkeit von der Zeit für eine Anregungsenergie von $E^*/A = 12 \text{ MeV}$; $n = 0$: Kreise, $n = 3$: Quadrate, $n = 6$: Dreiecke.

Eine Zeitmittelung der in Abbildung 3.6 für $E^*/A = 12$ MeV exemplarisch dargestellten momentanen Besetzungswahrscheinlichkeiten führt auf die mittleren Besetzungswahrscheinlichkeiten des Ergodenensembles

$$\overline{\langle \xi_n^+ \xi_n \rangle} \Big|_{\langle H \rangle} = \lim_{t_2 \rightarrow \infty} \frac{1}{(t_2 - t_1)} \int_{t_1}^{t_2} dt \langle Q(t) | \xi_n^+ \xi_n | Q(t) \rangle . \quad (3.41)$$

Dabei ergibt sich der Erwartungswert des Besetzungszahloperators zu

$$\langle Q(t) | \xi_n^+ \xi_n | Q(t) \rangle = \sum_{k,l}^A \langle q_k | \xi_n^+ \xi_n | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} . \quad (3.42)$$

Er wird in den dargestellten Rechnungen mit Hilfe einer nichtorthogonalen Basis Gaußscher Wellenfunktionen, durch die sich die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators aufspannen lassen, ermittelt (B.3).

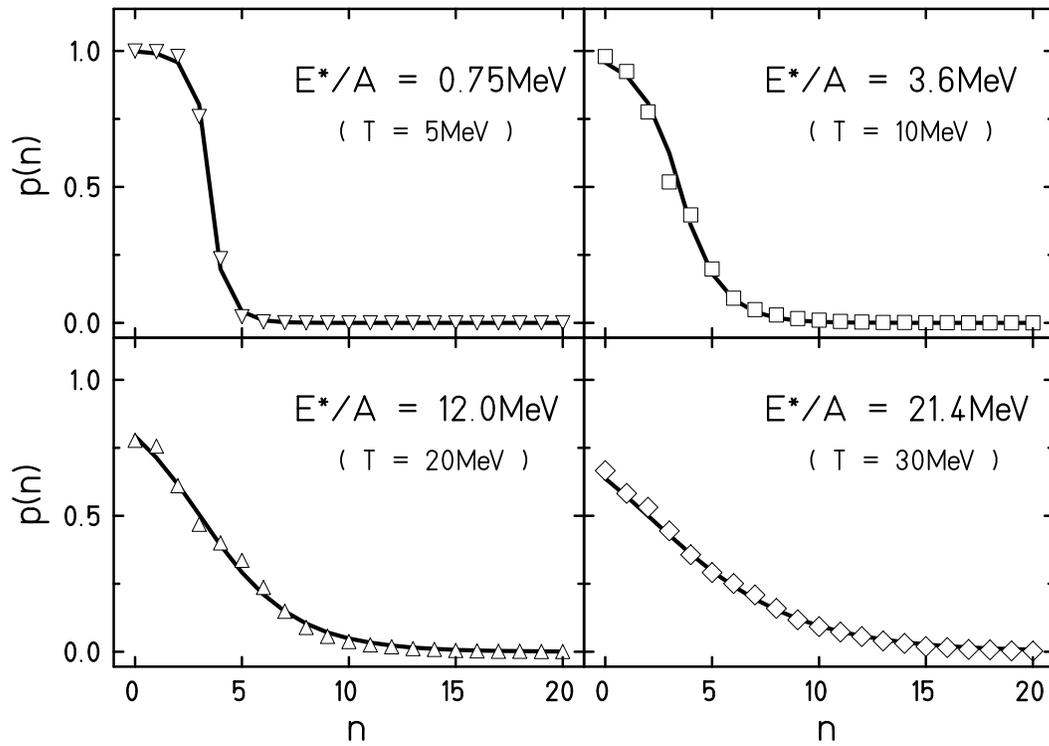


Abbildung 3.7: Vergleich der im Ergodenensemble berechneten Besetzungszahlen (3.41) mit den kanonischen (3.39). Die kanonischen Besetzungszahlen sind durch eine Linie verbunden, die im Ergodenensemble berechneten durch Symbole dargestellt.

In Abbildung 3.7 sind die Ergebnisse der Zeitmittelung für vier verschiedene Anregungsenergien, d.h. verschiedene anfängliche Auslenkungen, durch Symbole dargestellt. Gleichzeitig geben die Graphiken als durchgezogene Linien jeweils die Verteilung des kanonischen Ensembles (3.37) wieder, das dieselbe Anregungsenergie besitzt.

Die dieser Anregungsenergie entsprechende Temperatur im kanonischen Ensemble ist ebenfalls in den Darstellungen angegeben. Es ist erstaunlich, daß zwischen den Ergebnissen des Ergodenensembles und denen des kanonischen Ensembles nahezu kein Unterschied besteht

$$\overline{\langle \xi_n^+ \xi_n \rangle}_{\langle \mathcal{H} \rangle} \approx \langle \langle \xi_n^+ \xi_n \rangle \rangle_T \quad \forall n, \quad (3.43)$$

vorausgesetzt, die beiden Ensemble besitzen dieselbe Anregungsenergie

$$E^* = \overline{\langle \mathcal{H}_{\text{HO}} - E_0 \rangle}_{\langle \mathcal{H} \rangle} = \langle \langle \mathcal{H}_{\text{HO}} - E_0 \rangle \rangle_T, \quad E_0 = 8 \omega. \quad (3.44)$$

Dieses Ergebnis ist nicht selbstverständlich, da zum einen das System selbst sehr klein ist — es besteht aus lediglich vier Teilchen — und zum anderen die Bewegungsgleichungen durch die Fermionische Molekulardynamik approximiert werden.

Der eindeutige Zusammenhang zwischen den Besetzungswahrscheinlichkeiten des Ergodenensembles und denen des kanonischen Ensembles, das dieselbe Anregungsenergie besitzt, ist jedoch ein klarer Beleg dafür, daß das System ergodisch ist und die durch die Bewegungsgleichungen der FMD beschriebene Vielteilchentrajektorie den Phasenraum entsprechend den Gewichten der Fermi–Dirac–Statistik durchläuft.

Dieser Zusammenhang ermöglicht es außerdem, dem durch einen reinen, aber zeitabhängigen Zustand $|Q(t)\rangle$ beschriebenen System eine Temperatur zuzuordnen. Es ist dies gerade diejenige Temperatur, die mit der Anregungsenergie im kanonischen Ensemble korrespondiert (Gleichung (3.38) und Abbildung 3.3 links).

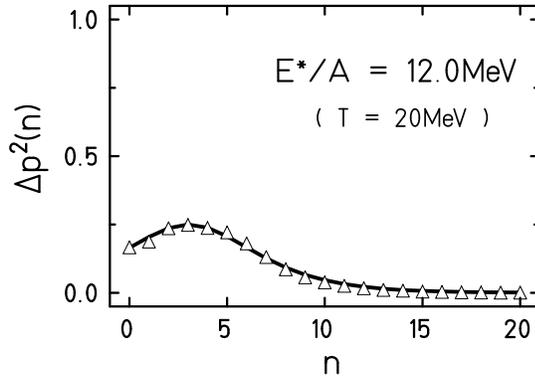


Abbildung 3.8: Varianz der Fluktuationen $\Delta p^2(n)$ im kanonischen Ensemble (durchgezogene Linie) und im Ergodenensemble (Dreiecke).

Es stimmen jedoch nicht nur die Einteilchenverteilungen der beiden Ensemble überein, sondern auch die Varianzen der Fluktuationen $\Delta p^2(n)$

$$\Delta p^2(n) := \langle \langle (\xi_n^+ \xi_n)^2 \rangle \rangle_T - \left(\langle \langle \xi_n^+ \xi_n \rangle \rangle_T \right)^2 \quad (3.45)$$

ergeben sich als numerisch identisch (Abbildung 3.8), d.h., die im Ergodenensemble bestimmten Varianzen konvergieren gegen die des kanonischen Ensembles, in dem sie durch $\Delta p^2(n) = p(n)(1 - p(n))$ gegeben sind.

3.3.3 Fermionen im Oszillator und der AMD-Versuchszustand

Der Versuchszustand der Antisymmetrisierten Molekulardynamik (AMD) [10] unterscheidet sich von dem der FMD nur in den zeitunabhängigen Parametern der Breite und des Spins. Wie schon am Anfang dieses Kapitels ausgeführt wurde, spannen sowohl die Zustände der FMD, als auch die der AMD den gesamten Hilbertraum auf. Deshalb besitzen beide Modelle dieselben thermostatischen Eigenschaften der Fermi-Dirac-Statistik. Die thermodynamischen Eigenschaften der AMD werden jedoch auch vom fluktuierenden Stoßterm, der ein bedeutender Bestandteil dieses Modells ist, und von den eingefrorenen Freiheitsgraden abhängen.

Die folgenden Untersuchungen beschränken sich auf den Einfluß der zeitunabhängigen Breiten. Da die Parameter der Breite festgehalten werden, stimmt der AMD-Versuchszustand für freie Fermionen oder Fermionen im harmonischen Oszillatorpotential im allgemeinen nicht mehr mit der Lösung der Schrödingergleichung überein. Es kommt zu unphysikalischer Streuung [2] (Siehe auch Abschnitt 2.6.). Für den harmonischen Oszillator ist der AMD-Versuchszustand lediglich dann mit der exakten Lösung identisch, wenn die Breiten der Einteilchenwellenpakete mit der Breite des Grundzustandes zusammenfallen, d.h. $a_k = (m\omega)^{-1}$. In diesem Fall gilt dann $da_k/dt = 0$ (2.43).

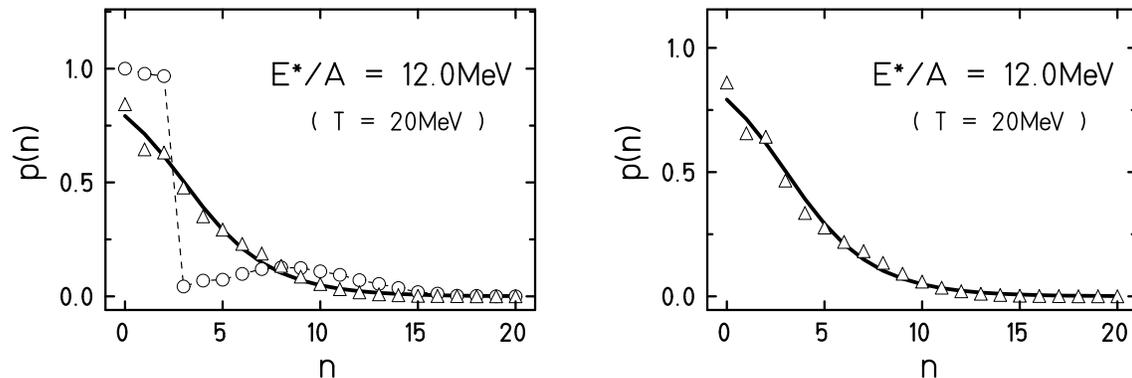


Abbildung 3.9: Mit dem AMD-Versuchszustand berechnete Besetzungswahrscheinlichkeiten (Symbole, Gl. (3.41)) verglichen mit denen des kanonischen Ensembles (durchgezogene Linie, Gl. (3.39)).

Links: Ohne Wechselwirkung ($V_I = 0$), Kreise: $a = (m\omega)^{-1}$, Dreiecke: $a = 1.2(m\omega)^{-1}$. Rechts: Mit Wechselwirkung V_I , Dreiecke: $a = 1.2(m\omega)^{-1}$.

Die linke Graphik in Abbildung 3.9 zeigt für dasselbe System, wie es im vorange-

gangenen Abschnitt behandelt wurde, die Ergebnisse der Zeitmittelung, aber ohne daß zwischen den Fermionen eine Kraft gewirkt hätte, d.h. $\check{V}_I = 0$. Werden die Breiten als $a_k = (m\omega)^{-1}$ gewählt (Kreise), so ist die Zeitentwicklung wieder eine unitäre Transformation im Einteilchenraum und die Besetzungswahrscheinlichkeiten bleiben stationär. Nimmt man als Breiten jedoch einen anderen Wert, z.B. $a_k = 1.2(m\omega)^{-1}$ (Dreiecke), dann erweist sich die Zeitentwicklung im Einteilchenraum als nicht mehr unitär, und die Besetzungswahrscheinlichkeiten verändern sich mit der Zeit. Aufgrund der unphysikalischen Streuung äquilibriert dieses System sogar ohne Wechselwirkung.

Die rechte Graphik in Abb. 3.9 stellt die zeitgemittelten Besetzungswahrscheinlichkeiten dar, wie sie sich ergeben, wenn das Wechselwirkungspotential ungleich Null ist (Dreiecke). Wie man sehen kann, äquilibriert der AMD-Versuchszustand gegen das kanonische Ensemble. Der eigentliche Grund, daß sowohl die mit der Fermionischen Molekulardynamik als auch die mit der Antisymmetrisierten Molekulardynamik berechneten Verteilungen gegen die Verteilungen der Fermi-Dirac-Statistik konvergieren, liegt in der Antisymmetrisierung der Versuchszustände. Die kurzreichweitige, abstoßende Wechselwirkung bestimmt nur noch, wie die Verteilungen konvergieren, aber nicht mehr, wogegen.

Es wäre interessant zu sehen, wie der in der AMD eingeführte phänomenologische Stoßterm die thermodynamischen Eigenschaften der AMD beeinflusst. Da bei Anwendung des Stoßterms dem Pauliprinzip Rechnung getragen wird, sollte man wiederum eine Fermi-Dirac-Verteilung erwarten.

3.3.4 Unterscheidbare Teilchen im harmonischen Oszillator

In diesem Abschnitt wird demonstriert, daß Zeitmittelung auch im Fall unterscheidbarer Teilchen einer Scharmittelung im kanonischen Ensemble entspricht, allerdings jetzt im kanonischen Ensemble der Boltzmannstatistik. Unterscheidbare Teilchen werden durch einen Produktzustand beschrieben. Die Einteilchenzustände sind dem Beispiel des Fermionensystems analog als Gaußsche Wellenpakete gewählt. Die resultierenden Bewegungsgleichungen unterscheiden sich von denen der Fermionischen Molekulardynamik dadurch, daß die schiefsymmetrische Matrix $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ (2.6) eine Form annimmt, in der $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q) = 0$, wenn μ und ν nicht zum selben Wellenpaket gehören, d.h., $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ koppelt die verallgemeinerten Geschwindigkeiten verschiedener Teilchen nicht länger.

Das Ergodenensemble wird wiederum bei verschiedenen Anregungsenergien unter-

T (MeV)	E^*/A (MeV)
5	2.05
10	6.57
20	16.31
30	26.18

sucht und mit dem kanonischen Ensemble derselben Anregungsenergie verglichen. Im kanonischen Ensemble korrespondieren diese Anregungsenergien mit bestimmten Temperaturen. In Abbildung 3.3 (links) ist diese Zuordnung von Temperatur und Anregungsenergie für das kanonische Ensemble, das ein System unterscheidbarer Teilchen beschreibt, als unterbrochene Linie angegeben. Die nebenste-

hende Tabelle gibt den Zusammenhang für vier ausgewählte Temperaturen wieder, der allgemein analytisch angegeben werden kann. Für vier unterscheidbare Teilchen in einem harmonischen Oszillatorpotential der Frequenz ω lautet die mittlere Anregungsenergie

$$E^* = \langle \langle \tilde{H}_{\text{HO}} - E_0 \rangle \rangle \Big|_T = 4 \frac{\omega}{2} \left[\coth \left(\frac{\beta \omega}{2} \right) - 1 \right], \quad E_0 = 2 \omega. \quad (3.46)$$

Da unterscheidbare Teilchen nicht dem Pauliprinzip unterliegen, verhalten sich die Besetzungswahrscheinlichkeiten sehr verschieden. Im Grundzustand ($T = 0$ MeV) zum Beispiel besetzt das System den Einteilchengrundzustand des harmonischen Oszillators vierfach (Abbildung 3.10, links).

Auch für dieses System stellt sich heraus, daß die Zeitentwicklung für alle Anregungsenergien ergodisch ist. Als Beispiel zeigt Abbildung 3.10 auf der rechten Seite für eine Anregungsenergie von $E^*/A = 2.05$ MeV ($T = 5$ MeV) die Besetzungswahrscheinlichkeiten, wie sie sich nach einer Zeitmittelung von etwa 2000 Oszillatorperioden im Ergodenensemble ergeben (Symbole). Die Besetzungswahrscheinlichkeiten stimmen mit denen des kanonischen Ensembles für unterscheidbare Teilchen überein (durchgezogene Linie). Die Verteilung der Besetzungswahrscheinlichkeiten für das Fermionensystem der gleichen Temperatur ist zum Vergleich durch eine punktierte Linie angegeben.

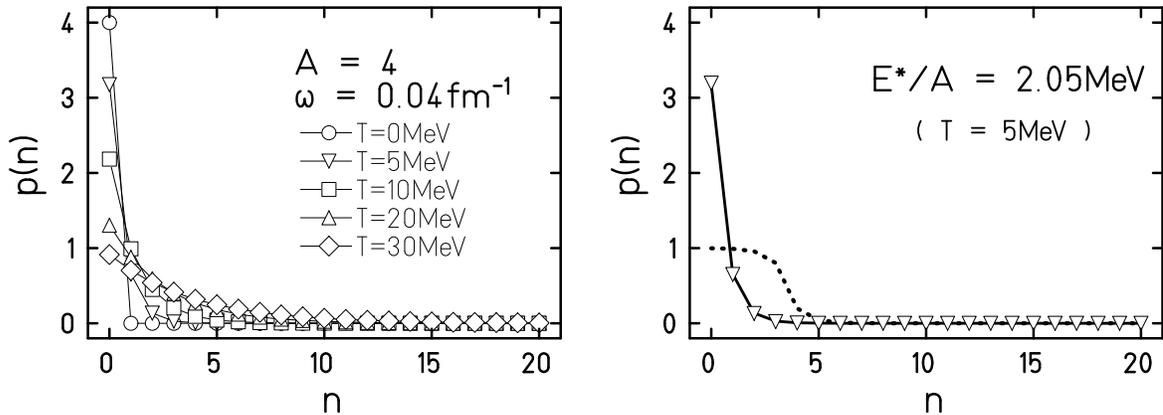


Abbildung 3.10: Besetzungswahrscheinlichkeiten für ein System unterscheidbarer Teilchen (Boltzmannstatistik). Links: Besetzungswahrscheinlichkeiten $p(n)$ der 21 niedrigsten Eigenzustände als Funktion fünf verschiedener Temperaturen im kanonischen Ensemble. Rechts: Vergleich der Besetzungswahrscheinlichkeiten, wie sie sich im Ergodenensemble ergeben (Symbole), mit denen des kanonischen Ensembles (durchgezogene Linie). Die punktierte Linie zeigt zum Vergleich die Verteilung für das Fermionensystem der gleichen Temperatur.

Das Ergebnis zeigt, daß die Bewegungsgleichungen, die jetzt nicht mehr durch das Pauliprinzip beeinflußt werden, immer noch zu einer quantenmechanischen Verteilung der Besetzungswahrscheinlichkeiten führen, diesmal jedoch auf die unterscheidbarer Teilchen.

Der einzig verbliebene Unterschied zu rein klassischen Bewegungsgleichungen besteht in der Zeitabhängigkeit der Breiten. Werden diese für Produktzustände nicht mehr als zeitabhängige Parameter berücksichtigt, erweist sich das thermodynamische Verhalten als klassisch. Das wird im nächsten Abschnitt demonstriert.

3.3.5 Äquilibrierung zweier harmonischer Oszillatoren

In den vorangegangenen Abschnitten wird davon ausgegangen, daß der Begriff der Temperatur für das jeweilige System anwendbar ist. Das schließt ein, daß in den untersuchten Systemen eine Äquilibrierung im Sinne des Ergodenensembles stattfindet. Um diese Eigenschaft deutlicher herauszuarbeiten, wird jetzt ein System untersucht, in dem sich unterscheidbare Teilchen in zwei verschiedenen Oszillatoren befinden¹. Das System besteht aus vier Teilchen, von denen das erste in einem schmalen Oszillator der Frequenz ω_1 gebunden ist, die anderen drei sich in einem weiteren befinden (Abbildung 3.11, links). Zwischen allen vier Teilchen wirkt eine Zweiteilchenwechselwirkung. Der Hamiltonoperator des Systems lautet

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \sum_{l=1}^4 \tilde{h}(l) + \tilde{V}_I, & \tilde{h}(l) &= \frac{\tilde{k}^2(l)}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_l^2 \tilde{x}^2(l) & (3.47) \\ & & \frac{\omega_1}{e} &= \omega_2 = \omega_3 = \omega_4. \end{aligned}$$

Um Schwebungen auszuschließen, ist ω_1 ein irrationales Vielfaches der anderen Kreisfrequenzen, in diesem Beispiel $e = 2.71818\dots$

Die Zustandssumme und damit auch die mittlere Energie sind für einen quantenmechanischen Oszillator analytisch angebar. Die Zustandssumme lautet

$$\begin{aligned} z_l(\beta) &= \sum_n \exp\{-\beta \epsilon_n\}, & \epsilon_n &= \omega_l \left(n + \frac{1}{2} \right) & (3.48) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sinh\left(\frac{\beta\omega_l}{2}\right)}, \end{aligned}$$

damit folgt durch Ableitung nach β die mittlere Energie eines Oszillators

$$\begin{aligned} \langle \langle \tilde{h}(l) \rangle \rangle \Big|_T &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(z_l(\beta)) & (3.49) \\ &= \frac{\omega_l}{2} \coth\left(\frac{\omega_l}{2T}\right). \end{aligned}$$

¹Die Anregung zu dieser Untersuchung stammt von George Bertsch, INT Seattle/USA.

Wenn das System aus vier unterscheidbaren Teilchen in zwei Oszillatoren ergodisch ist, dann müssen die beiden Teilsysteme — das erste Teilchen im schmalen Oszillator und die anderen drei im breiten — im Zeitmittel eine Anregungsenergie besitzen, die der gleichen Temperatur entspricht.

Weiterhin zeigt das Verhältnis, in dem die Anregungsenergien der Teilsysteme zueinander stehen, ob das Ergodenensemble dem kanonischen Ensemble quantenmechanischer unterscheidbarer Teilchen entspricht oder dem klassischer Teilchen. Im kanonischen Ensemble klassischer Teilchen im harmonischen Oszillatorpotential verhalten sich die Anregungsenergien zueinander wie eins zu drei, da jede Anregungsenergie pro Teilchen unabhängig von der Frequenz des Oszillators gleich der Temperatur ist, d.h. $E^* = A \cdot T$. Aufgrund des diskreten Energiespektrums lauten die Anregungsenergien der beiden Teilsysteme im quantenmechanischen Fall hingegen

$$E_1^* = \frac{\omega_1}{2} \left[\coth \left(\frac{\omega_1}{2T} \right) - 1 \right] \quad \text{und} \quad E_2^* = 3 \frac{\omega_2}{2} \left[\coth \left(\frac{\omega_2}{2T} \right) - 1 \right]. \quad (3.50)$$

Auf der rechten Seite von Abbildung 3.11 sind die Anregungsenergien der kanonischen Ensemble dargestellt, die dem quantenmechanischen System zugehörigen durch fette Linien und die dem klassischen System zugehörigen durch dünne Linien.

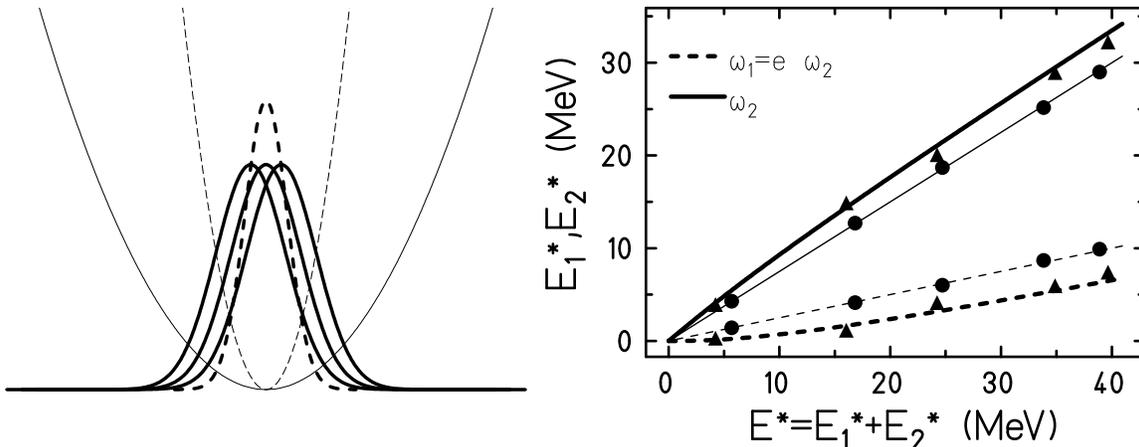


Abbildung 3.11: Vier unterscheidbare Teilchen in zwei Oszillatorpotentialen, davon befindet sich eins in einem Oszillator mit der Frequenz ω_1 und die drei anderen in einem Oszillator mit der Frequenz ω_2 (linkes Bild). Das rechte Bild zeigt die Anregungsenergien der beiden Systeme aus einem bzw. drei Teilchen aufgetragen über der Summe der Anregungsenergien. Dabei stellen die dünnen Linien das Ergebnis des klassischen kanonischen Ensembles, die fetten das Ergebnis des quantenmechanischen kanonischen Ensembles dar. Die ausgefüllten Dreiecke geben das Resultat des Ergodenensembles wieder. Außerdem sind die Ergebnisse des Ergodenensembles für Wellenpakete fester Breite (ausgefüllte Kreise) angegeben.

Die Bewegungsgleichungen der Parameter (2.5)

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu} \dot{q}_{\nu} = -\frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \langle Q(t) | \underline{H} | Q(t) \rangle, \quad (3.51)$$

durch die die zeitgemittelten Erwartungswerte determiniert sind, nehmen für das betrachtete System eine einfache Form an, da das System durch einen Produktzustand beschrieben wird [3]. Die schiefsymmetrische Matrix $\mathcal{A}_{\mu\nu}$ zerfällt in Blöcke, so daß die Bewegungsgleichungen der Parameter auf folgende Weise separieren [3]

$$\begin{aligned} \dot{r}_k &= \frac{\partial}{\partial p_k} \langle Q | \underline{H} | Q \rangle \\ \dot{p}_k &= -\frac{\partial}{\partial r_k} \langle Q | \underline{H} | Q \rangle \\ \dot{a}_{kR} &= 4 a_{kR}^2 \frac{\partial}{\partial a_{kI}} \langle Q | \underline{H} | Q \rangle \\ \dot{a}_{kI} &= -4 a_{kR}^2 \frac{\partial}{\partial a_{kR}} \langle Q | \underline{H} | Q \rangle. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Für den Hamiltonoperator wechselwirkender Teilchen in zwei harmonischen Oszillatorpotentialen

$$\begin{aligned} \underline{H} &= \underline{H}_{\text{HO}} + \underline{V}_{\text{I}} \\ \underline{H}_{\text{HO}} &= \sum_{l=1}^A \underline{h}(l), \quad \underline{h}(l) = \frac{k^2(l)}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_l^2 \underline{x}^2(l) \\ \underline{V}_{\text{I}} &= \sum_{k<l} V_0 \exp \left\{ -\frac{(\underline{x}_k - \underline{x}_l)^2}{r_0^2} \right\} ; V_0 = (10 \dots 50) \omega_2, \quad r_0 = \frac{0.01}{\sqrt{m \omega_2}} \end{aligned} \quad (3.53)$$

ergibt sich als Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle Q | \underline{H} | Q \rangle &= \sum_{k=1}^A \left(\frac{p_k^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 r_k^2 + \frac{1}{4m a_{kR}} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 \frac{|a_k|^2}{2 a_{kR}} \right) \\ &+ \sum_{k<l}^A \frac{V_0 r_0}{R_{kl}} \exp \left\{ -\frac{(r_k - r_l)^2}{R_{kl}^2} \right\} \\ R_{kl}^2 &= r_0^2 + \frac{|a_k|^2}{a_{kR}} + \frac{|a_l|^2}{a_{lR}}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Damit können die Bewegungsgleichungen der Parameter weiter vereinfacht werden

und lauten nun — die gestrichene Summe $\sum_{l=1}^A$ bedeutet, daß $l \neq k$ —

$$\begin{aligned}
\dot{r}_k &= \frac{p_k}{m} \\
\dot{p}_k &= -\frac{1}{2} m \omega_k^2 r_k + \sum_{l=1}^A \frac{2 V_0 r_0}{R_{kl}^3} (r_k - r_l) \exp \left\{ -\frac{(r_k - r_l)^2}{R_{kl}^2} \right\} \\
\dot{a}_{kR} &= 2 m \omega_k^2 a_{kR} a_{kI} \\
&\quad + 4 a_{kR} a_{kI} \sum_{l=1}^A \frac{V_0 r_0}{R_{kl}^3} \exp \left\{ -\frac{(r_k - r_l)^2}{R_{kl}^2} \right\} \left[2 \frac{(r_k - r_l)^2}{R_{kl}^2} - 1 \right] \\
\dot{a}_{kI} &= m \omega_k^2 (a_{kI}^2 - a_{kR}^2) + \frac{1}{m} \\
&\quad - 2 a_{kR}^2 \left(2 - \frac{|a_k|^2}{a_{kR}^2} \right) \sum_{l=1}^A \frac{V_0 r_0}{R_{kl}^3} \exp \left\{ -\frac{(r_k - r_l)^2}{R_{kl}^2} \right\} \left[2 \frac{(r_k - r_l)^2}{R_{kl}^2} - 1 \right].
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Der Erwartungswert des Hamiltonoperators (3.54) unterscheidet sich von der Hamiltonfunktion des analogen klassischen Systems nur noch durch Terme, die die Parameter der Breite enthalten. Auch die Bewegungsgleichungen (3.55) entsprechen den um den Freiheitsgrad der Breite erweiterten klassischen Bewegungsgleichungen.

Die Ergebnisse der Zeitmittelung der Anregungsenergien

$$\begin{aligned}
E_1^* &= \overline{\left\langle \left(\hbar(1) - \frac{1}{2} \omega_1 \right) \right\rangle}_{|\langle \underline{H} \rangle} \\
E_2^* &= \overline{\left\langle \left(\sum_{l=2}^4 \hbar(l) - \frac{3}{2} \omega_2 \right) \right\rangle}_{|\langle \underline{H} \rangle}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

des durch die Bewegungsgleichungen (3.55) beschriebenen Systems sind in Abbildung 3.11 (rechts) durch Dreiecke angegeben, die dem quantenmechanischen Resultat (fette Linien) sehr nahe kommen. Diese Übereinstimmung bedeutet aber nicht weniger, als daß der Freiheitsgrad der Breite zur Beschreibung des quantenmechanischen Systems notwendig ist, denn allein durch diesen Freiheitsgrad unterscheiden sich die Bewegungsgleichungen (3.55) noch von den klassischen.

Hält man, um diese Vermutung zu erhärten, die Parameter der Breite fest, so wird das System nur noch von den ersten beiden Differentialgleichungen in (3.55) beschrieben, und die Energie (3.54) ist die um eine Konstante verschobene Energie des klassischen Systems. In Abbildung 3.11 (rechts) ist das Ergebnis einer Zeitmittelung mit festen Breiten durch Kreise dargestellt. Die Kreise liegen nun auf den durch das klassische kanonische Ensemble (dünne Linien) gegebenen Anregungsenergien.

Für beide Systeme, mit variablen und festen Breiten, werden sehr lange Zeiten benötigt, um die Zeitmittel des Ergodenensembles zu berechnen. Im Fall der variablen Breiten sind das mehr als 30000 Perioden des breiten Oszillators, denen schon eine gleich große Zeit vorangegangen ist, in der das System äquilibrieren soll. Mit festen Breiten

werden diese Zeiten noch größer, da weniger Freiheitsgrade zur Verfügung stehen. Der Grund dieser langen Mittelungszeiten liegt darin, daß die Kräfte, $-\frac{\partial}{\partial q_\mu}\langle Q | \tilde{V}_I | Q \rangle$, aus dem Erwartungswert der Wechselwirkung berechnet werden. Obwohl \tilde{V}_I selbst kurzreichweitig ist, führt die Bildung des Erwartungswertes zu einer langreichweitigen effektiven Wechselwirkung mit der Reichweite R_{kl} (3.54), die von der Größe der Ausdehnung der Wellenpakete ist. Gleichzeitig kann die Stärke V_0 der Wechselwirkung nicht beliebig groß gewählt werden, da sie sonst keine kleine Störung zum Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators darstellen würde und Korrelationen zwischen den Teilchen induzieren könnte. Das Konzept des Ergodenensembles stößt in diesem Fall an seine Grenzen. Für das Fermionensystem beinhaltet die Wechselwirkung durch die Austauschsterme eine zusätzliche Impulsabhängigkeit, woraus sich eine schnellere Äquilibrierung ergibt.

Für das klassische System — feste Breiten — ist es jedoch möglich, den Operator der Wechselwirkung durch sein klassisches Analogon zu ersetzen, indem in (3.53) die Ortsoperatoren \tilde{x}_k durch die klassischen Variable r_k ersetzt werden. Diese Wechselwirkung ist dann wieder kurzreichweitig, und das klassische System äquilibriert viel schneller. Zur Berechnung der zeitgemittelten Anregungsenergien des klassischen Systems — feste Breiten — wurde diese Wechselwirkung verwendet (Kreise in Abbildung 3.11 rechts).

Das Ergebnis dieses Abschnitts besteht darin, daß sowohl im quantenmechanischen Fall — zeitabhängige Breiten — als auch im klassischen Fall — feste Breiten — beide Teilsysteme in den zwei verschiedenen Oszillatoren die gleiche Temperatur annehmen. Der einzige Unterschied zwischen klassischen und quantenmechanischen Bewegungsgleichungen besteht darin, daß letztere den Freiheitsgrad der Breite enthalten. Dieser Freiheitsgrad scheint nötig und ausreichend zu sein, um das diskrete Spektrum von \tilde{H}_{HO} in die Bewegungsgleichungen eingehen zu lassen und den Hilbertraum im Zeitverlauf mit dem richtigen statistischen Gewicht zu bevölkern.

Der letzte Abschnitt zeigt, unter welchen Umständen eine Molekulardynamik mit Wellenpaketen letztendlich zu einem System mit rein klassischen Eigenschaften wird. Diese Untersuchungen verdienen sicher noch mehr Aufmerksamkeit, jedoch war es das Anliegen dieses Kapitel zu zeigen, daß die statistischen Eigenschaften der Fermionischen Molekulardynamik die der Fermi–Dirac–Statistik sind. Die *thermostatischen* Eigenschaften ergeben sich aus dem kanonischen Ensemble, dessen Zustandssumme mit den FMD–Versuchszuständen exakt berechnet werden kann, da diese vollständig sind. Die *thermodynamischen* Eigenschaften können im Ergodenensemble durch Zeitmittelung bestimmt werden. Es zeigt sich, daß die FMD den Hilbertraum im Verlauf der Zeitentwicklung mit dem korrekten Gewicht der Fermi–Dirac–Statistik bevölkert.

Damit ist die weitverbreitete und vielleicht auch naheliegende Vermutung, daß klassische Bewegungsgleichungen stets klassische Statistik für das System nach sich ziehen, widerlegt.

3.4 Ausblick: Die Temperatur angeregter Kerne

Als Ausblick am Ende dieses Kapitels soll noch eine Methode vorgeschlagen werden, mit der die thermodynamischen Eigenschaften von Kernen bestimmt werden können. Diese Untersuchungen haben in letzter Zeit großes experimentelles Interesse gefunden, insbesondere geht es dabei um den nuklearen Flüssigkeit–Gas–Phasenübergang [24].

Die Methode, die hier zur Anwendung kommen soll, ist in den vorangegangenen Abschnitten grundgelegt worden. Sie basiert auf der Eigenschaft der dargestellten gekoppelten Systeme, eine gemeinsame Temperatur anzunehmen. So wie in Abschnitt 3.3.5 die in zwei verschiedenen harmonischen Oszillatoren befindlichen Teilchen durch eine Wechselwirkung gekoppelt und damit im Zeitmittel ins thermische Gleichgewicht gebracht wurden, sollen jetzt die Nukleonen eines angeregten Kerns mit einem Wellenpaket, das sich in einem harmonischen Oszillator befindet, in Kontakt gebracht werden. Die Anordnung entspricht der in Abbildung 3.11 links dargestellten Konfiguration; es wird lediglich der Oszillator, der drei Wellenpakete enthält, gegen den Kern getauscht. Im Gegensatz zu den freien Teilchen im gemeinsamen Oszillatorpotential stellt der Kern jedoch ein selbstgebundenes System dar, in dem die Nukleonen über die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung (C.23) miteinander wechselwirken. Diese Wechselwirkung ist stark im Vergleich zur den bisher zur Äquilibration verwendeten Wechselwirkungen. Weiterhin erfolgt die Rechnung jetzt in allen drei Raumdimensionen.

Das einzelne Teilchen im Oszillator wird an die Nukleonen im Kern angekoppelt und fungiert damit als Thermometer. Über die Zeitmittelung der Anregungsenergie des Thermometerwellenpaketes kann dann die Temperatur des Kerns bestimmt werden. Unter der Annahme der Ergodizität des gekoppelten Systems, die nach den vorangegangenen Untersuchungen gerechtfertigt erscheint, nimmt das Wellenpaket, das als Thermometer arbeitet, im Zeitmittel eine Energie E_{Th} an, die der des kanonischen Ensembles gleicht

$$E_{\text{Th}} = \langle \langle \tilde{H}_{\text{Th}} \rangle \rangle \Big|_T = \overline{\langle \tilde{H}_{\text{Th}} \rangle} \Big|_{\langle \mathcal{H} \rangle} . \quad (3.57)$$

Da es sich bei dem Thermometerwellenpaket um ein einzelnes Teilchen im harmonischen Oszillator handelt, ist seine mittlere Energie auf die folgende Weise mit der Temperatur verknüpft

$$\langle \langle \tilde{H}_{\text{Th}} \rangle \rangle \Big|_T = \frac{3\omega}{2} \coth \left(\frac{\omega}{2T} \right) . \quad (3.58)$$

Die Temperatur berechnet sich deshalb zu

$$T = \omega \left[\ln \left(\frac{E_{\text{Th}} + \frac{3}{2}\omega}{E_{\text{Th}} - \frac{3}{2}\omega} \right) \right]^{-1} . \quad (3.59)$$

Auf diese Weise können Kerne beliebiger Anregungsenergie untersucht werden. Die

Bewegungsgleichungen der FMD beschreiben dabei sowohl die Bewegung der Nukleonen als auch die des angekoppelten Thermometerwellenpaketes

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu}(Q) \dot{q}_{\nu} = -\frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \langle Q(t) | \underline{H} | Q(t) \rangle \quad (2.5''')$$

$$|Q\rangle = |\text{Kern}\rangle \otimes |\text{Thermometer}\rangle. \quad (3.60)$$

Im Prinzip ist auch eine umgekehrte Meßmethode denkbar, bei der das einzelne Thermometerteilchen durch viele ersetzt wird, die dann als Wärmebad wirken. In diesem Fall wird die Temperatur des Wärmebades vorgegeben und die Anregungsenergie des Kern gemessen. Dieser Weg wird hier jedoch nicht verfolgt.

Natürlich geben die bisherigen Ausführungen nur die prinzipielle Idee wieder, für genaue quantitative Untersuchungen müssen zuerst die Eigenschaften des Thermometers und seine Ankopplung bestimmt werden.

Ein heißer Kern wird ab einer bestimmten Anregungsenergie Nukleonen verdampfen und dadurch abkühlen. Damit sich zwischen den Nukleonen im Kern – der Flüssigkeit – und den evaporierten Nukleonen – dem Dampf – ein Phasengleichgewicht einstellen kann, muß man die emittierten Nukleonen dem Kern wieder zur Absorption zur Verfügung stellen. Die praktischste Realisierung besteht darin, den Kern in einem Container gefangen zu halten, der z.B. ein sehr weiter harmonischen Oszillator sein kann. Dieser Oszillator wird sich auf die Vorgänge im Kern kaum auswirken, wenn sein Oszillatorparameter viel größer als der Kernradius ist. Der Nukleonendampf hingegen wird sich wie ein im harmonischen Oszillator gebundenes Quantengas verhalten. Im Zeitmittel kann es so zu einem Gleichgewicht zwischen flüssiger und gasförmiger Phase kommen, in dem Nukleonen aus dem Kern in den Dampf wechseln und umgekehrt.

Ein zweites wesentliches Problem besteht in der Wechselwirkung zwischen den Nukleonen und dem Thermometerwellenpaket. Diese darf nicht zu stark sein, da das Thermometer sonst keine vernachlässigbare Störung mehr darstellt und es zu unerwünschten Korrelationen zwischen Thermometerteilchen und Nukleonen kommen kann. Andererseits muß die Wechselwirkung aber stark genug sein, damit die Mittelung in praktikablen Zeiten vonstatten geht. Es empfiehlt sich deshalb, eine nichtlokale impulsabhängige Wechselwirkung zu verwenden. Mit diesem Problem hängt auch die Wahl der Parameter des Thermometers zusammen. Die Masse des Thermometerteilchens und die Frequenz des Thermometerszillators sind im Prinzip frei wählbar, haben aber ebenfalls Auswirkungen auf die Mittelungsdauer. Um mit der Mittelung den gesamten Kern zu erfassen, sollten die beiden Parameter allerdings so gewählt sein, daß das Thermometerwellenpaket im Zeitverlauf oft genug den Kern durchläuft.

In Studien, die über diese Arbeit hinausgehen, müssen diese Fragen noch eingehender untersucht werden. An dieser Stelle soll lediglich ein vielversprechender Ausblick einer ersten Temperaturmessung an angeregten ^{16}O -, ^{24}Mg - und ^{40}Ca -Kernen gegeben werden. Als günstige Frequenz des Thermometerszillators hat sich ein vergleichsweise hohes $\omega \approx 0.08\text{fm}^{-1}$ herausgestellt, das einem Niveauabstand von etwa 16 MeV entspricht. Die Masse des Thermometerteilchens beträgt $m = 0.1818 m_N$. Es werden

zwei Thermometerwellenpakete verwendet, was die Äquilibration beschleunigt. Legt man zur Abschätzung des von den Thermometerteilchen abgetasteten Volumens die klassische Beziehung

$$\frac{1}{2} m\omega^2 \overline{\langle x^2 \rangle} \Big|_{\langle \mathcal{H} \rangle} = \frac{3}{2} T \quad (3.61)$$

zugrunde, so ergibt sich eine Kugel mit einem Radius von rund 3fm. Die Wechselwirkung wird als impulsabhängige Zweiteilchenwechselwirkung angesetzt, die durch ihre Matrixelemente zwischen den Nukleonenwellenpaketen $|q_k\rangle$ und den Thermometerwellenpaketen $|q_l\rangle$ definiert ist

$$\begin{aligned} \langle q_k q_l | \mathcal{V} | q_k q_l \rangle &= \frac{V_0 r^3}{(r^2 + 2\sigma_{kl})^{\frac{3}{2}}} \exp \left\{ -\frac{\vec{r}_{kl}^2}{r^2 + 2\sigma_{kl}} \right\} \vec{p}_{kl}^2 \quad (3.62) \\ \sigma_{kl} &= 0.1 \left(\frac{|a_k|^2}{a_{kR}} + \frac{|a_l|^2}{a_{lR}} \right) \\ \vec{r}_{kl} &= \vec{r}_k - \vec{r}_l, \quad \vec{p}_{kl} = \vec{p}_k - \vec{p}_l, \\ V_0 &= 20 \text{ MeVfm}^2, \quad r = 0.01 \text{ fm} . \end{aligned}$$

Die Zeitentwicklung des Kerns wird durch den in (C.23) definierten Hamiltonoperator erweitert um den äußeren harmonischen Oszillator ($\omega = 0.005 \text{ fm}^{-1}$) und die Wechselwirkung mit dem Thermometerwellenpaket beschrieben. Zur Zeitmittelung wird das Gesamtsystem über $10000 \text{ fm}/c$ verfolgt. Die Mittelwertbildung erstreckt sich auf die letzten $5000 \text{ fm}/c$.

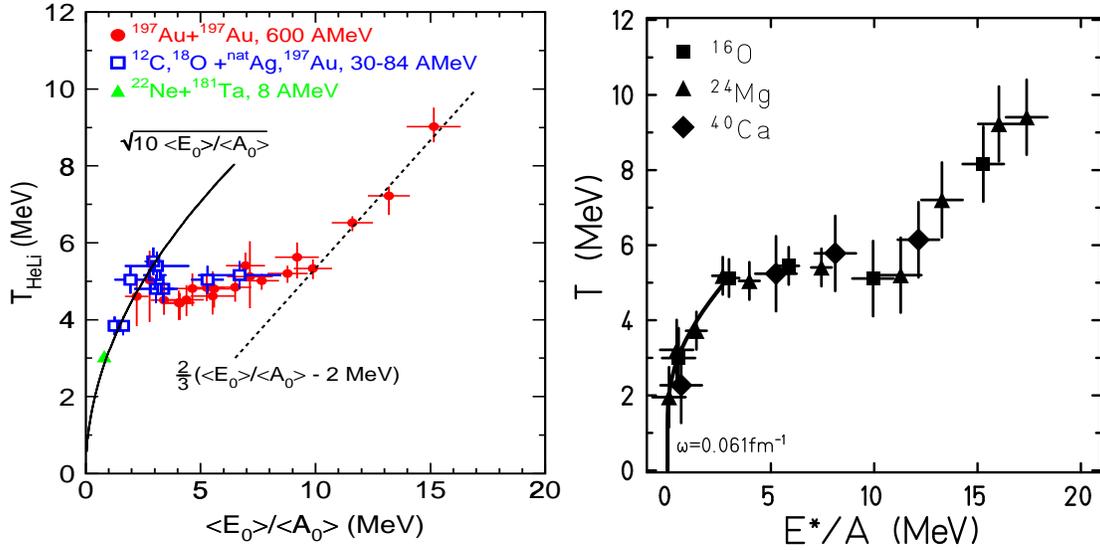


Abbildung 3.12: Der nukleare Flüssig–Gas–Phasenübergang: Temperaturen $T_{\text{He,Li}}$ und T als Funktion der Anregungsenergie. Links: experimentelle Analyse von Projekttilfragmentation [24], rechts: Zeitmittelung mit der FMD, die Fehlerbalken geben die Breiten der zeitlichen Fluktuationen wieder.

In Abbildung 3.12 sind auf der rechten Seite die Ergebnisse für angeregte ^{16}O -, ^{24}Mg - und ^{40}Ca -Kerne durch offene Quadrate, Dreiecke und Rauten dargestellt. Die Fehlerbalken geben die Varianz der zeitlichen Schwankungen von E^* und T wieder, sie sind für ^{40}Ca -Kerne größer, da hier die Mittelung nur über ein Zeitintervall von $1500\text{fm}/c$ läuft.

Für kleine Anregungsenergien verhalten sich die angeregten Kerne wie Fermionensysteme in einem mittleren Feld. Diese Abhängigkeit wird durch die fette durchgezogene Linie demonstriert, die zu einem Oszillator mit einem Niveauabstand von 12 MeV gehört. Dieser Hauptschalenabstand ist von der Größenordnung, wie er in Schalenmodellrechnungen kleinerer Kerne Verwendung findet (z.B. [30]). Erhöht man die Anregungsenergie der Kerne über 3 MeV pro Teilchen, so bleibt die Temperatur in etwa konstant. Erst ab etwa 11 MeV sind alle Bindungen zwischen den Nukleonen aufgebrochen, und die Temperatur steigt wieder mit wachsender Anregungsenergie an. Für hohe Anregungsenergien verhält sich das System wie ein freies Quantengas im Container.

Die Interpretation als Flüssigkeit bis $E^* = 3 A\text{ MeV}$, als Koexistenz von Flüssigkeit und Gas für $3 A\text{ MeV} < E^* < 11 A\text{ MeV}$ und als Gas bei $E^* > 11 A\text{ MeV}$ wird auch von der folgenden Abbildung unterstützt, die die zeitgemittelte radiale Verteilung der Dichte von Magnesium im Ort für vier verschiedene Anregungsenergien wiedergibt, drei liegen im Koexistenzgebiet, die höchste in der Gasphase.

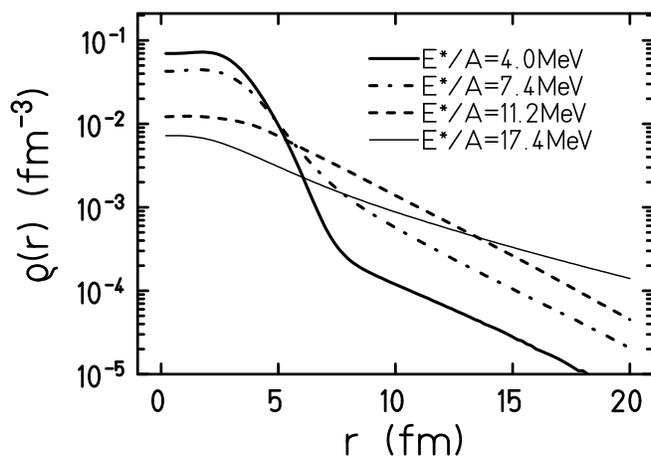


Abbildung 3.13: Radiale Dichteverteilung von ^{24}Mg beim Phasenübergang für drei verschiedene Anregungsenergien im Koexistenzgebiet. Die dünne durchgezogene Linie zeigt zusätzlich die Verteilung für die Gasphase.

Man erkennt, daß der Kern für die kleine Anregungsenergie von $E^*/A = 4.0\text{ MeV}$ sehr kompakt bleibt, d.h sich größtenteils in der flüssigen Phase befindet. Für die mittlere Anregungsenergie von $E^*/A = 7.4\text{ MeV}$ ist der Anteil der Dichte außerhalb des ursprünglichen Kernes schon deutlich gestiegen. Das System befindet sich mitten

im Koexistenzgebiet, es besteht aus einem Flüssigkeitstropfen umgeben von Gas. Für die dritte Anregungsenergie von $E^*/A = 11.2$ MeV ist das System nahezu vollständig in die Gasphase übergegangen. Zusätzlich zu den Verteilungen bei Anregungsenergien im Koexistenzgebiet zeigt die Graphik noch die Dichteverteilung für eine hohe Anregungsenergie, bei der nur noch Dampf vorliegt.

Der Dampf, der sich um die relativ kleinen Kerne bildet, besteht nur aus Nukleonen. Es ist ebenfalls eine interessante Frage, ob größere Kerne vielleicht auch Cluster im Dampf enthalten. Die Untersuchungen des angeregten Kalziums deuten darauf hin.

Ähnliche Untersuchungen, die sich mit der Koexistenz der flüssigen und gasförmigen Phase befassen, sind auch schon im Hartree–Fock–Modell von P. Bronche, S. Levit und D. Vautherin durchgeführt worden [25, 26, 27].

Die Graphik auf der linken Seite von Abb. 3.12 zeigt das Ergebnis einer Analyse angeregter Projektilfragmente [24]. Bei dieser Methode wird die Temperatur $T_{\text{He,Li}}$ über das Verhältnis der Häufigkeiten jeweils zweier Helium- und Lithiumisotope bestimmt. Wie diese Temperatur mit der durch Zeitmittelung bestimmten zusammenhängt, wird ebenfalls Inhalt künftiger Forschung sein. Die auf beide Weisen gefundenen Abhängigkeiten zwischen Anregungsenergie und Temperatur, die ein ausgeprägtes Plateau zeigen, legen jedoch nahe, daß das System einen Phasenübergang durchläuft.

4. Kurzreichweitige Korrelationen

Kurzreichweitige Korrelationen treten in Systemen auf, deren Wechselwirkung einen starken kurzreichweitigen Anteil besitzt. Das Interesse dieser Arbeit ist es, die durch die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung in Kernen induzierten kurzreichweitigen Korrelationen zu beschreiben. Die herausgearbeiteten Methoden lassen sich aber ebenso gut auf andere physikalische Systeme, wie zum Beispiel flüssiges atomares Helium [35] oder die abstoßenden Korrelationen zwischen den Hüllenelektronen in Atomen übertragen.

Dem Gedanken des Variationsansatzes (2.1) folgend wird der Versuchszustand so gestaltet, daß er die zur Beschreibung des Systems notwendigen Freiheitsgrade besitzt. Im Falle eines Nukleonensystems kommen zu den schon beschriebenen Eigenschaften des Pauliprinzips (Antisymmetrisierung des Vielteilchenzustandes), der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation (Einteilchenzustände statt klassischer Teilchen) und der Lokalisierung (Wellenpakete) jetzt noch kurzreichweitige Korrelationen, die sich in der Unterdrückung der Vielteilchenwellenfunktion für kleine Relativabstände äußern.

Die Auswirkungen dieser kurzreichweitigen Korrelationen zeigen sich vielgestaltig. Zum einen erlauben sie es, anstelle effektiver Nukleon–Nukleon–Wechselwirkungen realistische Wechselwirkungen zu verwenden und so die Sättigungseigenschaft der Wechselwirkung richtig wiederzugeben. Diese resultiert aus einem Zusammenspiel von Anziehung mit endlicher Reichweite und kurzreichweitiger starker Abstoßung, die verhindert, daß das System kollabiert. In Modellen, die Kerne durch unkorrelierte Versuchszustände, d.h. einzelne Slaterdeterminanten beschreiben, wird eine Sättigung der Bindungsenergie durch spezielle Austauschmischungen des effektiven Potentials oder dichteabhängige Terme erreicht. Auf diese Weise arbeiten sowohl das Hartree-Fock-Verfahren, die Antisymmetrisierte Molekulardynamik [10], in der die Gogny-Kraft Verwendung findet als auch die Fermionische Molekulardynamik, wie sie im Kapitel 2 und in Ref. [8] dargestellt wurde.

Zum anderen äußern sich kurzreichweitige Korrelationen durch Komponenten der Einteilchendichte bei hohen Impulsen. Diese Komponenten oberhalb der Fermikante können in Elektronenstreuexperimenten gemessen werden [38]. Nur ein korrelierter Versuchszustand ist in der Lage, die Einteilchendichten in Orts- und Impulsraum gleichzeitig realistisch wiederzugeben; mit Hilfe einer einzelnen Slaterdeterminante ist dies unmöglich [43, 44].

Weiterhin bewirken realistische Potentiale zusammen mit kurzreichweitigen Korrelationen des Versuchszustandes eine veränderte Reaktionsdynamik in Schwerionenkollisionen. Aufgrund der starken kurzreichweitigen Abstoßung erfahren die einzelnen Nukleonen hohe Impulsüberträge im Verlauf der Reaktion. Modelle wie QMD [13, 14, 15, 16, 17] oder AMD [10, 11, 12], die eine derartige Potentialstreuung nicht beschreiben können, versuchen dies durch einen Stoßterm zu simulieren, der wie eine fluktuierende Langevin-Kraft wirkt. Dieser Stoßterm kann jedoch nicht aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip abgeleitet werden. Durch seine von Zufallszahlen bestimmte Wirkungsweise können Korrelationen wie die α -Struktur von vier Nukleonen in einem Kern ungewollt zerstört werden. Ein korrelierter Zustand, dessen Bewegungsgleichung aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip abgeleitet wird, erhält die Strukturen, die sich aufgrund der Wechselwirkung ausbilden wollen.

Das mit einer einzelnen Slaterdeterminante (2.23) beschriebene System läßt sich vollständig durch die Einteilchendichte charakterisieren. Dieses System enthält schon wichtige Korrelationen, wie das Pauliprinzip, das eine A -Teilchenkorrelation darstellt. Hinzu kommen langreichweitige Korrelationen, die durch die Wechselwirkung hervorgerufen werden und sich in der intrinsischen Deformation der Kerne und der Bildung von Clustern ausdrücken.

Das mit einer korrelierten Slaterdeterminante beschriebene System enthält jetzt zusätzlich Zwei- und Mehrteilchenkorrelationen, die sich auf der Ebene der Einteilchendichte nicht mehr beschreiben lassen. Das heißt, der korrelierte Versuchszustand entspricht einer Überlagerung sehr vieler Slaterdeterminanten [42].

In der Konstruktion der Korrelatoren können zwei Vorgehensweisen unterschieden werden. Der erste und ältere Ansatz einer korrelierten Wellenfunktion $\langle \vec{X} | \Psi \rangle$ erfolgte durch Multiplikation der unkorrelierten Wellenfunktion $\langle \vec{X} | \Phi \rangle$ mit Jastrowschen Korrelationsfunktionen $f(|\vec{x}_k - \vec{x}_l|)$ [32]

$$\langle \vec{X} | \Psi \rangle = \prod_{k < l}^A f(|\vec{x}_k - \vec{x}_l|) \langle \vec{X} | \Phi \rangle . \quad (4.1)$$

Dabei enthalten die Funktionen f die gewünschte Korrelation, zum Beispiel unterdrücken sie die Wellenfunktion für kleine Relativabstände $|\vec{x}_k - \vec{x}_l|$. Mit Hilfe dieses Ansatzes lassen sich viele Grundzustandseigenschaften, wie die Bindungsenergie, die Einteilchendichte oder Paarverteilungen gut beschreiben (z.B. [35]).

Jedoch hat die Methode der Jastrowschen Korrelationsfunktionen einen prinzipiellen Nachteil, die Korrelation ist nicht unitär. Die korrelierte Wellenfunktion muß erst noch normiert werden, wobei die Norm auch von der unkorrelierten Wellenfunktion abhängt

$$\langle \tilde{A} \rangle = \frac{\langle \Psi | \tilde{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} . \quad (4.2)$$

Dadurch lassen sich die Korrelationen nur zusammen mit der Wellenfunktion ausdrücken. Selbst für eine zustandsunabhängige Wahl von $f(|\vec{x}_k - \vec{x}_l|)$ können die Korrelationen nicht auf die betrachteten Operatoren übergewälzt werden. Dieser Nachteil

wirkt sich für stationäre Probleme nicht unmittelbar aus, für die Behandlung einer Dynamik ist er aber merklich.

Der zweite und jüngere Ansatz geht davon aus, die Korrelationen auf unitäre Weise zu beschreiben [36, 37]. Der korrelierte Zustand $|\Psi\rangle$ ergibt sich durch Anwendung des unitären Korrelationsoperators \mathcal{C} auf den unkorrelierten Zustand $|\Phi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \mathcal{C}|\Phi\rangle, \quad \mathcal{C}^\dagger \mathcal{C} = \mathbb{1}. \quad (4.3)$$

Der unmittelbare Vorteil eines unitären Korrelators besteht darin, daß er nicht nur auf Zustände angewandt werden kann, sondern genauso gut auf Operatoren. Anstatt den Erwartungswert eines beliebigen Operators bezüglich des korrelierten Zustandes zu untersuchen, kann ebenso der Erwartungswert des korrelierten Operators bezüglich des unkorrelierten Zustandes untersucht werden

$$\langle \Psi | \mathcal{A} | \Psi \rangle = \langle \Phi | \mathcal{C}^\dagger \mathcal{A} \mathcal{C} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \mathcal{A}_{\text{eff}} | \Phi \rangle. \quad (4.4)$$

Obwohl der Ansatz eines unitären Korrelators schon einige Zeit bekannt war [36, 37], konnte er sich nicht durchsetzen, da eine explizite Form für \mathcal{C} nicht angebar schien. In diesem Kapitel wird eine Methode vorgestellt, solche Korrelatoren explizit zu konstruieren. Die grundlegende Idee besteht darin, den Korrelationsoperator als ortsabhängigen Translationsoperator aufzufassen, der den Relativabstand zweier Teilchen verschiebt. Diese Verschiebung läßt sich auch als nichtlineare Koordinatentransformation schreiben.

Da in der vorliegenden Arbeit nur Ein- und Zweiteilchenoperatoren betrachtet werden und insbesondere die verwendete Wechselwirkung ein Zweiteilchenoperator ist, werden Erwartungswerte von Operatoren in einer Zweiteilchennäherung berechnet.

Zu dieser Näherung korrespondiert eine korrelierte Zweiteilchendichte, die sich durch Anwendung des Korrelationsoperators auf die unkorrelierte Zweiteilchendichte ergibt. Die korrelierte Einteilchendichte erhält man dann durch Spurbildung aus der Zweiteilchendichte.

Die korrelierten Ein- und Zweiteilchendichten weisen die Eigenschaften auf, die für wechselwirkende Nukleonensysteme typisch sind. So zeigt die Zweiteilchendichte in Ortsdarstellung bei kleinen Relativabständen zusätzlich zum Austauschloch, das vom Pauliprinzip herrührt, ein Korrelationsloch, das zur kurzreichweitigen Abstoßung korrespondiert. Die Einteilchendichte spiegelt dies in der Impulsdarstellung wider. Durch die kurzreichweitigen Korrelationen werden Impulse oberhalb der Fermikante besetzt. Sowohl endliche Kerne als auch Kernmaterie zeigen die in Elektronenstreuexperimenten gemessenen hohen Impulsanteile.

Am Ende des Kapitels wird der Erwartungswert des Hamiltonoperators in der Zweiteilchennäherung berechnet und diskutiert. Es werden diejenigen Terme herausgearbeitet, die im korrelierten System zu einer dichte- und impulsabhängigen Abstoßung führen, die letztendlich die Sättigung der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung bewirkt. Die Bewegungsgleichungen der Parameter sind auch für den korrelierten Versuchszustand von der allgemeinen Form (2.5), jedoch charakterisieren die Parameter jetzt

einen neuen Zustand, der einen wesentlichen Teil der zu beschreibenden Physik, die kurzreichweitigen Korrelationen, a priori schon enthält.

Abschließend wird der Korrelator mit der Wechselwirkung in einen Zusammenhang gestellt. Die grundsätzliche Idee besteht darin, denjenigen Korrelator auszuwählen, der für den vorgegebenen Hamiltonoperator die Energie minimiert [35]. Allerdings gilt in der Zweiteilchennäherung nicht mehr allgemein, daß die durch Variation erhaltene Grundzustandsenergie stets größer gleich der wahren Grundzustandsenergie ist. Deshalb muß der Korrelator in seiner Wirkung auf kleine Abstände begrenzt werden.

Da der Korrelator die Unterdrückung der Zweiteilchendichte für kleine Relativabstände beschreibt und diese Unterdrückung ähnlich einer Randbedingung wirkt, kann er in guter Näherung als für alle Kerne gleich angesehen werden. Deshalb genügt es, den Korrelationsoperator an einem Kern (${}^4\text{He}$) festzulegen. Mit dem schließlich gefundenen Korrelator kann der Erwartungswert des Hamiltonoperators, wie er in die Bewegungsgleichungen eingeht, angegeben werden.

4.1 Der unitäre Korrelationsoperator

Der unitäre Korrelationsoperator, der in dieser Arbeit mit \mathcal{C} bezeichnet wird und für den

$$\mathcal{C}^\dagger \mathcal{C} = \mathbb{1} \quad (4.5)$$

gilt, transformiert einen unkorrelierten Versuchszustand $|\Phi(t)\rangle$ in einen korrelierten (realistischen) Zustand $|\Psi(t)\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = \mathcal{C} |\Phi(t)\rangle . \quad (4.6)$$

Der Korrelationsoperator beschreibt die Wirkung des kurzreichweitigen Anteils der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung auf den Versuchszustand, die darin besteht, daß der Versuchszustand für kleine Relativabstände unterdrückt wird. Die Unterdrückung wirkt ähnlich einer Randbedingung. Die abstoßenden Korrelationen sind auf ein kleines Korrelationsvolumen um ein Nukleon herum beschränkt, deshalb sollte die Form von \mathcal{C} auch nicht von der weiteren Umgebung, d.h. der Größe des Kerns, abhängen. Sind die Relativenergien der Nukleonen nicht zu groß geschieht die Unterdrückung durch den kurzreichweitig abstoßenden Teil der Wechselwirkung viel schneller als die Änderungen durch das mittlere Feld, so daß man annehmen kann, daß der Korrelator auch für Anregungsenergien von 10 – 20 MeV pro Teilchen (Fragmentationsreaktionen) seine Form kaum ändert. Die Dichte sollte allerdings nicht so groß werden, daß die Wahrscheinlichkeit, ein drittes Teilchen im Korrelationsvolumen zweier anderer zu finden, nicht mehr klein ist.

Für einen zustandsunabhängigen und damit auch zeitunabhängigen Korrelationsope-

rator kann die Schrödingergleichung folgendermaßen umgeschrieben werden

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= \underline{H} |\Psi(t)\rangle & (4.7) \\
i \frac{d}{dt} \underline{C} |\Phi(t)\rangle &= \underline{H} \underline{C} |\Phi(t)\rangle \\
i \frac{d}{dt} |\Phi(t)\rangle &= \underline{C}^\dagger \underline{H} \underline{C} |\Phi(t)\rangle .
\end{aligned}$$

Wie man erkennt, entspricht die Zeitentwicklung des korrelierten Zustandes $|\Psi(t)\rangle$, die vom vollen Hamiltonoperator generiert wird, der Zeitentwicklung des unkorrelierten Zustandes, der von einem effektiven Hamiltonoperator

$$\underline{H}_{\text{eff}} = \underline{C}^\dagger \underline{H} \underline{C} \quad (4.8)$$

propagiert wird.

Für einen zustandsunabhängigen Korrelator überträgt sich die Eigenschaft, daß sich die Zeitentwicklung der unkorrelierten Zustände durch einen effektiven Hamiltonoperator beschreiben läßt, auch auf die Näherung durch das zeitabhängige Variationsprinzip (2.1)

$$\begin{aligned}
0 &= \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \langle Q(t) | \underline{C}^\dagger \left(i \frac{d}{dt} - \underline{H} \right) \underline{C} | Q(t) \rangle & (4.9) \\
&= \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\langle Q(t) | i \frac{d}{dt} | Q(t) \rangle - \langle Q(t) | \underline{H}_{\text{eff}} | Q(t) \rangle \right) ,
\end{aligned}$$

so daß die Bewegungsgleichungen der Parameter wie folgt lauten

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu}(Q) \dot{q}_{\nu} = - \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \langle Q(t) | \underline{H}_{\text{eff}} | Q(t) \rangle . \quad (2.5''''')$$

Betrachtet man Kerne mit der Neutronenzahl N , der Protonenzahl Z , der Hauptquantenzahl n und dem Schwerpunktsimpuls \vec{K} als die stationären Eigenzustände $|\Psi(N, Z, n, \vec{K})\rangle$, so ist der Anteil von \underline{H} , der einzelne Kerne beschreibt, in Spektraldarstellung gegeben als

$$\underline{H} = \sum_{N, Z, n, \vec{K}} |\Psi(N, Z, n, \vec{K})\rangle E(N, Z, n, \vec{K}) \langle \Psi(N, Z, n, \vec{K}) | , \quad (4.10)$$

wobei $E(N, Z, n, \vec{K})$ die Eigenenergien sind. Aufgrund der Unitarität des Korrelationsoperators hat $\underline{H}_{\text{eff}}$ dieselben Eigenwerte bei den entsprechenden unkorrelierten Eigenzuständen

$$\underline{H}_{\text{eff}} = \sum_{N, Z, n, \vec{K}} |\Phi(N, Z, n, \vec{K})\rangle E(N, Z, n, \vec{K}) \langle \Phi(N, Z, n, \vec{K}) | \quad (4.11)$$

$$\text{mit } |\Psi(N, Z, n, \vec{K})\rangle = \underline{C} |\Phi(N, Z, n, \vec{K})\rangle . \quad (4.12)$$

Aus der Eigenschaft (4.12) ergibt sich eine formale Möglichkeit der Konstruktion von \mathcal{C} . Hierbei wird der effektive Hamiltonoperator $\widetilde{H}_{\text{eff}}$ vorgegeben und der Korrelationsoperator aus den Eigenzuständen $|\Psi(N, Z, n, \vec{K})\rangle$ des vollen Hamiltonoperators und den Eigenzuständen $|\Phi(N, Z, n, \vec{K})\rangle$ des effektiven Hamiltonoperators gebildet

$$\mathcal{C} = \sum_{N, Z, n, \vec{K}} |\Psi(N, Z, n, \vec{K})\rangle \langle \Phi(N, Z, n, \vec{K})| . \quad (4.13)$$

Dieses formale Verfahren, das in Ref. [36] an einem einfachen Beispiel demonstriert wird, ist aber für die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung nicht praktikabel, da alle Eigenzustände im betrachteten Anregungsbereich für beliebige Teilchensysteme aus N Neutronen und Z Protonen bekannt sein müßten.

Eine andere Möglichkeit besteht in der Konstruktion eines unitären Korrelationsoperators, der näherungsweise die kurzreichweitigen Korrelationen im Vielteilchenzustand erzeugt. Aus diesem Korrelator und dem vollen Hamiltonoperator wird dann der effektive Hamiltonoperator abgeleitet.

Zu diesem Zweck wird der Korrelationsoperator mit Hilfe eines hermiteschen Operators \mathcal{S} definiert.

$$\mathcal{C} = \exp \{-i\mathcal{S}\} , \quad \mathcal{S}^\dagger = \mathcal{S} \quad (4.14)$$

Der Operator \mathcal{S} wird im folgenden als ein Zweiteilchenoperator gewählt, da mit ihm nur kurzreichweitige paarweise Korrelationen beschrieben werden sollen. Die Reichweite dieser Korrelationen soll dabei so klein sein, daß Dreiteilchenkorrelationen im Vergleich zu Zweiteilchenkorrelationen wesentlich unwahrscheinlicher sind. Ein Maß für diese Wahrscheinlichkeit, ein drittes Teilchen im Korrelationsvolumen V_c zu finden, ist in etwa durch die Zahl ρV_c gegeben ($\rho V_c \ll 1$). Mit realistischen Werten für die Dichte von 0.16fm^{-3} und das Korrelationsvolumen von 1fm^3 folgt $\rho \cdot V_c \approx 0.15$. Man kann also erwarten, daß Dreiteilchenkorrelationen im Vergleich zu Zweiteilchenkorrelationen unterdrückt sind.

Geht man vereinfachend davon aus, daß der Operator \mathcal{S} nicht auf Spin- und Isospinfreiheitsgrade wirkt, so kann \mathcal{S} in der Weyl–Darstellung wie folgt geschrieben werden

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \int d^3x_1 d^3x_2 d^3k_1 d^3k_2 O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2) \\ &\times \frac{1}{(2\pi)^6} \int d^3u_1 d^3u_2 e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{u}_1} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{u}_2} \widetilde{\Psi}^\dagger(\vec{x}_1 + \frac{\vec{u}_1}{2}) \widetilde{\Psi}^\dagger(\vec{x}_2 + \frac{\vec{u}_2}{2}) \widetilde{\Psi}(\vec{x}_2 - \frac{\vec{u}_2}{2}) \widetilde{\Psi}(\vec{x}_1 - \frac{\vec{u}_1}{2}) . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Damit ist der Operator \mathcal{S} vollständig durch die Funktion $O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2)$ bestimmt. Diese Funktion muß jetzt durch physikalische Argumente spezifiziert werden.

Der kurzreichweitige Anteil der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung kann im einfachsten Fall durch ein lokales abstoßendes Potential beschrieben werden. Dieses Potential wird die Wellenfunktion des Vielteilchensystems für kleine Relativabstände der

Wellenpakete unterdrücken. Die Unterdrückung kann mit Hilfe eines ortsabhängigen Translationsoperators ausgedrückt werden, wobei der Operator des Relativimpulses die Verschiebung generiert. Die Definition des Korrelationsoperators über die Weyl-Darstellung hat neben der Anschaulichkeit der klassisch interpretierbaren Funktion $O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2)$ auch den Vorteil, daß der Operator \mathcal{L} hermitesch und damit \mathcal{C} unitär ist.

Da der Operator \mathcal{L} translations-, rotations- und Galileiinvariant sein soll, kann die Funktion $O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2)$ nur noch eine Funktion der Relativkoordinaten \vec{x}_{12} und \vec{k}_{12} in dreihinvarianter Kombination sein. Die Funktion $O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2)$ wird deshalb als

$$O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2) = O(\vec{x}_{12}; \vec{k}_{12}) = s(x_{12}) \frac{\vec{x}_{12}}{x_{12}} \cdot \vec{k}_{12} \quad (4.16)$$

angesetzt. Entsprechend der Definition von Schwerpunkts- und Relativkoordinaten in den Gleichungen (C.1) bezeichnet $\vec{x}_{12} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ den Relativabstand und $x_{12} = |\vec{x}_{12}|$ den Betrag dieses Vektors; $\vec{k}_{12} = \frac{1}{2} (\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$ bezeichnet den Relativimpuls. Die Verschiebungsfunktion $s(x_{12})$ beschreibt, wie weit als Funktion von x_{12} verschoben werden soll.

Betrachtet man einen antisymmetrischen Zweiteilchenzustand $|\phi_1 \phi_2\rangle$, so ergibt sich die Wirkung des Korrelators auf diesen Zustand als

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \mathcal{C} | \phi_1 \phi_2 \rangle &= \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \exp \{-i\mathcal{L}\} | \phi_1 \phi_2 \rangle \\ &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial s(x_{12})}{\partial x_{12}} - \frac{s(x_{12})}{x_{12}} - s(x_{12}) \frac{\partial}{\partial x_{12}} \right\} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \phi_1 \phi_2 \rangle . \end{aligned} \quad (4.17)$$

4.1.1 Die Wirkung des unitären Korrelationsoperators

Um die Wirkung des unitären Korrelationsoperators genauer studieren zu können, bezeichne $\langle \vec{x} | \phi \rangle$ in diesem Abschnitt die Relativwellenfunktion eines Zweiteilchenzustandes und \vec{x} die zugehörige Relativkoordinate.

Wie schon in Gleichung (4.17) angedeutet wurde, bewirkt der unitäre Korrelationsoperator, wie er mittels (4.16) definiert wurde, eine radiale ortsabhängige Verschiebung in der Relativkoordinate, die in der folgenden Form dargestellt werden kann

$$\langle \vec{x} | \mathcal{C} | \phi \rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - \frac{s(x)}{x} - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} \phi(\vec{x}) , \quad (4.18)$$

wobei die aufgeführten Abkürzungen verwendet werden

$$\phi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \phi \rangle , \quad s'(x) = \frac{\partial s(x)}{\partial x} , \quad s(x) \in \mathbb{R} , \quad x = |\vec{x}| . \quad (4.19)$$

Zu dieser Darstellung gibt es nützliche äquivalente Darstellungen

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x} | \mathcal{C} | \phi \rangle &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - \frac{s(x)}{x} - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} \phi(\vec{x}) \\
&= \frac{1}{x} \exp \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \phi(\vec{x}) \\
&= \frac{1}{x \sqrt{s(x)}} \exp \left\{ -s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \sqrt{s(x)} \phi(\vec{x}) ,
\end{aligned} \tag{4.20}$$

die sich durch Ausnutzung der Folgendefinition der Exponentialfunktion ineinander umwandeln lassen. Im Anhang wird dies an einem Beispiel (C.2) demonstriert.

Die Darstellung des hermitesch adjungierten Operators \mathcal{C}^\dagger erhält man aus

$$\begin{aligned}
\langle \lambda | \mathcal{C} | \psi \rangle &= \int d^3 x \lambda^*(\vec{x}) \frac{1}{x} \exp \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \psi(\vec{x}) \\
&= \int d^3 x \left[\psi^*(\vec{x}) \frac{1}{x} \exp \left\{ \frac{1}{2} s'(x) + s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \lambda(\vec{x}) \right]^* \\
&= \langle \psi | \mathcal{C}^\dagger | \lambda \rangle^*
\end{aligned} \tag{4.21}$$

als

$$\langle \vec{x} | \mathcal{C}^\dagger | \phi \rangle = \frac{1}{x} \exp \left\{ \frac{1}{2} s'(x) + s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \phi(\vec{x}) . \tag{4.22}$$

Somit kann man sagen, daß sich der hermitesch adjungierte Korrelationsoperator ergibt, wenn die Funktion $s(x)$ in ihr Negatives umgewandelt wird

$$\mathcal{C} \Rightarrow \mathcal{C}^\dagger \quad \equiv \quad s(x) \Rightarrow -s(x) . \tag{4.23}$$

4.1.2 Korrelatoren als Koordinatentransformationen

Der unitäre Korrelationsoperator \mathcal{C} verschiebt in Abhängigkeit von einer vorgegebenen Funktion $s(x)$ radial. Diese ortsabhängige Verschiebung kann analytisch vereinfacht behandelt werden, wenn man die betrachteten ortsabhängigen Funktionen einer im allgemeinen nichtlinearen Korrdinatentransformation unterzieht.

Die Idee der Transformation besteht darin, eine Koordinate $y = Y(x)$ zu konstruieren, in der der Korrelator nicht der Funktion $s(x)$ entsprechend, sondern um eine Konstante -1 verschiebt. Für die Koordinatentransformation $x \mapsto y$ soll gelten

$$s(x) \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} . \tag{4.24}$$

Damit ergeben sich die Koordinatentransformation $y = Y(x)$ und ihre Rücktransformation $x = R(y)$ zu

$$Y(x) = \int^x \frac{dt}{s(t)} , \quad y = \int^{R(y)} \frac{dt}{s(t)} . \tag{4.25}$$

Dabei kann die feste untere Grenze der Integrale im Rahmen der Existenz des Integrals frei gewählt werden.

Eine beliebige korrelierte Wellenfunktion $\langle \vec{x} | \mathcal{C} | \phi \rangle$, die von der Relativkoordinate \vec{x} abhängt, läßt sich nun durch die neue Koordinate $R(Y(x) - 1)$ ausdrücken.

$$\begin{aligned}
& \langle \vec{x} | \mathcal{C} | \phi \rangle & (4.26) \\
&= \frac{1}{x\sqrt{s(x)}} \exp \left\{ -s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x\sqrt{s(x)} \phi(\vec{x}) \\
&= \frac{1}{R(y)\sqrt{s(R(y))}} \exp \left\{ -\frac{\partial}{\partial y} \right\} R(y)\sqrt{s(R(y))} \phi \left(\frac{\vec{x}}{x} R(y) \right) \\
&= \frac{1}{R(y)\sqrt{s(R(y))}} R(y-1)\sqrt{s(R(y-1))} \phi \left(\frac{\vec{x}}{x} R(y-1) \right) \Theta(R(y-1)) \\
&= \Theta(R(Y(x)-1)) \frac{R(Y(x)-1)}{x} \left[\frac{s(R(Y(x)-1))}{s(x)} \right]^{\frac{1}{2}} \phi \left(\frac{\vec{x}}{x} R(Y(x)-1) \right)
\end{aligned}$$

Die Thetafunktion dient hierbei dazu, den unphysikalischen Bereich $|\vec{x}| < 0$ abzuschneiden. Man stelle sich dazu den Vektor \vec{x} in Kugelkoordinaten (x, θ, ϕ) vor. Da der Korrelationsoperator eine Translation in radialer Richtung bewirkt, muß für eine allgemeine Funktion $s(x)$ dafür Sorge getragen werden, daß keine Beiträge aus dem Bereich negativer $|\vec{x}|$ in den erlaubten Definitionsbereich geschoben werden. Genau dies wird durch die Thetafunktion sichergestellt.

Auch Matrixelemente des Potentials können in den neuen Koordinaten dargestellt werden. Dazu wird zuerst die Ortsdarstellung eines korrelierten lokalen Potentials betrachtet.

$$\begin{aligned}
& \langle \vec{x} | \mathcal{C}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{C} | \phi \rangle & (4.27) \\
&= \frac{1}{x\sqrt{s(x)}} \exp \left\{ s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x\sqrt{s(x)} V(x) \frac{1}{x\sqrt{s(x)}} \exp \left\{ -s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x\sqrt{s(x)} \phi(\vec{x}) \\
&= \frac{1}{R(y)\sqrt{s(R(y))}} \exp \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \right\} V(R(y)) R(y-1)\sqrt{s(R(y-1))} \\
&\quad \times \phi \left(\frac{\vec{x}}{x} R(y-1) \right) \Theta(R(y-1)) \\
&= \frac{1}{R(y)\sqrt{s(R(y))}} V(R(y+1)) R(y)\sqrt{s(R(y))}; \phi \left(\frac{\vec{x}}{x} R(y) \right) \Theta(R(y)) \\
&= V(R(Y(x)+1)) \phi(\vec{x}), \quad \text{da } x = R(y) \geq 0
\end{aligned}$$

Ein beliebiges Matrixelement des korrelierten Potentials lautet also einfach

$$\langle \lambda | \mathcal{C}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{C} | \phi \rangle = \int d^3x \lambda^*(\vec{x}) V(R(Y(x)+1)) \phi(\vec{x}). \quad (4.28)$$

An dieser Stelle kann man schon eine wichtige Eigenschaft des unitären Korrelationsoperators erkennen. Um den Erwartungswert des Potentials zu berechnen, ist es nicht nötig, die korrelierten Zustände zu kennen. Der Erwartungswert ergibt sich einfach mit den unkorrelierten Zuständen, dafür muß das Potential lediglich an der verschobenen Stelle $R(Y(x) + 1)$ betrachtet werden.

Es sind also zur Berechnung korrelierter Wellenfunktionen oder korrelierter Potentiale allein die beiden Funktionen $R(Y(x) - 1)$ und $R(Y(x) + 1)$ nötig. Diese sollen mit $R_-(x)$ und $R_+(x)$ abgekürzt werden und folgen mit (4.25) aus

$$\int_x^{R_-(x)} \frac{dt}{s(t)} = -1, \quad \int_x^{R_+(x)} \frac{dt}{s(t)} = +1. \quad (4.29)$$

Die Koordinatentransformationen $R_-(x)$ und $R_+(x)$ weisen folgende mathematische Eigenschaften auf:

1. Da es sich bei den Transformationen R_+ und R_- um Hin- und Rücktransformation handelt, sind sie zueinander invers:

$$R_+(R_-(x)) = x \quad (4.30)$$

2. Differenziert man diese Identität, so sieht man, daß sich die Ableitungen nach dem jeweiligen Argument zueinander reziprok verhalten:

$$R'_+(r) = \frac{1}{R'_-(x)} \quad \text{wobei} \quad (4.31)$$

$$R'_+(r) \equiv \frac{d}{dr} R_+(r), \quad R'_-(x) \equiv \frac{d}{dx} R_-(x), \quad x = R_+(r) \text{ und } r = R_-(x)$$

In den folgenden Ausführungen sollen die Argumente der Transformationen $R_-(\cdot)$ mit x und die von $R_+(\cdot)$ mit r bezeichnet werden, da sie zu unterschiedlichen Koordinatensystemen gehören.

3. Der Zusammenhang von $s(r)$ mit der Funktion $R_+(r)$ läßt sich u.a. durch folgende Gleichung ausdrücken:

$$R'_+(r) = \frac{s(R_+(r))}{s(r)} \quad (4.32)$$

4. Bei der Berechnung von Erwartungswerten erweisen sich Transformationen zwischen r und x unter dem Integral als sehr hilfreich. Dabei gilt:

$$\frac{\vec{x}}{x} = \frac{\vec{r}}{r}, \quad (4.33)$$

$$d^3x = d^3r \left(\frac{R_+(r)}{r} \right)^2 R'_+(r),$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{R'_+(r)} \frac{\partial}{\partial r},$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \otimes \vec{r} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = \frac{r}{R_+(r)} \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{1}{R'_+(r)} - \frac{r}{R_+(r)} \right) \frac{\vec{r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (4.34)$$

5. Möchte man den Korrelator nicht durch die Funktion $s(x)$, sondern direkt durch die Transformation $R_+(r)$ definieren, was von Vorteil ist, da die Integrale (4.29) im allgemeinen nicht in geschlossener Form angebar sind, so müssen an die Transformation $R_+(r)$ weitere Forderungen gestellt werden.

Damit die Umkehrfunktion eindeutig ist, muß $R_+(r)$ streng monoton sein.

$$\frac{d}{dr} R_+(r) > 0; \quad \forall r > 0 \quad (4.35)$$

6. Für große Abstände geht eine physikalisch sinnvolle Transformation $R_+(r)$ in r über, d.h., sie besitzt eine endliche Abklinglänge

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_+(r) = r. \quad (4.36)$$

Die Spezifizierung des unitären Korrelationsoperators durch die Koordinatentransformation $R_+(r)$ hat den Vorteil, daß die Wirkung des Korrelators unmittelbar gegeben ist. Ein durch die Transformation $R_+(r)$ gegebener Korrelator läßt insbesondere sofort erkennen, auf welche Weise das Potential transformiert wird.

$$\langle \phi | \mathcal{Q}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{Q} | \phi \rangle = \int d^3r \phi^*(\vec{r}) V(R_+(r)) \phi(\vec{r}) \quad (4.37)$$

Aber auch die korrelierte Wellenfunktion

$$\langle \vec{x} | \mathcal{Q} | \phi \rangle = \Theta(R_-(x)) \frac{R_-(x) \sqrt{R'_-(x)}}{x} \phi \left(\frac{\vec{x}}{x} R_-(x) \right) \quad (4.38)$$

kann mit (4.30) – (4.35) unmittelbar durch $R_+(r)$ ausgedrückt werden als

$$\langle \vec{x} | \mathcal{Q} | \phi \rangle = \Theta(r) \frac{r}{R_+(r) \sqrt{R'_+(r)}} \phi(\vec{r}).$$

Die kinetische Energie der Relativbewegung lautet für radialsymmetrische Wellenfunktionen $\langle \vec{x} | \phi \rangle = \phi(x)$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \mathcal{Q}^\dagger \mathcal{T} \mathcal{Q} | \phi \rangle &= \frac{1}{2\mu} \int 4\pi r^2 dr \left\{ \frac{1}{(R'_+(r))^2} \left| \frac{\partial}{\partial r} \phi(r) \right|^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(R'_+(r))^2} \left[\frac{1}{2} \frac{R_+'''(r)}{R'_+(r)} - \frac{5}{4} \left(\frac{R_+''(r)}{R'_+(r)} \right)^2 + 2 \frac{R_+''(r)}{r R'_+(r)} \right] |\phi(r)|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Dabei bezeichnen $R_+''(r)$ und $R_+'''(r)$ die zweite und dritte Ableitung der Transformation $R_+(r)$ nach dem Argument.

Für allgemeine Relativwellenfunktionen ergibt sich die kinetische Energie zu

$$\begin{aligned}
& \langle \phi | \mathcal{Q}^\dagger \mathcal{T} \mathcal{Q} | \phi \rangle \\
&= \frac{1}{2\mu} \int d^3r \left| \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \otimes \vec{r} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r}) \right|^2 \\
&+ \frac{1}{2\mu} \int d^3r |\phi(\vec{r})|^2 \frac{1}{(R'_+(r))^2} \left[\frac{1}{2} \frac{R_+'''(r)}{R'_+(r)} - \frac{5}{4} \left(\frac{R_+''(r)}{R'_+(r)} \right)^2 + 2 \frac{R_+''(r)}{r R'_+(r)} \right].
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Aus den Gleichungen (4.39) und (4.40) kann man entnehmen, daß der Erwartungswert der kinetischen Energie bezüglich der korrelierten Zustände in zwei Teile zerfällt. Der erste Teil entspricht einer kinetischen Energie mit einem abstandsabhängigen Tensor für die reduzierte Masse zweier Teilchen. Die Tensorstruktur ist durch $\left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \otimes \vec{r}\right)$ hervorgerufen und bedeutet, daß die radiale kinetische Relativenergie eine andere Masse besitzt als die relative Zentrifugalenergie. Der zweite Term entspricht dem Erwartungswert eines lokalen Zweiteilchenpotentials. In Abschnitt 4.3 wird darauf noch näher eingegangen.

Im folgenden soll die Wirkungsweise des unitären Korrelationsoperators an grundlegenden Beispielen verdeutlicht werden.

4.1.3 Beispiele für Korrelatoren

Da der unitäre Korrelator als eine ortsabhängige Verschiebung im Radialteil der Relativkoordinate wirkt, liegt es nahe, zuerst eine nicht vom Ort abhängige, also konstante Verschiebung $s(x) = \alpha$ zu betrachten. Dieser Korrelator, er soll schematischer Korrelator heißen, hat entsprechend dem allgemeinen Ansatz (4.18) die folgende Form

$$\langle \vec{x} | \mathcal{Q} | \phi \rangle = \frac{1}{x} \exp \left\{ -\alpha \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \langle \vec{x} | \phi \rangle. \tag{4.41}$$

Um dieses und die folgenden Beispiele einfach und instruktiv zu halten, sei der Zustand $|\phi\rangle$ radialsymmetrisch, d.h., er hängt nur vom Betrag $x = |\vec{x}|$ der Relativkoordinate ab, $\langle \vec{x} | \phi \rangle = \phi(x)$.

Als Transformation ergibt sich einfach eine Verschiebung des Arguments um α , für $R_+(r)$ um $+\alpha$, für $R_-(x)$ um $-\alpha$

$$R_+(r) = r + \alpha, \quad R_-(x) = x - \alpha. \tag{4.42}$$

Die Abbildung 4.1 zeigt im linken Teil die Funktionen $R_+(x)$ als fette durchgezogene Linie, $s(x)$ als dünne durchgezogene Linie und als unterbrochene Linie die Funktion $f(x) = x$ zur Referenz.

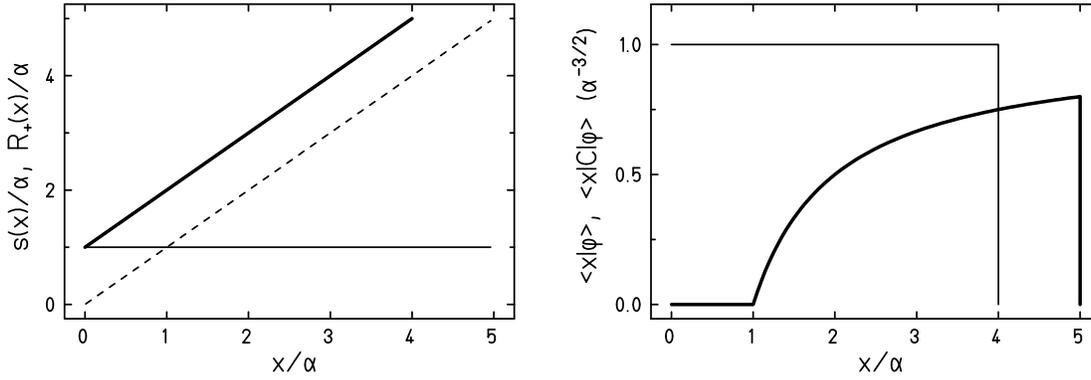


Abbildung 4.1: Beispiel 1: Wirkung des schematischen Korrelationsoperators (4.41) auf die homogene kugelsymmetrische Wellenfunktion $\langle \vec{x} | \phi \rangle = \Theta(x - 4\alpha)$, $R_+(r) = r + \alpha$, $s(x) = \alpha$.

Auf der rechten Seite von Abb. 4.1 ist dargestellt, wie der schematische Korrelator auf eine homogene kugelsymmetrische Wellenfunktion $\Theta(x - 4\alpha)$ wirkt. Man erkennt, daß er zum einen die gesamte Wellenfunktion um die Konstante α radial nach außen verschiebt, zum anderen aber auch deformiert

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{x} | \mathcal{C} | \phi \rangle &= \frac{1}{x} \exp \left\{ -\alpha \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \langle x | \phi \rangle & (4.43) \\
 &= \Theta(R_-(x)) \frac{R_-(x) \sqrt{R'_-(x)}}{x} \phi(R_-(x)) \\
 &= \Theta(x - \alpha) \frac{x - \alpha}{x} \phi(x - \alpha) .
 \end{aligned}$$

Der Term $(x - \alpha)/x$ bewirkt eine Deformation der Wellenfunktion gerade so, daß die Wirkungsweise des Korrelators unitär ist. Damit bleibt die Norm erhalten:

$$\begin{aligned}
 \int d^3x \langle \phi | \mathcal{C}^\dagger | x \rangle \langle x | \mathcal{C} | \phi \rangle &= \int 4\pi x^2 dx \Theta(x - \alpha) \left(\frac{x - \alpha}{x} \right)^2 |\phi(x - \alpha)|^2 \\
 &= \int 4\pi (x - \alpha)^2 dx \Theta(x - \alpha) |\phi(x - \alpha)|^2 & (4.44) \\
 &= \int 4\pi r^2 dr \Theta(r) |\phi(r)|^2 \quad \text{q.e.d.}
 \end{aligned}$$

Der schematische Korrelator ist natürlich besonders einfach. Da die durch ihn bewirkte Verschiebung in der Radialkoordinate nicht von dieser abhängt, hat er eine unendliche Abklinglänge. Dies entspricht nicht der Zielsetzung, mit dem Korrelator kurzreichweitige Korrelationen in Kernen zu beschreiben, aber dieser Korrelator beschreibt zum Beispiel die an einer harten Kugel mit dem Radius α gestreute S-Welle korrekt. Diese Streuwelle ist gerade durch eine konstante Verschiebung des Argumentes gekennzeichnet

$$\psi_{l=0}(x) = \Theta(x - \alpha) \frac{x - \alpha}{x} \phi_{l=0}(x - \alpha) = \Theta(x - \alpha) \frac{1}{x} \sin(kx - k\alpha) . \quad (4.45)$$

$\phi_{l=0}(x)$ bezeichnet hier die ungestörte Lösung

$$\phi_{l=0}(x) = \frac{\sin(kx)}{x} . \quad (4.46)$$

Um eine Vorstellung von der prinzipiellen Gestalt eines Korrelators zu bekommen, ist es hilfreich, den Zusammenhang (4.29) zwischen der Verschiebungsfunktion $s(x)$ und der Transformation $R_+(r)$ zu untersuchen

$$\int_r^{R_+(r)} \frac{dt}{s(t)} = +1 . \quad (4.29')$$

Nimmt man an, daß die Funktion $s(t)$ zwischen r und $R_+(r)$ nur schwach variiert, d.h. $s'(r) \ll 1$, so kann man das Integral durch $(R_+(r) - r)$ und $s(r)$ approximieren und erhält

$$\frac{R_+(r) - r}{s(r)} \approx 1 , \text{ oder } R_+(r) \approx r + s(r) . \quad (4.47)$$

Dies zeigt, daß $s(r)$ näherungsweise die Länge ist, um die zwei Teilchen, im Abstand r , auseinandergeschoben werden. Für den schematischen Korrelator ist diese Beziehung schon korrekt, da $s'(r) = 0$. Für ortsabhängige Korrelatoren gibt die gefundene Relation einen Hinweis, wie der Korrelator zu wählen ist, damit er bestimmte Anforderungen erfüllt. Ein kurzreichweitiger Korrelator ist durch eine Verschiebungsfunktion $s(r)$ gekennzeichnet, die nur für kleine r von Null verschieden ist. Dann gibt der lineare Term in Gleichung (4.47) schon das asymptotische Verhalten für große Abstände wieder.

Die folgenden drei Korrelatoren besitzen eine endliche Abklinglänge und sind deshalb realistischer als der schematische Korrelator, um kurzreichweitige Korrelationen zu beschreiben. Sie unterscheiden sich im wesentlichen durch ihr Verhalten für kleine Abstände.

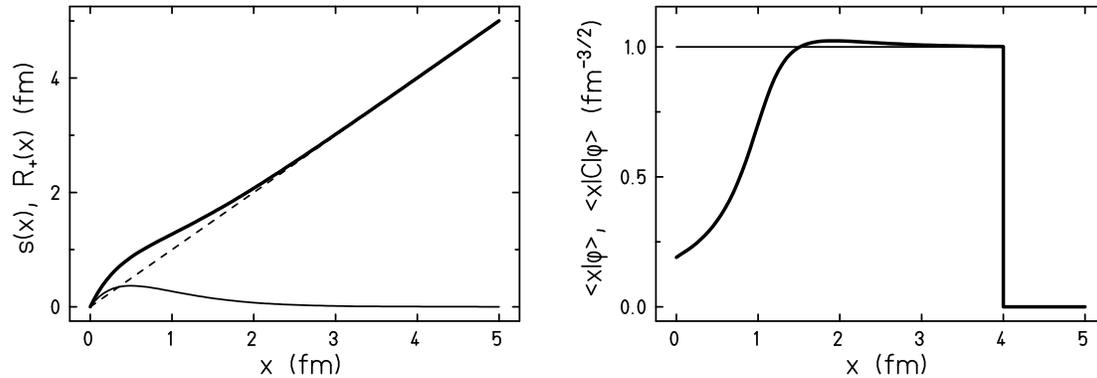


Abbildung 4.2: Beispiel 2: Wirkung der Kooodinatentransformation (4.48) auf die homogene kugelsymmetrische Wellenfunktion $\langle \vec{x} | \phi \rangle = \Theta(x - 4\text{fm})$, $R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta}\right) \exp\left\{-\frac{r}{\beta}\right\}$, $\alpha = 1.0\text{fm}$, $\beta = 0.5\text{fm}$.

Der erste dieser Korrelatoren drückt die Relativwellenfunktion für kleine Abstände auf einen endlichen Wert und nicht auf Null. Dies kann durch den folgenden Ansatz für $R_+(r)$ erreicht werden

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right) \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\}, \quad (4.48)$$

der die Eigenschaft besitzt, daß die Ableitung bei $r = 0$ endlich ist (siehe (4.38)).

Die zugehörigen Funktionen $s(x)$ und $R_-(x)$ können für diese Transformation nicht mehr in geschlossener Form bestimmt werden, sie sind, da sich alle Erwartungswerte mit $R_+(r)$ allein ausdrücken lassen, auch nicht nötig. Abbildung 4.2 zeigt auf der linken Seite die Transformation $R_+(r)$ (dicke Linie) und die durch numerische Integration bestimmte Funktion $s(x)$ (dünne Linie). Rechts sind wieder die homogene kugelsymmetrische Wellenfunktion $\Theta(x - 4\text{fm})$ und die durch Korrelation aus ihr hervorgegangene Wellenfunktion dargestellt.

Wie auch schon der Transformation (4.48) anzusehen war, besitzt dieser Korrelator eine endliche Abklinglänge, die mit dem Parameter β zusammenhängt. Über den Parameter α kann der Grad der Unterdrückung bei Null gewählt werden. α gibt bei diesem Korrelator außerdem in etwa die Größe des Korrelationsloches bei halbem Maximalwert wieder.

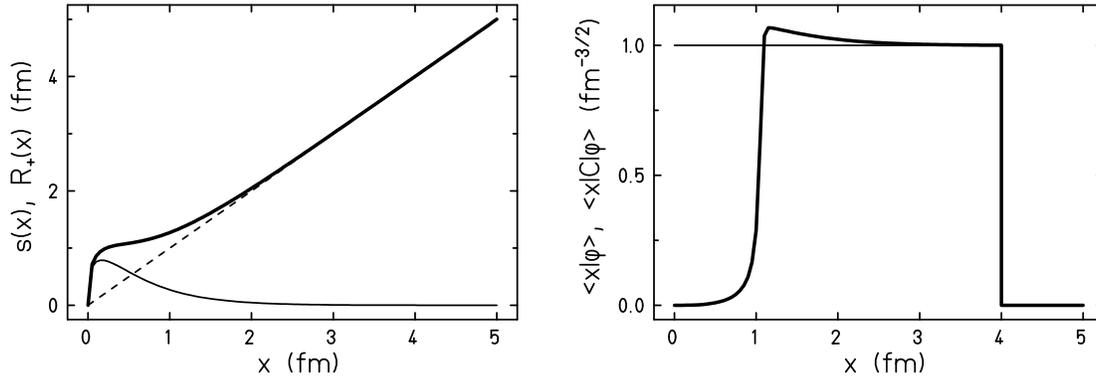


Abbildung 4.3: Beispiel 3: Wirkung der Koordinatentransformation (4.48) auf die homogene kugelsymmetrische Wellenfunktion $\langle \vec{x} | \phi \rangle = \Theta(x - 4\text{fm})$,

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right)^{1/n} \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\}, \quad n = 3, \alpha = 1.58\text{fm}, \beta = 0.5\text{fm}.$$

Der folgende Korrelator, der durch die Transformation

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right)^{1/n} \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\}, \quad n > 1 \quad (4.49)$$

definiert ist, zeichnet sich durch einen unendlichen Anstieg der Transformation bei Null aus. Dadurch wird die Wellenfunktion bei Null vollständig unterdrückt. Dieses Verhalten ist in Abb. 4.3 dargestellt.

Läßt man den Parameter n der Transformation $R_+(r)$ sehr groß werden, so erhält man im Grenzfall einen Korrelator, der wie der schematische Korrelator ein endliches Loch in der Wellenfunktion schafft. Dieser Korrelator läßt sich durch eine Transformation der folgenden Art darstellen

$$R_+(r) = r + \alpha \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\} ; \quad \alpha \leq \beta . \quad (4.50)$$

Der Parameter α hat auch hier die Bedeutung der Größe des Korrelationsloches. β gibt wiederum an, wie schnell die Korrelation nach außen abfällt. In Abbildung 4.4 ist die Wirkung dieses letzten Beispielkorrelators demonstriert.

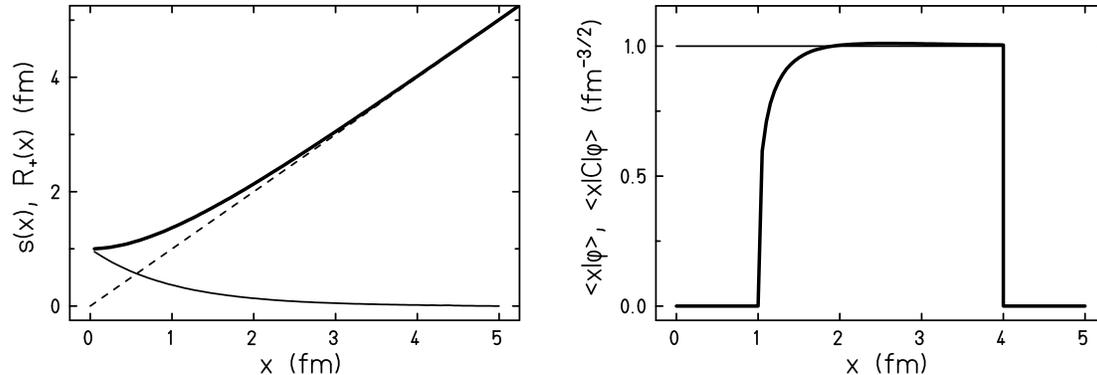


Abbildung 4.4: Beispiel 4: Wirkung der Koordinatestransformation (4.50) auf die homogene kugelsymmetrische Wellenfunktion $\langle \vec{x} | \phi \rangle = \Theta(x - 4\text{fm})$, $R_+(r) = r + \alpha \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\}$, $\alpha = 1.0\text{fm}$, $\beta = 0.5\text{fm}$

Die dargestellten Beispiele unterscheiden sich insbesondere durch ihr Verhalten für kleine Abstände. Aus physikalischer Sicht heißt dies, daß sie zu unterschiedlichen Wechselwirkungen gehören. So erwartet man, daß der zuletzt vorgestellte Korrelator (4.50) die Unterdrückung der Wellenfunktion durch ein unendliches abstoßendes Potential endlicher Reichweite am besten beschreibt, während die beiden anderen Korrelatoren (4.48 und 4.49) eher zu Potentials gehören, die die Wellenfunktion in der Umgebung des Ursprungs nicht ganz unterdrücken.

Wie der Zusammenhang zwischen einer Wechselwirkung und dem Korrelator hergestellt werden kann, wird im Abschnitt 4.3 erläutert.

4.2 Clusterentwicklung und Zweiteilchennäherung

Nachdem im letzten Abschnitt grundlegende Korrelatoren und ihre Wirkungsweise vorgestellt wurden, soll an dieser Stelle diskutiert werden, wie sich Erwartungswerte von Ein- und Zweiteilchenoperatoren in Näherungen berechnen lassen.

Zu diesem Zweck wird ein beliebiger Operator \mathcal{Q} betrachtet. Sein Erwartungswert bezüglich des korrelierten Versuchszustandes $|\Psi\rangle$ entspricht dem Erwartungswert des effektiven Operators $\mathcal{Q}_{\text{eff}} = \mathcal{C}^\dagger \mathcal{Q} \mathcal{C}$ bezüglich des unkorrelierten Versuchszustandes $|\Phi\rangle$

$$\langle \Psi | \mathcal{Q} | \Psi \rangle = \langle \Phi | \mathcal{C}^\dagger \mathcal{Q} \mathcal{C} | \Phi \rangle . \quad (4.51)$$

Da der unitäre Korrelationsoperator \mathcal{C} durch Exponenzieren eines Zweiteilchenoperators \mathcal{S} gebildet wird, enthält er selbst alle möglichen Vielteilchenoperatoren

$$\mathcal{C} = \exp \{ -i\mathcal{S} \} , \quad \mathcal{S} = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} \langle kl | \mathcal{S} | mn \rangle a_k^\dagger a_l^\dagger a_n a_m . \quad (4.52)$$

Dies überträgt sich auf den effektiven Operator \mathcal{Q}_{eff} , dessen Terme formal nach wachsender Teilchenzahl geordnet werden können

$$\mathcal{Q}_{\text{eff}} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(n)} . \quad (4.53)$$

$\mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(n)}$ bezeichnet dabei den Teil von \mathcal{Q}_{eff} , der ein n -Teilchenoperator ist. Er ist wie folgt rekursiv definiert

$$\mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(n)} = \frac{1}{n!} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ l_1, \dots, l_n}} \langle k_1 \dots k_n | \mathcal{Q}_{\text{eff}} - \sum_{m=0}^{n-1} \mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(m)} | l_1 \dots l_n \rangle a_{k_1}^\dagger \dots a_{k_n}^\dagger a_{l_n} \dots a_{l_1} , \quad (4.54)$$

wobei

$$\mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(1)} = \sum_{k_1, l_1} \langle k_1 | \mathcal{Q}_{\text{eff}} - \mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(0)} | l_1 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{l_1} \quad (4.55)$$

den Einteilchenanteil beschreibt.

$$\mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(0)} = \langle 0 | \mathcal{Q}_{\text{eff}} | 0 \rangle = \langle 0 | \mathcal{Q} | 0 \rangle \quad (4.56)$$

gibt den Vakuumerwartungswert wieder.

Es gilt dabei ganz allgemein, daß der effektive Operator, der zu einem m -Teilchenoperator gehört, Operatoren zu allen Teilchenzahlen größer gleich m enthält.

Der Erwartungswert des Operators \mathcal{Q} bezüglich des korrelierten A -Teilchenzustandes $|\Psi\rangle$ läßt sich nun als Summe von Spuren über irreduzible n -Teilchenoperatoren schreiben

$$\langle \Psi | \mathcal{Q} | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^A \text{Sp} \left(\mathcal{Q}_{\text{eff}}^{(n)} \rho_0^{(n)} \right) . \quad (4.57)$$

$\rho_0^{(n)}$ sind die zum unkorrelierten Versuchszustand gehörenden n -Teilchendichten.

Eine Entwicklung, die nach einer bestimmten Teilchenzahl abbricht, nennt man Clusterentwicklung. Die Bedingung des Abbruchs ergibt sich daraus, ob man einerseits die notwendigen Terme mitgenommen hat und ob man andererseits annehmen kann, daß die folgenden Terme klein gegen den letzten berücksichtigten sind.

Da in dieser Arbeit eine Zweiteilchenwechselwirkung Verwendung findet, muß die Entwicklung des effektiven Hamiltonoperators $\mathcal{C}^\dagger H \mathcal{C}$ wenigstens bis zum Zweiteilchenterm laufen. Andererseits sollen die untersuchten Korrelationen kurzreichweitig und die betrachteten Dichten klein sein, so daß schon der Dreiteilchenterm vernachlässigt werden kann. Um letzteres abzuschätzen, eignet sich das Quadrat der Differenz aus korrelierter und unkorrelierter konstanter Wellenfunktion als Maß. Integriert man über diesen Ausdruck, erhält man das sogenannte Korrelationsvolumen. Es entspricht dem durch das abstoßende Potential unbesetzte Volumen.

$$\begin{aligned} V_C &= \int d^3x \left[1 - \frac{R_-(x)\sqrt{R'_-(x)}}{x} \right]^2 \\ &= \int d^3r \left[\frac{R_+(r)\sqrt{R'_+(r)}}{r} - 1 \right]^2. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Multipliziert man dieses Volumen mit einer typischen Dichte wie der Dichte von Kernmaterie ($\rho_0 = 0.16\text{fm}^{-3}$), so erhält man einen dimensionslosen Kleinheitsparameter (ρV_C), der die Wahrscheinlichkeit abschätzt, ein drittes Teilchen im Korrelationsbereich zweier Teilchen zu finden. (ρV_C) ist damit auch ein Maß für die Kleinheit höherer Korrelationen.

Für den in Gleichung 4.49 vorgestellten Korrelator

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right)^{\frac{1}{3}} \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\} \quad (4.49')$$

mit den Parametern $\alpha = 0.76\text{fm}$, $\beta = 0.73\text{fm}$, die auch in späteren Rechnungen verwendet werden, erhält man $\rho V_C \approx 0.15$. Damit scheint es gerechtfertigt, Dreiteilchenkorrelationen zu vernachlässigen und alle Erwartungswerte in einer Zweiteilchennäherung zu bestimmen. Für Dichten, die die Sättigungsdichte um ein Vielfaches übersteigen, ist diese Näherung sicher nicht ausreichend.

In der Zweiteilchennäherung lauten die Erwartungswerte von Ein- und Zweiteilchenoperatoren wie folgt. Nach Gleichung (4.57) setzt sich der Erwartungswert eines Einteilchenoperators aus zwei Anteilen zusammen

$$\langle \mathcal{T} \rangle = \sum_{n=0}^2 \text{Sp} \left(\mathcal{T}_{\text{eff}}^{(n)} \rho_0^{(n)} \right) = \text{Sp} \left(\mathcal{T} \rho_0^{(1)} \right) + \text{Sp} \left(\{ \mathcal{C}^\dagger \mathcal{T} \mathcal{C} - \mathcal{T} \} \rho_0^{(2)} \right). \quad (4.59)$$

Die Spurbildung im ersten Term berücksichtigt den echten Einteilchenanteil $\mathcal{T}_{\text{eff}}^{(1)}$, der gleich dem unkorrelierten Einteilchenoperator \mathcal{T} ist, die Spur im zweiten Term den

echten Zweiteilchenanteil von \mathcal{T}_{eff} . Der in der ersten Spur schon berücksichtigte Einteilchenanteil ist in der zweiten Spur abgezogen. Alle Operatoren höherer Teilchenzahl tragen in der Zweiteilchennäherung nicht bei.

Der Erwartungswert eines Zweiteilchenoperators besteht in der Zweiteilchennäherung nur aus einem Term

$$\langle \mathcal{V} \rangle = \text{Sp} \left(\mathcal{C}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{C} \rho_0^{(2)} \right), \quad (4.60)$$

der den echten Zweiteilchenanteil $\mathcal{V}_{\text{eff}}^{(2)}$ enthält.

Die letzte Formel ermöglicht auch den Übergang zu korrelierten Ein- und Zweiteilchendichten, an denen sich wichtige Auswirkungen der Korrelationen ablesen lassen. In der Formel (4.60) läßt sich der Korrelationsoperator auf die Zweiteilchendichte überwälzen und es gilt

$$\langle \mathcal{V} \rangle = \text{Sp} \left(\mathcal{C}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{C} \rho_0^{(2)} \right) = \text{Sp} \left(\mathcal{V} \mathcal{C} \rho_0^{(2)} \mathcal{C}^\dagger \right) = \text{Sp} \left(\mathcal{V} \rho^{(2)} \right). \quad (4.60')$$

Das heißt, die korrelierte Zweiteilchendichte $\rho^{(2)}$ ergibt sich in Zweiteilchennäherung als

$$\rho^{(2)} = \mathcal{C} \rho_0^{(2)} \mathcal{C}^\dagger. \quad (4.61)$$

Die korrelierte Einteilchendichte $\rho^{(1)}$ folgt dann durch Reduktion aus der Zweiteilchendichte.

Schon bei der Beschränkung auf die Zweiteilchenclusternäherung ergeben sich starke qualitative Unterschiede zu Modellen, die als Versuchszustand eine einzelne Slaterdeterminante verwenden, wie das Hartree–Fock–Verfahren oder die Fermionische Molekulardynamik, wie sie im Kapitel 2 und in Ref. [8] diskutiert wurde. Für eine einzelne Slaterdeterminante ist die Zweiteilchendichte das antisymmetrische Kroneckerprodukt der Einteilchendichte mit sich selbst. Die korrelierte Zweiteilchendichte ist jedoch nicht mehr aus einer Einteilchendichte ableitbar, sie enthält Korrelationen, die über das Einteilchenniveau hinausgehen.

Am Beispiel der Ein- und Zweiteilchendichten des ^4He -Kernes und von Kernmaterie wird in diesem Abschnitt demonstriert, wie sich diese Korrelationen zeigen.

4.2.1 Unkorrelierte Dichten

Zur Wiederholung seien an dieser Stelle die Einteilchen- und Zweiteilchendichten angegeben, die zu einem unkorrelierten Versuchszustand der Fermionischen Molekulardynamik gehören und die in den Gleichungen (2.27) und (2.30) beschrieben wurden.

Der unkorrelierte Einteilchendichteoperator lautet

$$\rho_0^{(1)} = \sum_{k,l}^A |q_l\rangle \mathcal{O}_{lk} \langle q_k| , \quad (2.27')$$

seine Ortsdarstellung

$$\langle \vec{x} | \rho_0^{(1)} | \vec{x}' \rangle = \sum_{k,l}^A \langle \vec{x} | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} \langle q_k | \vec{x}' \rangle \quad (4.62)$$

ist selbst noch ein Operator im Spin- und Isospinraum. Um die Einteilchendichte im Ortsraum zu erhalten, muß noch über Spins und Isospins summiert werden. Dazu sei die folgende Nomenklatur eingeführt. Das Matrixelement der Dichte bezüglich Ort, Spin und Isospin sei mit

$$\langle \vec{x} m_s m_t | \rho_0^{(1)} | \vec{x}' m'_s m'_t \rangle = \sum_{k,l}^A \langle \vec{x} m_s m_t | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} \langle q_k | \vec{x}' m'_s m'_t \rangle \quad (4.63)$$

bezeichnet, die Einteilchendichte im Ortsraum ergibt sich dann als

$$\rho_0^{(1)}(\vec{x}) = \sum_{m_s, m_t} \langle \vec{x} m_s m_t | \rho_0^{(1)} | \vec{x} m_s m_t \rangle . \quad (4.64)$$

Die Spur über den Einteilchendichteoperator führt auf die Teilchenzahl

$$\text{Sp}(\rho_0^{(1)}) = \sum_{k,l}^A \langle q_k | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} = A . \quad (4.65)$$

Für eine einzelne Slaterdeterminante ergibt sich der unkorrelierte Zweiteilchendichteoperator aus dem Einteilchendichteoperator

$$\rho_0^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n}^A |q_m q_n\rangle \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right) \langle q_k q_l | . \quad (2.30')$$

4.2.2 Korrelierte Dichten

Entsprechend der Überlegungen zum Erwartungswert eines Zweiteilchenoperators (siehe (4.61)) erhält man die korrelierte Zweiteilchendichte durch Anwendung des Korrelationsoperators auf die unkorrelierte Zweiteilchendichte.

Sie lautet damit

$$\rho^{(2)} = \mathcal{C} \rho_0^{(2)} \mathcal{C}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n}^A \mathcal{C} |q_m q_n\rangle \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right) \langle q_k q_l | \mathcal{C}^\dagger . \quad (4.66)$$

Die korrelierte Einteilchendichte läßt sich durch Spurbildung aus der Zweiteilchendichte berechnen. Dies kann z.B. durch Integration einer Ortskoordinate und Spurbildung über die Spin- und Isospinfreiheitsgrade geschehen.

$$\begin{aligned} & \langle \vec{x} m_s m_t | \rho^{(1)} | \vec{x}' m'_s m'_t \rangle \\ &= \frac{2}{(A-1)} \int d^3 x_2 \sum_{m_{s2}, m_{t2}} \langle \vec{x} m_s m_t; \vec{x}_2 m_{s2} m_{t2} | \rho^{(2)} | \vec{x}' m'_s m'_t; \vec{x}_2 m_{s2} m_{t2} \rangle \end{aligned} \quad (4.67)$$

Die sich ergebende Einteilchendichte stimmt nicht mit der unkorrelierten überein, die ein Projektor ist und folglich die Besetzungszahlen Null oder Eins enthält. Die korrelierte Einteilchendichte hingegen enthält gebrochene Besetzungszahlen.

4.2.3 Korrelierte Dichten für ${}^4\text{He}$

Das einfachste Beispiel, die Wirkungsweise des unitären Korrelationsoperators in der Zweiteilchennäherung zu demonstrieren, ist das α -Teilchen.

Das α -Teilchen wird ohne Korrelationen durch vier Wellenpakete beschrieben, die im Phasenraum deckungsgleich sind, d.h., sie besitzen den gleichen mittleren Ort, den gleichen mittleren Impuls und die gleiche Breite [8]. Dieser unkorrelierte Versuchszustand wird im folgenden als Ausgangspunkt zur Konstruktion der korrelierten Zweiteilchendichte verwendet. Die vier Nukleonen unterscheiden sich in ihren Spin- und Isospinkomponenten und verhalten sich deshalb wie unterscheidbare Teilchen.

Da aus diesem Grund die Überlappmatrix diagonal wird

$$\mathcal{O}_{kl} = \frac{\delta_{kl}}{\langle q_k | q_k \rangle}, \quad (4.68)$$

lautet die über Spin und Isospin summierte korrelierte Zweiteilchendichte (4.66)

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{x}_3, \vec{x}_4) = 6 \frac{\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \mathcal{C} | q q \rangle \langle q q | \mathcal{C}^\dagger | \vec{x}_3 \vec{x}_4 \rangle}{\langle q q | q q \rangle}. \quad (4.69)$$

Die Einteilchenzustände $|q\rangle$ sind jetzt nur noch durch die Breite a charakterisiert

$$\langle \vec{x} | q \rangle = \exp \left\{ -\frac{\vec{x}^2}{2a} \right\}, \quad (4.70)$$

Spin- und Isospinfreiheitsgrade sind in der Summation aufgegangen.

Da das α -Teilchen die oben beschriebene Rotationssymmetrie aufweist, können die Einteilchendichten in Orts- und Impulsraum relativ einfach aus der Zweiteilchendichte gewonnen werden. Sowohl die Schwerpunkts- als auch die Relativwellenfunktion sind in den in (C.1) angegebenen Schwerpunkts- und Relativkoordinaten gaußförmig

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | q_1 q_2 \rangle = \langle \vec{X}_{12} | q_{\text{Sp}} \rangle \langle \vec{x}_{12} | q_{\text{rel}} \rangle = \exp \left\{ -\frac{\vec{X}_{12}^2}{a} \right\} \exp \left\{ -\frac{\vec{x}_{12}^2}{4a} \right\}. \quad (4.71)$$

Damit lautet die Einteilchendichte im Ortsraum

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(x) &= \frac{4\pi a}{x} \exp\left\{-\frac{2x^2}{a}\right\} \int_0^\infty dx_1 x_1 \left[\exp\left\{\frac{2xx_1}{a}\right\} - \exp\left\{-\frac{2xx_1}{a}\right\} \right] \\ &\times \exp\left\{-\frac{2x_1^2}{a}\right\} \left[\frac{R_-(x_1)\sqrt{R'_-(x_1)}}{x_1} \exp\left\{-\frac{(R_-(x_1))^2}{4a}\right\} \right]^2 \frac{1}{\langle q q | q q \rangle}, \end{aligned} \quad (4.72)$$

im Impulsraum ergibt sich der folgende Ausdruck

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(k) &= \frac{2\pi a^2}{k} \exp\left\{-2ak^2\right\} \int_0^\infty dk_1 k_1 \left[\exp\left\{4akk_1\right\} - \exp\left\{-4akk_1\right\} \right] \\ &\times \exp\left\{-2ak_1^2\right\} \left| \langle \vec{k}_1 | \mathcal{C} | q_{\text{rel}} \rangle \right|^2 \frac{1}{\langle q q | q q \rangle}. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Zur Berechnung der Impulsdarstellung der Einteilchendichte wird noch die Impulsdarstellung der korrelierten Relativwellenfunktion $\langle \vec{k}_1 | \mathcal{C} | q_{\text{rel}} \rangle$ benötigt. Sie kann mit Hilfe der Transformation $R_-(x)$ angegeben werden

$$\langle \vec{k}_1 | \mathcal{C} | q_{\text{rel}} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x \exp\{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}\} \frac{R_-(x)\sqrt{R'_-(x)}}{x} \exp\left\{-\frac{(R_-(x))^2}{4a}\right\} \quad (4.74)$$

und ist ebenfalls rotationssymmetrisch. Die Einteilchendichte ist auf die Teilchenzahl normiert

$$4\pi \int_0^\infty dx x^2 \rho^{(1)}(x) = A \quad \text{und} \quad 4\pi \int_0^\infty dk k^2 \rho^{(1)}(k) = A. \quad (4.75)$$

In Abbildung 4.5 sind die Eigenschaften der korrelierten Dichten anhand der Zweiteilchendichte in Ortsdarstellung und der Einteilchendichte in Impulsdarstellung verdeutlicht. Dazu wurde als Beispiel der Korrelator untersucht, der zur Transformation (4.48) gehört

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right) \exp\left\{-\frac{r}{\beta}\right\}. \quad (4.48')$$

Dieser Korrelator zeichnet sich durch zwei Parameter aus, von denen der erste, α , die Unterdrückung der Relativwellenfunktion bei Null bestimmt und der zweite, β , mit der Reichweite der Korrelation zusammenhängt.

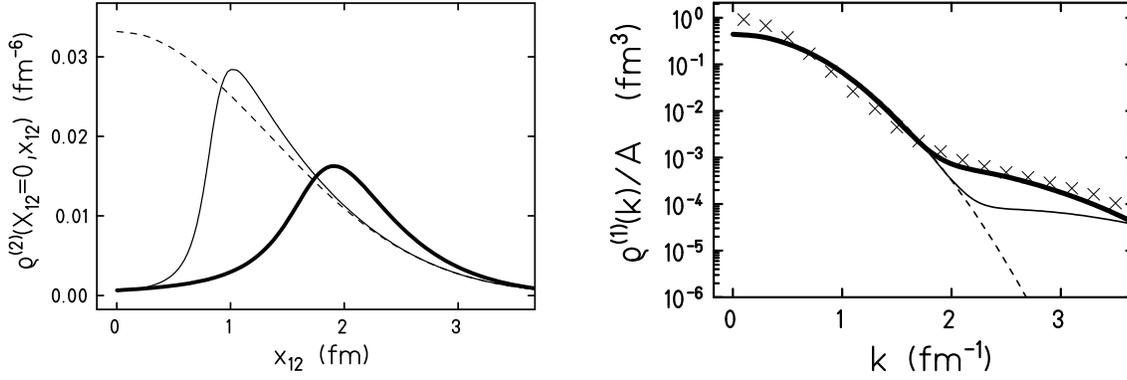


Abbildung 4.5: Unkorrelierte (unterbrochene Linie) und korrelierte Dichten (durchgezogene Linien) von ${}^4\text{He}$ für verschiedene Parametersätze, auf der linken Seite die Zweiteilchendichten in Ortsdarstellung, auf der rechten die Einteilchendichten im Impulsraum verglichen mit experimentellen Daten aus Ref. [38]. Zur näheren Erläuterung siehe Text.

In der Abbildung 4.5 sind die unkorrelierten Dichten durch eine unterbrochene Linie und die korrelierten Dichten für zwei verschiedene Parametersätze durch durchgezogene Linien dargestellt. Dabei gehört die dünne Linie zu den Parametern $\alpha = 0.96\text{fm}$, $\beta = 0.32\text{fm}$ und die dicke Linie zu den Parametern $\alpha = 1.89\text{fm}$, $\beta = 0.7\text{fm}$.

Die linke Seite zeigt die Zweiteilchendichte im Ortsraum als Funktion der Relativkoordinate und bei Null festgehaltenem Schwerpunkt. Unkorreliert erweist sich die Dichte wiederum als gaußförmig. Durch die Korrelation wird sie jedoch für kleine Relativabstände unterdrückt. Die Größe des Korrelationslochs entspricht etwa α an der Stelle, an der die Dichte den Maximalwert erreicht.

Die rechte Seite stellt die Einteilchendichte im Impulsraum dar. Für kleine Impulse behält auch die korrelierte Dichte in etwa die Gaußform, wie sie durch die unkorrelierte Dichte gegeben ist, allerdings minimal abgesenkt. Für hohe Impulse ergeben sich Besetzungszahlen, die in der unkorrelierten Dichte nicht vorhanden waren. Sie sind eine direkte Folge des Korrelationsloches der Zweiteilchendichte. Wie man erkennt, kommt die durch die dicke Linie wiedergegebene Korrelation den experimentellen Daten [38] sehr nahe. Das zeigt, daß die Zweiteilchennäherung der Dichte einen geeigneten Ansatz darstellt, die Besetzungszahlen großer Impulse zu beschreiben. Ein realistischerer Korrelator würde allerdings nicht nur aus einem Zentralterm bestehen, sondern hätte die Struktur der Wechselwirkung und würde z.B. auch Tensorterme enthalten [35].

Im Gegensatz zur Impulsdarstellung zeigen sich die kurzreichweitigen Korrelationen in der Ortsraumdicke für kleine x . Abbildung 4.6 stellt wiederum die unkorrelierten und die mit den beiden Parametersätzen berechneten korrelierten Ein- und Zweiteilchendichten im Ortsraum dar.

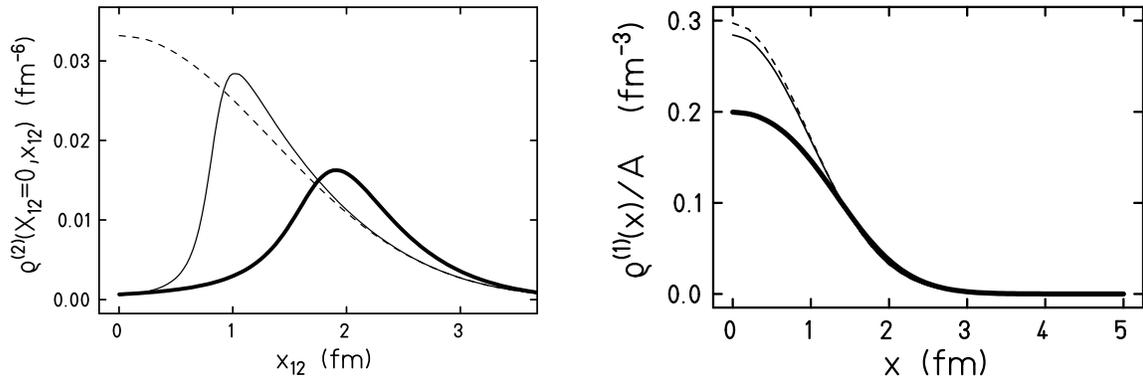


Abbildung 4.6: Unkorrelierte (unterbrochene Linie) und korrelierte Dichten (durchgezogene Linien) von ${}^4\text{He}$ für verschiedene Parametersätze, auf der linken Seite die Zweiteilchendichte in Ortsdarstellung, auf der rechten Seite die Einteilchendichten im Ortsraum. Zur näheren Erläuterung siehe Text.

Anhand der Graphen kann man erkennen, daß die korrelierte Einteilchendichte im Ortsraum für das kleinere Korrelationsloch um weniger als ein Zehntel für kleine x abgesenkt ist, für das etwa doppelt so große Korrelationsloch um ein Fünftel.

Zusammenfassend kann man sagen, daß sich kurzreichweitige Korrelationen in den Dichten u. a. an folgenden Stellen zeigen. Die Zweiteilchendichte weist im Ortsraum ein Korrelationsloch auf, dieses spiegelt sich in der Besetzung hoher Komponenten der Einteilchendichte in Impulsdarstellung wider. Im Ortsraum ist die korrelierte Einteilchendichte im Vergleich zur unkorrelierten abgeflacht.

4.2.4 Korrelierte Dichten für Kernmaterie

Als zweites Beispielsystem soll jetzt Kernmaterie betrachtet werden. Wie schon beim α -Teilchen können auch hier viele Symmetrien ausgenutzt werden. Kernmaterie ist homogen und isotrop, d.h., die Dichten sind gegenüber Verschiebungen um einen beliebigen Vektor \vec{R} und Drehungen \mathbf{D} um beliebige Winkel α, β, γ invariant

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{x}_1 | \rho^{(1)} | \vec{x}_2 \rangle &= \langle \vec{x}_1 - \vec{R} | \rho^{(1)} | \vec{x}_2 - \vec{R} \rangle \\
 &= \langle \mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma) \vec{x}_1 | \rho^{(1)} | \mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma) \vec{x}_2 \rangle, \\
 \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \rho^{(2)} | \vec{x}_3 \vec{x}_4 \rangle &= \langle \vec{x}_1 - \vec{R}; \vec{x}_2 - \vec{R} | \rho^{(2)} | \vec{x}_3 - \vec{R}; \vec{x}_4 - \vec{R} \rangle \\
 &= \langle \mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma) \vec{x}_1; \mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma) \vec{x}_2 | \rho^{(2)} | \mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma) \vec{x}_3; \mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma) \vec{x}_4 \rangle.
 \end{aligned} \tag{4.76}$$

Diese Eigenschaften haben zur Folge, daß die Einteilchendichte im Ortsraum nur vom Betrag des Relativabstandes abhängt. Im Impulsraum hängt die Einteilchendichte vom Betrag des Impulses ab.

Die folgenden Rechnungen sind alle so ausgeführt, daß zuerst ein System mit periodischen Randbedingungen in einem Volumen $V = L^3$ betrachtet wird, mit dem die Umformungen durchgeführt werden und dann schlußendlich der Grenzwert eines unendlichen Volumens ausgeführt wird.

Mit periodischen Randbedingungen ergeben sich die Impulse als wie folgt quantisiert

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}; \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}. \quad (4.77)$$

Für die Impulseigenzustände, deren Ortsdarstellung in Gleichung (4.78) angegeben ist

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp \{ i \vec{k} \cdot \vec{x} \}, \quad (4.78)$$

gilt die Orthogonalitätsrelation

$$\langle \vec{k}' | \vec{k}'' \rangle = \delta_{\vec{k}' \vec{k}''}. \quad (4.79)$$

Das freie Fermigas sowie die unkorrelierte Kernmaterie lassen sich durch ihre Einteilchendichte beschreiben. Unkorrelierte Kernmaterie unterscheidet sich lediglich dahingehend vom freien Fermigas, daß sie aus den Fermigasen von zwei unterscheidbaren Fermionensorten gebildet wird, die sich im Isospin unterscheiden. Der Operator der Einteilchendichte ergibt sich damit durch Superposition der Projektoren auf die besetzten Impulseigenzustände mit den entsprechenden Spin- und Isospinquantenzahlen

$$\begin{aligned} \rho_0^{(1)} &= \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_F \\ m_s, m_t}} |\vec{k} m_s m_t \rangle \langle \vec{k} m_s m_t | \\ \langle \vec{x}_1 m_{s1} m_{t1} | \rho_0^{(1)} | \vec{x}_2 m_{s2} m_{t2} \rangle &= \frac{1}{4} \hat{\rho}_0^{(1)}(x_{12}) \delta_{m_{s1} m_{s2}} \delta_{m_{t1} m_{t2}}. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Summiert man über Spin und Isospin, erhält man die mit $\hat{\rho}_0^{(1)}(x_{12})$ bezeichneten Außerdiagonalelemente der Einteilchendichte im Ortsraum

$$\hat{\rho}_0^{(1)}(x_{12}) = 3\rho_0 \left(\frac{\sin(k_F x_{12}) - k_F x_{12} \cos(k_F x_{12})}{(k_F x_{12})^3} \right). \quad (4.81)$$

Der Fermiimpuls ist dabei für alle vier Spin- und Isospinkombinationen gleich, er hängt auf die folgende Weise mit der Teilchenzahl A zusammen.

$$\sum_{|\vec{k}| \leq k_F} 1 = \frac{A}{4} \quad (4.82)$$

Aus der Normierungsbedingung folgt unmittelbar die mittlere Dichte der Kernmaterie zu

$$\rho_0 := \hat{\rho}_0^{(1)}(0) = 4 \frac{k_F^3}{6 \pi^2}. \quad (4.83)$$

Wie schon erwahnt, last sich fur das unkorrelierte Fermigas wie fur die unkorrelierte Kernmaterie die Zweiteilchendichte allein durch die Einteilchendichte schreiben, fur Kernmaterie gilt

$$\begin{aligned} \rho_0^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{|\vec{k}'| \leq k_F \\ m'_s, m'_t}} \sum_{\substack{|\vec{k}''| \leq k_F \\ m''_s, m''_t}} | \vec{k}' m'_s m'_t; \vec{k}'' m''_s m''_t \rangle_a \langle \vec{k}' m'_s m'_t; \vec{k}'' m''_s m''_t | \\ &\text{mit } | \vec{k}' m'_s m'_t; \vec{k}'' m''_s m''_t \rangle_a = | \vec{k}' m'_s m'_t; \vec{k}'' m''_s m''_t \rangle - | \vec{k}'' m''_s m''_t; \vec{k}' m'_s m'_t \rangle . \end{aligned} \quad (4.84)$$

Das allgemeine Matrixelement bezuglich Produktzustanden lautet dann

$$\begin{aligned} &\langle \vec{x}_1 m_{s1} m_{t1}; \vec{x}_2 m_{s2} m_{t2} | \rho_0^{(2)} | \vec{x}_3 m_{s3} m_{t3}; \vec{x}_4 m_{s4} m_{t4} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{4} \hat{\rho}_0^{(1)}(x_{13}) \delta_{m_{s1} m_{s3}} \delta_{m_{t1} m_{t3}} \frac{1}{4} \hat{\rho}_0^{(1)}(x_{24}) \delta_{m_{s2} m_{s4}} \delta_{m_{t2} m_{t4}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4} \hat{\rho}_0^{(1)}(x_{14}) \delta_{m_{s1} m_{s4}} \delta_{m_{t1} m_{t4}} \frac{1}{4} \hat{\rho}_0^{(1)}(x_{23}) \delta_{m_{s2} m_{s3}} \delta_{m_{t2} m_{t3}} \right] . \end{aligned} \quad (4.85)$$

Nach einer Spurbildung uber die Spin- und Isospinfreiheitsgrade verbleibt fur die Diagonale der Zweiteilchendichte im Ortsraum

$$\rho_0^{(2)}(x_{12}) = \rho_0^2 - \frac{1}{4} \left(\hat{\rho}_0^{(1)}(x_{12}) \right)^2 . \quad (4.86)$$

In Abbildung 4.7 sind auf der linken Seite die Zweiteilchendichten des freien Fermigas und der unkorrelierten Kernmaterie dargestellt. Aufgrund der Symmetrieeigenschaften hangt die Dichte nur noch vom Relativabstand x_{12} ab.

Ebenfalls auf der linken Seite von Abbildung 4.7 ist die Zweiteilchendichte im Ortsraum abgebildet, wie sie sich aus dem korrelierten Zweiteilchendichteoperator ergibt

$$\rho^{(2)} = \mathcal{C} \rho_0^{(2)} \mathcal{C}^\dagger . \quad (4.87)$$

Die Zweiteilchendichte last sich mit Hilfe der Transformation $R_-(x_{12})$ wie folgt schreiben

$$\rho^{(2)}(x_{12}) = \left[\frac{R_-(x_{12}) \sqrt{R'_-(x_{12})}}{x_{12}} \right]^2 \left\{ \rho_0^2 - \frac{1}{4} \left(\hat{\rho}_0^{(1)}(R_-(x_{12})) \right)^2 \right\} . \quad (4.88)$$

Sie unterscheidet sich von der unkorrelierten durch den Vorfaktor, der die Dichte fur kleine Relativabstande unterdruckt und durch eine Transformation des Argumentes. Diese Eigenschaften entsprechen denen, die bei der Korrelation einer einfachen Relativwellenfuntion zu beachten waren.

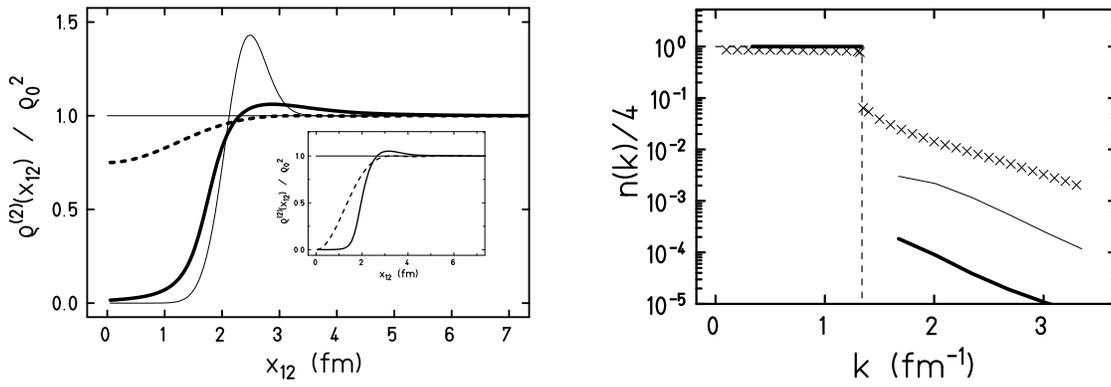


Abbildung 4.7: Links korrelierte (fette durchgezogene Linie) und unkorrelierte (unterbrochene Linie) Zweiteilchendichte von Kernmaterie im Ortsraum, im kleinen Bild entsprechend für ein Gas identischer Fermionen. Rechts unkorrelierte (unterbrochene Linie) und mit der Transformation (4.48) berechnete korrelierte Besetzungszahlen (fette durchgezogene Linie) von Kernmaterie im Impulsraum, Fermiimpuls $k_F = 1.34\text{fm}^{-1}$, Experimentelle Daten aus Ref. [38]. Die dünne durchgezogene Linie gibt in beiden Bildern das Ergebnis für einen Korrelator mit größerem Korrelationsloch und kleiner Abklinglänge wieder.

Wie im Fall des α -Teilchens wird auch für das Beispiel der Kernmaterie der durch die Transformation

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right) \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\} \quad (4.48'')$$

definierte Korrelator mit den Parametern $\alpha = 1.89\text{fm}$ und $\beta = 0.7\text{fm}$ verwendet. Man erkennt sehr gut, daß die Zweiteilchendichte im Ortsraum für kleine Relativabstände vollständig durch die kurzreichweitige Korrelation geprägt ist, d.h., daß das Korrelationsloch über das Austauschloch dominiert.

Zur Berechnung der Besetzungszahlen $n(\vec{k})$ im Impulsraum

$$n(\vec{k}) = \frac{(2\pi)^3}{V} \rho^{(1)}(\vec{k}) = \int_V d^3x_{12} \exp \{ -i \vec{k} \cdot \vec{x}_{12} \} \hat{\rho}^{(1)}(x_{12}) \quad (4.89)$$

wird die Einteilchendichte im Ortsraum $\hat{\rho}^{(1)}(x_{12})$ benötigt

$$\hat{\rho}^{(1)}(x_{12}) = \frac{1}{A-1} \int d^3x_3 \rho^{(2)}(\vec{x}_1\vec{x}_3; \vec{x}_2\vec{x}_3), \quad (4.90)$$

die sich durch Integration aus der korrelierten Zweiteilchendichte ergibt

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1\vec{x}_3; \vec{x}_2\vec{x}_3) = \frac{R_-(x_{13})\sqrt{R'_-(x_{13})}}{x_{13}} \frac{R_-(x_{23})\sqrt{R'_-(x_{23})}}{x_{23}} \rho_0^{(2)}(\vec{x}_5\vec{x}_6; \vec{x}_7\vec{x}_8). \quad (4.91)$$

Dabei wurden die folgenden Abkürzungen

$$\begin{aligned} \vec{x}_5 &= \frac{1}{4}\vec{x}_{12} + \frac{1}{2}\vec{x}_{13} \frac{R_-(x_{13})}{x_{13}}, & \vec{x}_6 &= \frac{1}{4}\vec{x}_{12} - \frac{1}{2}\vec{x}_{13} \frac{R_-(x_{13})}{x_{13}} \\ \vec{x}_7 &= -\frac{1}{4}\vec{x}_{12} + \frac{1}{2}\vec{x}_{23} \frac{R_-(x_{23})}{x_{23}}, & \vec{x}_8 &= -\frac{1}{4}\vec{x}_{12} - \frac{1}{2}\vec{x}_{23} \frac{R_-(x_{23})}{x_{23}} \end{aligned}$$

und die unkorrelierte Zweiteilchendichte im Ortsraum

$$\rho_0^{(2)}(\vec{x}_5\vec{x}_6; \vec{x}_7\vec{x}_8) = \hat{\rho}_0^{(1)}(x_{13})\hat{\rho}_0^{(1)}(x_{24}) - \frac{1}{4}\hat{\rho}_0^{(1)}(x_{14})\hat{\rho}_0^{(1)}(x_{23}) \quad (4.92)$$

verwendet.

Obwohl diese Ausdrücke eine komplizierte Struktur besitzen, kann man ohne weiteres erkennen, daß die mittlere Dichte von Kernmaterie unverändert bleibt

$$\hat{\rho}^{(1)}(0) = \rho_0 . \quad (4.93)$$

Zu diesem Zweck setzt man einfach $\vec{x}_1 = \vec{x}_2 = 0$ und transformiert die verbleibende Abhängigkeit $R_-(x_3)$ mit der Transformation $R_+(\cdot)$ zurück. Der Ausdruck, den man dann erhält, entspricht dem von unkorrelierter Kernmaterie. Dieses Verhalten der korrelierten Kernmaterie unterscheidet sich von demjenigen des α -Teilchens, welches mit Korrelation im Ortsraum eine geringere Einteilchendichte im Zentrum und eine höhere am Rand besitzt. In Kernmaterie ist eine Ausdehnung nicht möglich, deshalb bleibt die mittlere Dichte unverändert.

Da auch die Impulsverteilung von Kernmaterie kugelsymmetrisch sein muß, kann die über den Raumwinkel gemittelte radiale Abhängigkeit der Besetzungszahlen im Impulsraum letztendlich in das folgende Integral umgeformt werden

$$n(k) = \frac{1}{\rho_0 V - 1} \int d^3x_{12} \int d^3x_3 \frac{R_-(x_{13})\sqrt{R'_-(x_{13})}}{x_{13}} \frac{R_-(x_{23})\sqrt{R'_-(x_{23})}}{x_{23}} \times \frac{\sin(kx_{12})}{kx_{12}} \rho_0^{(2)}(\vec{x}_5\vec{x}_6; \vec{x}_7\vec{x}_8) . \quad (4.94)$$

Dabei rührt das Integral über \vec{x}_3 von der Berechnung der Einteilchendichte im Ortsraum und das Integral über \vec{x}_{12} von der Fouriertransformation her.

Aufgrund der Symmetrien von Kernmaterie ist jetzt noch eine spezielle Wahl des Koordinatensystems möglich, indem wie in Abbildung 4.8 angegeben \vec{x}_2 in den Ursprung gesetzt wird, $\vec{x}_2 = 0$, und der Vektor \vec{x}_1 auf die z -Achse beschränkt bleibt, $\vec{x}_1 = x_1 \vec{e}_z$.

Das Integral läßt sich in Zylinderkoordinaten ausführen und reduziert sich damit auf eine Integration über den Betrag von \vec{x}_1 sowie über r und h . Diese Integration kann nicht mehr analytisch ausgeführt werden, sie muß numerisch erfolgen.

Obwohl das Integral nur noch über drei Variable läuft, ist es dennoch sehr aufwendig zu berechnen. Die Ursache liegt in dem stark oszillierenden Integranden und dem großen Integrationsvolumen. Ein Ausweg besteht darin, von dem Integranden in (4.94) den entsprechenden unkorrelierten Ausdruck abzuziehen, für den das Ergebnis ja bekannt ist (Fermiverteilung). So heben sich korrelierter und unkorrelierter Integrand weg, wenn r groß gegen die Abklinglänge des Korrelators ist.

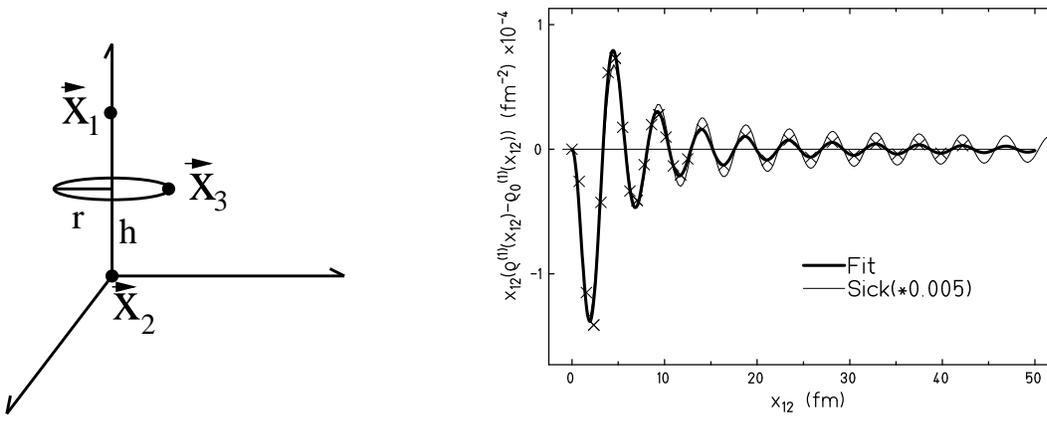


Abbildung 4.8: Links: Koordinatenwahl zur Integration von (4.94).
Rechts: Abweichung der korrelierten Einteilchendichte von der unkorrelierten (Symbole). Die fette Linie approximiert diese Werte, die dünne gibt die Rücktransformation der gemessenen Verteilung (Abb. 4.7 rechts) wieder.

Um die zeitraubende Fouriertransformation zu umgehen, wird der folgende Weg beschrieben. Es wird lediglich die Differenz der korrelierten und der unkorrelierten Einteilchendichte an wenigen Punkten x_{12} berechnet. Anschließend werden diese Werte durch die Funktion

$$\hat{\rho}^{(1)}(x_{12}) - \hat{\rho}_0^{(1)}(x_{12}) \approx 3\rho_0 \left(\frac{\sin(k_F x_{12}) - k_F x_{12} \cos(k_F x_{12})}{(k_F x_{12})^3} \right) \quad (4.95)$$

$$\times a (k_F x_{12})^b \left[1 - \exp \left\{ - \left(\frac{x_{12}}{c} \right)^d \right\} \right],$$

$$a = 0.004, \quad b = -0.53, \quad c = 3.0\text{fm}, \quad d = 1.6$$

mit den Parametern a , b , c und d approximiert (siehe Abbildung 4.8). Aus der Fouriertransformation dieser Funktion werden die Besetzungszahlen im Impulsraum berechnet.

Das Ergebnis der numerischen Integration ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Man erkennt deutlich, daß im Vergleich zum unkorrelierten System jetzt Impulse oberhalb der Fermikante besetzt sind und dafür unterhalb der Fermikante nicht mehr alle Impulse besetzt sind. Jedoch ergeben sich mit dem Beispielkorrelator (4.48) wesentlich kleinere Abweichungen von der Fermiverteilung als im Experiment. Die Ursache mag zum einen darin zu suchen sein, daß das zentrale Korrelationsloch in der Zweiteilchendichte von Kernmaterie eine andere Form hat als im Beispiel. Zum anderen spielen Korrelationen, die sich aus der Tensorwechselwirkung ergeben, eine große Rolle [35]. Ein Korrelator, der z.B. ein größeres Korrelationsloch und eine kleinere Abklinglänge besitzt, kommt den Daten schon näher. Dieser Zusammenhang erfordert noch eine detailliertere Untersuchung.

4.3 Ableitung der Hamiltonfunktion

Der letzte Abschnitt dieses Kapitels wendet sich der Ableitung der Hamiltonfunktion $\mathcal{H}(Q)$ zu

$$\mathcal{H}(Q) = \langle Q | \mathcal{C}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{C} | Q \rangle = \langle Q | \mathcal{H}_{\text{eff}} | Q \rangle, \quad (4.96)$$

die zur Berechnung der Kerngrundzustände und der Dynamik von Schwerionenreaktionen nötig ist. Dabei ist es das Ziel dieser Studie, diejenigen Terme der Hamiltonfunktion herauszuarbeiten und zu diskutieren, die sich im Unterschied zu einer Beschreibung mit unkorrelierten Versuchszuständen, Gleichungen (2.29) und (2.31), ergeben und diese näherungsweise zu berechnen.

Es zeigt sich, daß durch die unitäre Korrelation die kurzreichweitige Abstoßung des Potentials zu einem großen Teil in impulsabhängige Zweiteilchenterme der korrelierten kinetischen Energie umgewandelt wird. Diese bewirken letztendlich die Sättigung der Bindungsenergie und die kurzreichweitigen Abstoßungen mit hohen Impulsüberträgen bei kleinen Abständen.

Zuerst muß jedoch die Frage nach dem Zusammenhang von Korrelator und Potential geklärt werden. Aus der Forderung, daß die Matrixelemente der potentiellen Energie nicht divergieren sollen, lassen sich nur grobe notwendige Bedingungen an das Verhalten des Korrelationsoperators bei kleinen Relativabständen ableiten. Der Korrelator wird deshalb im folgenden durch Variation der Energie bestimmt [35].

Entsprechend dem Ritzschen Variationsprinzip wird der korrelierte Versuchszustand

$$\mathcal{C}(\alpha, \beta) | Q \rangle \quad (4.97)$$

als parameterabhängiger Ansatz aufgefaßt, der jetzt nicht nur von den Parametern Q des unkorrelierten Zustandes abhängt, sondern auch von den Parametern des Korrelationsoperators. An einem System, in dieser Arbeit am ${}^4\text{He}$, werden durch Minimierung der Energie sowohl die Parameter α und β des Korrelators als auch die Parameter Q des Versuchszustandes bestimmt. Die so gefundenen Parameter α und β des Korrelators werden dann jedoch ein für alle Male festgehalten, d.h., der so bestimmte Korrelator beschreibt sowohl alle weiteren Grundzustände als auch alle angeregten Zustände. Diese Annahme scheint gerechtfertigt, da die kurzreichweitigen Korrelationen, die vom abstoßenden Teil der Wechselwirkung herrühren, ähnlich einer Randbedingung wirken und damit im wesentlichen nur von der konkreten Form des abstoßenden Teils des Potentials abhängen sollten. Erste Untersuchungen verschiedener leichter Systeme bestätigen diese Annahme [50].

Es soll an dieser Stelle darauf verwiesen werden, daß aufgrund der Zweiteilchennäherung die Eigenschaft des Ritzschen Variationsprinzips, daß die durch Variation gewonnene Näherung für die Grundzustandsenergie stets oberhalb der exakten liegt, verloren geht. Sind die Ausdehnung der Einteilchenwellenpakete und die Größe des Korrelationsloches von der gleichen Größenordnung, kann der Erwartungswert des Hamiltonoperators auch Werte unterhalb der wahren Grundzustandsenergie annehmen.

Durch Beschränkung auf kurzreichweitige Korrelationen und kleine Dichten können diese unphysikalischen Minima jedoch ausgeschlossen werden.

Nachdem der Korrelator festgelegt ist, wird abschließend die Hamiltonfunktion angegeben, wie sie in die Grundzustands- und dynamischen Rechnungen eingeht.

4.3.1 Erwartungswerte von Ein- und Zweiteilchenoperatoren

Wie schon in Gleichung (4.59) ausgeführt wurde, berechnet sich der Erwartungswert eines beliebigen Einteilchenoperators wie der kinetischen Energie \tilde{T} zu

$$\begin{aligned} \langle \tilde{T} \rangle &= \sum_{k,l}^A \langle q_k | \tilde{T} | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n}^A \langle q_k q_l | \left(\tilde{\mathcal{C}}^\dagger \tilde{T} \tilde{\mathcal{C}} - \tilde{T} \right) | q_m q_n \rangle \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right). \end{aligned} \quad (4.59')$$

Er setzt sich zusammen aus dem Erwartungswert eines Einteilchenoperators, der dem des unkorrelierten Einteilchenoperators entspricht und aus dem Erwartungswert des Korrelationsanteils $\tilde{\mathcal{C}}^\dagger \tilde{T} \tilde{\mathcal{C}} - \tilde{T}$, der aus Zweiteilchen-, Dreiteilchen- und Operatoren höherer Teilchenzahl besteht. Er enthält keinen Einteilchenoperator. Die Spurbildung mit der Zweiteilchendichte projiziert den Zweiteilchenanteil heraus. In diesem Sinne wird der Operator $\tilde{\mathcal{C}}^\dagger \tilde{T} \tilde{\mathcal{C}} - \tilde{T}$ in der Zweiteilchennäherung durch seinen Zweiteilchenanteil genähert.

Im Fall der kinetischen Energie lauten die Matrixelemente dieses Zweiteilchenoperators (siehe auch (4.40))

$$\begin{aligned} &\langle q_k q_l | \left(\tilde{\mathcal{C}}^\dagger \tilde{T} \tilde{\mathcal{C}} - \tilde{T} \right) | q_m q_n \rangle \\ &= \frac{1}{2\mu} \int d^3 X \int d^3 r \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \langle q_k q_l | \vec{X} \vec{r} \rangle \right\} \cdot \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \otimes \vec{r} \right)^2 - 1 \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \langle \vec{X} \vec{r} | q_m q_n \rangle \right\} \\ &+ \frac{1}{2\mu} \int d^3 X \int d^3 r \frac{1}{(R'_+(r))^2} \left[\frac{1}{2} \frac{R''_+(r)}{R'_+(r)} - \frac{5}{4} \left(\frac{R''_+(r)}{R'_+(r)} \right)^2 + 2 \frac{R''_+(r)}{r R'_+(r)} \right] \\ &\quad \times \langle q_k q_l | \vec{X} \vec{r} \rangle \langle \vec{X} \vec{r} | q_m q_n \rangle, \end{aligned} \quad (4.98)$$

wobei $\langle \vec{X} \vec{r} | q_m q_n \rangle$ die Zweiteilchenwellenfunktion

$$\begin{aligned} \langle \vec{X} \vec{r} | q_m q_n \rangle &= \exp \left\{ -\frac{(\vec{X} + \frac{1}{2} \vec{r} - \vec{b}_m)^2}{2 a_m} \right\} \exp \left\{ -\frac{(\vec{X} - \frac{1}{2} \vec{r} - \vec{b}_n)^2}{2 a_n} \right\} \\ &\otimes | \chi_m, \phi_m \rangle \otimes | \xi_m \rangle \otimes | \chi_n, \phi_n \rangle \otimes | \xi_n \rangle \end{aligned} \quad (4.99)$$

bezeichnet. Der Tensor

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \otimes \vec{r} = \frac{r}{R_+(r)} + \left(\frac{1}{R'_+(r)} - \frac{r}{R_+(r)} \right) \frac{\vec{r} \otimes \vec{r}}{r^2} \quad (4.100)$$

bestimmt in Gleichung (4.98) die Richtungsabhängigkeit der effektiven Masse. Sind die betrachteten Wellenfunktionen im Relativabstand radialsymmetrisch, so tritt dieser Tensor stets als Produkt mit dem Einheitsvektor in radialer Richtung auf. Es gilt dann

$$\left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \otimes \vec{r} \right) \cdot \frac{\vec{r}}{r} = \frac{1}{R'_+(r)} \frac{\vec{r}}{r}. \quad (4.101)$$

Bei genauer Betrachtung der Matrixelemente (4.98) kann man erkennen, daß sich der Erwartungswert des Operators $\tilde{\mathcal{C}}^\dagger \tilde{\mathcal{T}} \tilde{\mathcal{C}} - \tilde{\mathcal{T}}$ in zwei Anteile aufspalten läßt. Der erste Anteil $\mathcal{T}_{\text{HC}}(Q)$

$$\mathcal{T}_{\text{HC}}(Q) = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_m, q_n) \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right), \quad (4.102)$$

der sich durch Summation der Matrixelemente

$$\begin{aligned} & t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_m, q_n) \quad (4.103) \\ &= \frac{1}{2\mu} \int d^3 X \int d^3 r \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \langle q_k q_l | \vec{X} \vec{r} \rangle \right\} \cdot \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \otimes \vec{r} \right)^2 - 1 \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \langle \vec{X} \vec{r} | q_m q_n \rangle \right\} \end{aligned}$$

ergibt, kann als kinetische Energie mit effektiver Masse aufgefaßt werden. Durch ihn wird eine impulsabhängige Repulsion vermittelt. Diese Eigenschaft kann man besonders gut am diagonalen Matrixelement ablesen, wenn man außerdem die Parameter der Breite reell wählt und den Tensor in Gleichung (4.100) auf den radialen Anteil beschränkt. Das diagonale Matrixelement lautet dann

$$\begin{aligned} & t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_k, q_l) \quad (4.104) \\ &= (2\pi a)^{-\frac{3}{2}} \frac{1}{m} \int d^3 r \left(\frac{1}{(R'_+(r))^2} - 1 \right) \left\{ \frac{(\vec{r} - \vec{r}_{kl})^2}{4 a^2} + \vec{p}_{kl}^2 \right\} \exp \left\{ - \frac{(\vec{r} - \vec{r}_{kl})^2}{2a} \right\}. \end{aligned}$$

In dieser Formel bezeichnen \vec{r}_{kl} den Relativabstand der Wellenpakete k und l , \vec{p}_{kl} den Relativimpuls $\frac{1}{2} (\vec{p}_k - \vec{p}_l)$ und a die Breite der Einteilchenwellenpakete.

Abbildung 4.9 zeigt als durchgezogene Linie den Term $(1/(R'_+(r))^2 - 1)$ als Funktion von r für einen durch die Gleichung (4.49) gegebenen Korrelator mit den Parametern $\alpha = 0.76\text{fm}$ und $\beta = 0.73\text{fm}$. Man erkennt, daß aufgrund dieser Funktion die Matrixelemente $t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_k, q_l)$ positiv sein werden und somit zu einer impulsabhängigen Abstoßung führen, solange die Breite der Relativwellenfunktion größer als der Radius des Korrelationsvolumens ist. Ist die Breite kleiner, so ergibt die Zweiteilchennäherung für Systeme, die aus mehr als zwei Teilchen bestehen, eine unphysikalische Korrektur zur kinetischen Energie. Die Funktion $(1/(R'_+(r))^2 - 1)$ liefert also ebenfalls einen Anhaltspunkt, wann die Zweiteilchennäherung verwendet werden kann. Der Radius, bei dem diese Funktion das Vorzeichen wechselt, stellt eine untere Grenze für die Breite der Relativwellenfunktion dar und gibt damit ebenfalls eine obere Grenze für die Dichte vor, bis zu der die Zweiteilchennäherung verwendet werden darf. Um zu

verhindern, daß das System in den unphysikalischen Bereich gelangen kann, wird die Funktion $(1/(R'_+(r))^2 - 1)$ durch die in Abbildung 4.9 durch eine unterbrochene Linie dargestellte Gaußfunktion approximiert. Da diese Funktion bei der Berechnung der Matrixelemente $t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_k, q_l)$ mit den Einteilchenwellenpaketen gefaltet wird, ergibt sich kaum eine Differenz, wenn die Breiten der Pakete groß genug, d.h. im von der Näherung erlaubten Bereich sind.

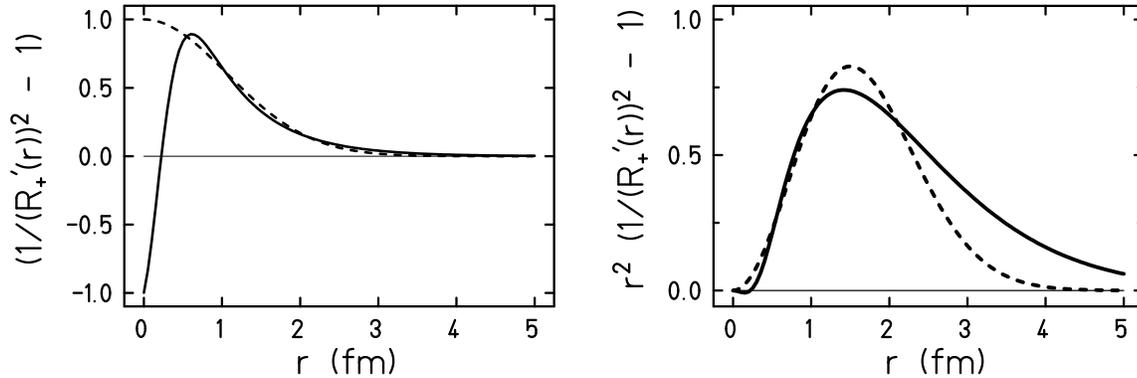


Abbildung 4.9: Darstellung von $(1/(R'_+(r))^2 - 1)$ als Funktion von r für die Transformation (4.49) $R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta}\right)^{1/3} \exp\left\{-\frac{r}{\beta}\right\}$ mit $\alpha = 0.76\text{fm}$ und $\beta = 0.73\text{fm}$. Die unterbrochene Linie gibt eine Approximation durch eine einzelne Gaußfunktion wieder.

Der zweite Anteil des Erwartungswertes von $\zeta^\dagger \tilde{T} \zeta - \tilde{T}$ entspricht in seiner Art dem Erwartungswert eines lokalen Potentials. Dieser Teil ergibt sich aus den Matrixelementen $v_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_m, q_n)$

$$v_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_m, q_n) = \frac{1}{2\mu} \int d^3X \int d^3r \langle q_k q_l | \vec{X} \vec{r} \rangle \langle \vec{X} \vec{r} | q_m q_n \rangle \quad (4.105)$$

$$\times \frac{1}{(R'_+(r))^2} \left[\frac{1}{2} \frac{R_+'''(r)}{R'_+(r)} - \frac{5}{4} \left(\frac{R_+''(r)}{R'_+(r)} \right)^2 + 2 \frac{R_+''(r)}{r R'_+(r)} \right].$$

Abbildung 4.10 zeigt das Verhalten dieses lokalen Potentials

$$t_2(r) = \frac{1}{2\mu} \frac{1}{(R'_+(r))^2} \left[\frac{1}{2} \frac{R_+'''(r)}{R'_+(r)} - \frac{5}{4} \left(\frac{R_+''(r)}{R'_+(r)} \right)^2 + 2 \frac{R_+''(r)}{r R'_+(r)} \right].$$

Man kann sehen, daß auch dieser Term, wenn er mit einem Wellenpaket gefaltet wird, das groß genug ist, auf eine Abstoßung führt. Für kleine Wellenpakete (große Dichte) erhält man auch hier einen unphysikalischen Beitrag der Zweiteilchennäherung. Deshalb wird auch dieser Term so genähert, daß die Korrektur stets positiv bleibt.

Allerdings braucht die potentialartige Korrektur nicht separat behandelt zu werden, sondern kann mit dem korrelierten Nukleon–Nukleon–Potential zu einer Wechselwirkung zusammengefaßt werden.

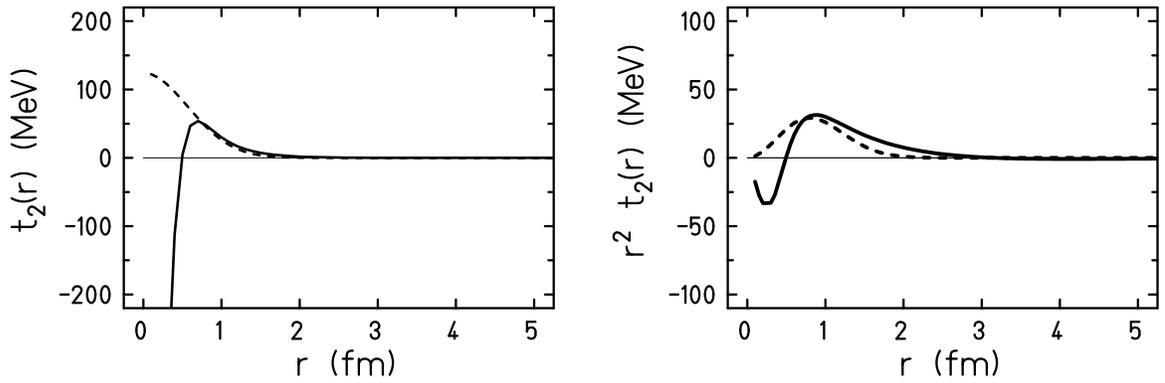


Abbildung 4.10: Darstellung von $t_2(r)$ als Funktion von r für die Transformation (4.49) $R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta}\right)^{1/3} \exp\left\{-\frac{r}{\beta}\right\}$ mit $\alpha = 0.76\text{fm}$ und $\beta = 0.73\text{fm}$.

Der Erwartungswert von Zweiteilchenoperatoren wie der Wechselwirkung \mathcal{V} ergibt sich in der Zweiteilchennäherung durch Spurbildung mit $\rho^{(2)}$

$$\langle \mathcal{V} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n}^A \langle q_k q_l | \mathcal{Q}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{Q} | q_m q_n \rangle \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right). \quad (4.59')$$

Die Matrixelemente der lokalen Wechselwirkung lassen sich mit der Transformation $R_+(r)$ ausdrücken

$$\langle q_k q_l | \mathcal{Q}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{Q} | q_m q_n \rangle = \int d^3 X \int d^3 r \langle q_k q_l | \vec{X} \vec{r} \rangle V(R_+(r)) \langle \vec{X} \vec{r} | q_m q_n \rangle. \quad (4.106)$$

Der zweite Teil aus (4.98) und das effektive Potential können nun zu \mathcal{V}_{sum} zusammengefaßt werden. In der Ortsdarstellung lautet die Wechselwirkung jetzt

$$V_{\text{sum}}(r) := V(R_+(r)) + \frac{1}{2\mu} \frac{1}{(R'_+(r))^2} \left[\frac{1}{2} \frac{R''_+(r)}{R'_+(r)} - \frac{5}{4} \left(\frac{R''_+(r)}{R'_+(r)} \right)^2 + 2 \frac{R''_+(r)}{r R'_+(r)} \right].$$

Nachdem der Erwartungswert des Hamiltonoperators bezüglich eines korrelierten Vielteilchenzustandes in Zweiteilchennäherung im Prinzip bekannt ist, muß nun die Frage geklärt werden, wie der unitäre Korrelator, der bis jetzt noch nicht spezifiziert wurde, zu wählen ist.

4.3.2 Der Zusammenhang Potential – Korrelator

Notwendige Bedingung der Existenz

Eine notwendige Bedingung an den unitären Korrelator ergibt sich aus der Forderung, daß das Integral (4.106) nicht divergiert. Dazu nimmt man an, daß die Wechselwirkung

für kleine Abstände wie $1/x^n$ ansteigt

$$\lim_{x \rightarrow 0} V(x) \propto \frac{1}{x^n} . \quad (4.107)$$

Die Transformation $R_+(x)$ selbst gehe wie

$$\lim_{x \rightarrow 0} R_+(x) \propto x^k . \quad (4.108)$$

Damit das Integral (4.106) existiert, muß folglich

$$k \leq \frac{2}{n} \quad (4.109)$$

gelten. Benutzt man als kurzreichweitiges Potential zum Beispiel ein Lennard–Jones–Potential, das für kleine Abstände mit $1/x^{12}$ wächst, so muß der Korrelator dies bei Null mit $k \leq 1/6$ ausgleichen.

Leider reicht dieses notwendige Kriterium nicht aus, den Zusammenhang zwischen Potential und Korrelator festzumachen. Das Kriterium ist sogar ziemlich schwach, wenn man als Wechselwirkung ein Yukawa-artiges Potential benutzt, das für kleine Abstände wie $1/x$ geht. Deshalb wird in dieser Arbeit auf die Idee zurückgegriffen, den Korrelator aus einem Variationsverfahren zu gewinnen, so wie dies auch in Ref. [35] verfolgt wird.

Diskussion des schematischen Modells

Bevor der Korrelator am Alphateilchen spezifiziert wird, soll an dieser Stelle noch einmal der schematische Korrelator betrachtet werden. An ihm läßt sich gut erklären, wie durch Minimierung der Energie ein spezieller Korrelator ausgezeichnet werden kann.

Der schematische Korrelator ist dadurch gekennzeichnet, daß er um eine Konstante α in radialer Richtung verschiebt

$$\langle \vec{x} | \mathcal{C} | \phi \rangle = \frac{1}{x} \exp \left\{ -\alpha \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \langle \vec{x} | \phi \rangle . \quad (4.41')$$

Er wirke auf eine unkorrelierte Relativwellenfunktion $\langle \vec{x} | \phi \rangle$, die der Einfachheit halber als radialsymmetrische Gaußsche Wellenfunktion mit einer festen Breite a angenommen wird

$$\langle \vec{x} | \phi \rangle \propto \exp \left\{ -\frac{\vec{x}^2}{4a} \right\} . \quad (4.110)$$

Die Gesamtenergie ist damit eine Funktion des einzigen freien Parameters α . Sie lautet

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \langle \phi | \mathcal{C}^\dagger \underline{H} \mathcal{C} | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \underline{T} | \phi \rangle + \int d^3x \langle \phi | \vec{x} \rangle V(x + \alpha) \langle \vec{x} | \phi \rangle . \end{aligned} \quad (4.111)$$

Da der schematische Korrelator mit dem Radialteil des Operators der kinetischen Energie vertauscht und die Wellenfunktion kugelsymmetrisch gewählt wurde, ändert er den Erwartungswert der kinetischen Energie nicht (4.40). Die potentielle Energie ergibt sich aus der Gleichung (4.37).

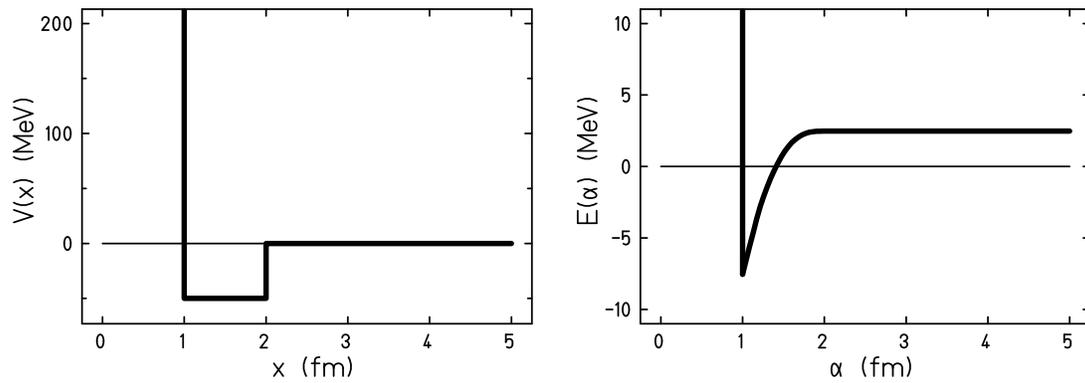


Abbildung 4.11: Schematisches Modell: Links: Potential, rechts: Erwartungswert des Hamiltonoperators als Funktion des Korrelatorparameters α .

Die Abbildung 4.11 zeigt auf der linken Seite das lokale Potential, das zur Demonstration gewählt wurde. Es ist kurzreichweitig abstoßend wie eine harte Kugel und für $1\text{ fm} < r \leq 2\text{ fm}$ anziehend. Auf der rechten Seite ist die Energie als Funktion des Korrelatorparameters α zu sehen. Die minimale Energie erhält man gerade dann, wenn die unkorrelierte Wellenfunktion aus dem abstoßenden Bereich des Potentials herausgeschoben ist.

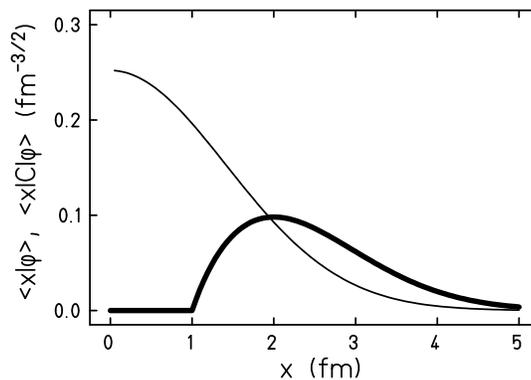


Abbildung 4.12: Schematisches Modell: unkorrelierte (dünne Linie) und korrelierte (fette Linie) Relativwellenfunktion für $\alpha = 1\text{ fm}$.

Die zu diesem Korrelator gehörende korrelierte Wellenfunktion wird durch die dicke Linie in Abbildung 4.12 dargestellt. Man erkennt, daß der Korrelator in der Relativwellenfunktion ein Loch der Größe $\alpha = 1\text{ fm}$ schafft und daß er dabei auch die gesamte Wellenfunktion um diesen Abstand zu höheren x verschiebt.

Ein realistischer Korrelator sollte nur für kleine Relativabstände wirksam sein, d.h., zum einen darf das Korrelationsloch nur so groß wie nötig sein, zum anderen muß die Korrelation nach außen schnell genug abfallen. Beide Eigenschaften, kleine Lochgröße und endliche Abklinglänge, sind nötig, um das Korrelationsvolumen klein zu halten und so die Zweiteilchennäherung zu ermöglichen.

Das Alpha-Teilchen

Mit den gewonnenen Erkenntnissen soll jetzt der Korrelator am ${}^4\text{He}$ -Kern bestimmt werden. Das Alphateilchen ist aus zwei Gründen als Modellsystem gut geeignet. Zum einen setzt es sich aus unterscheidbaren Teilchen zusammen, das macht die Antisymmetrisierung einfach. Zum anderen trägt beim Alphateilchen der exponentiell abfallende Schwanz der Wellenfunktion nicht mehr so stark zur Bindung bei wie beim Deuteron oder Triton. Diese beiden leichten Kerne können mit den gaußförmig abfallenden Versuchszuständen der Fermionischen Molekulardynamik nur unzureichend beschrieben werden.

Eine weitere wichtige Wahl ist die des realistischen Potentials. Bei den erfolgreichsten Wechselwirkungen handelt es sich um Einbosonenaustauschwechselwirkungen wie das Bonn-Potential [47]. Der Zusammenhang einer solchen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung mit unitären Korrelationen wird derzeit in zwei Diplomarbeiten untersucht [50].

In dieser Arbeit soll es darauf ankommen, die prinzipielle Wirkungsweise des Korrelators zu zeigen. Dazu wird eine Yukawa-artige Wechselwirkung, das zentrale Softcore-Potential $V_c({}^3S_1)$ von Reid [48], untersucht. Da dieses Potential allein noch nicht bindet, ein großer Teil der Bindung hat seinen Ursprung im Tensoranteil [35], wird noch ein gaußförmiges anziehendes Potential hinzugenommen, das dem langreichweitigen Verhalten der Versuchszustände besser angepaßt ist und das für das Alphateilchen gerade die richtige Bindungsenergie und Breite liefert. Das zu untersuchende Potential lautet damit

$$V(x) = -10.5\text{MeV} \frac{e^{-\mu x}}{\mu x} + 105.5\text{MeV} \frac{e^{-2\mu x}}{\mu x} - 3187.8\text{MeV} \frac{e^{-4\mu x}}{\mu x} + 9924.3\text{MeV} \frac{e^{-6\mu x}}{\mu x} - 98.0\text{MeV} \exp\left\{-\frac{x^2}{(1.4\text{fm})^2}\right\}, \quad (4.112)$$

wobei $\mu = 0.7\text{fm}^{-1}$.

Abbildung 4.13 zeigt die Abhängigkeit der lokalen Wechselwirkung von der Radialkoordinate x_{12} als dünne durchgezogene Linie.

Als nächstes gilt es die Form des Korrelators zu spezifizieren. In den folgenden Rechnungen wird der schon aus Gleichung (4.49) bekannte Korrelator verwendet,

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta}\right)^{\frac{1}{3}} \exp\left\{-\frac{r}{\beta}\right\}, \quad (4.113)$$

der zwei Freiheitsgrade besitzt, die Lochgröße α und die Abklinglänge β . Allgemeinere Korrelatoren werden in den schon erwähnten Arbeiten von Thomas Neff und Robert Roth untersucht [50].

Die Ortsanteile der vier unkorrelierten Wellenfunktionen setzen sich wie in Abschnitt 4.2.3 aus vier deckungsgleichen Gaußschen Wellenfunktionen der Breite a zusammen

$$\langle \vec{x} | q \rangle \propto \exp \left\{ -\frac{\vec{x}^2}{2a} \right\} . \quad (4.114)$$

Die Energie ist damit eine Funktion der Korrelatorparameter α und β sowie der Parameter des Vielteilchenzustandes, in diesem Fall lediglich a

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\alpha, \beta, a) &= \langle Q | \mathcal{Q}^\dagger(\alpha, \beta) \mathcal{H} \mathcal{Q}(\alpha, \beta) | Q \rangle, \\ &= \sum_k^A \langle q_k | \mathcal{T} | q_k \rangle \mathcal{O}_{kk} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \langle q_k q_l | (\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{T} \mathcal{Q} - \mathcal{T}) | q_k q_l \rangle \mathcal{O}_{kk} \mathcal{O}_{ll} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \langle q_k q_l | \mathcal{Q}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{Q} | q_k q_l \rangle \mathcal{O}_{kk} \mathcal{O}_{ll} . \end{aligned} \quad (4.115)$$

Eine Variation im dreidimensionalen Parameterraum liefert als Minimum

$$\mathcal{H}(\alpha = 0.76 \text{fm}, \beta = 0.73 \text{fm}, a = 1.69 \text{fm}^2) = -28.5 \text{ MeV} . \quad (4.116)$$

Durch diesen Korrelator nimmt die Zweiteilchendichte des Alphateilchens im Ortsraum für einen bei Null festgehaltenen Schwerpunkt die in Abbildung 4.13 abgebildete Gestalt an.

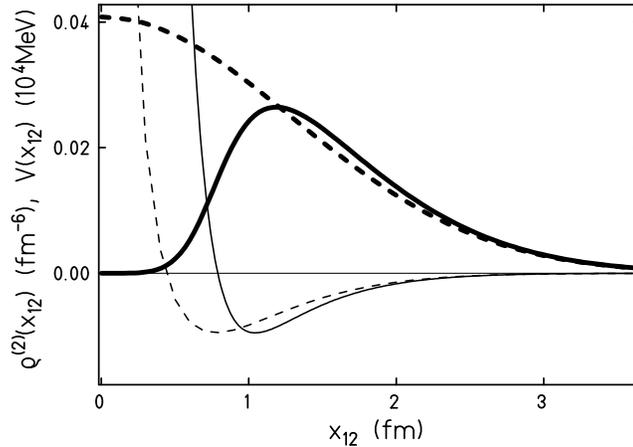


Abbildung 4.13: Unkorrelierte (fette unterbrochene Linie) und korrelierte Zweiteilchendichte (fette durchgezogene Linie) von ${}^4\text{He}$ für den durch Variation gefundenen Parametersatz. Das lokale Potential ist durch eine dünne durchgezogene Linie dargestellt, das korrelierte Potential durch eine dünne unterbrochene Linie.

Die fette durchgezogene Kurve zeigt die korrelierte Zweiteilchendichte, die fette unterbrochene Kurve die unkorrelierte Zweiteilchendichte. Man erkennt sehr schön, daß die korrelierte Zweiteilchendichte im Gebiet des abstoßenden Anteils der Wechselwirkung unterdrückt ist. Für große Relativabstände geht sie hingegen in die unkorrelierte Dichte über. Die Korrelation erfüllt somit die an sie gestellte Bedingung, kurzreichweitig zu sein. Das zu ihr gehörende Korrelationsvolumen (4.58) beträgt $V_c = 0.95\text{fm}^3$ und der entsprechende Kleinheitsparameter $(\rho V_c) = 0.15$, wenn man als typische Dichte die von Kernmaterie benutzt. Das heißt, die unkorrelierte Wahrscheinlichkeit, ein drittes Teilchen im Korrelationsvolumen anzutreffen, beträgt lediglich 15 Prozent. Eine Zweiteilchennäherung mit dem gefundenen Korrelator erscheint deshalb gerechtfertigt.

Mit den gefundenen Parametern nimmt die Einteilchendichte in Orts- und Impulsraum die in Abb. 4.14 wiedergegeben Gestalt an.

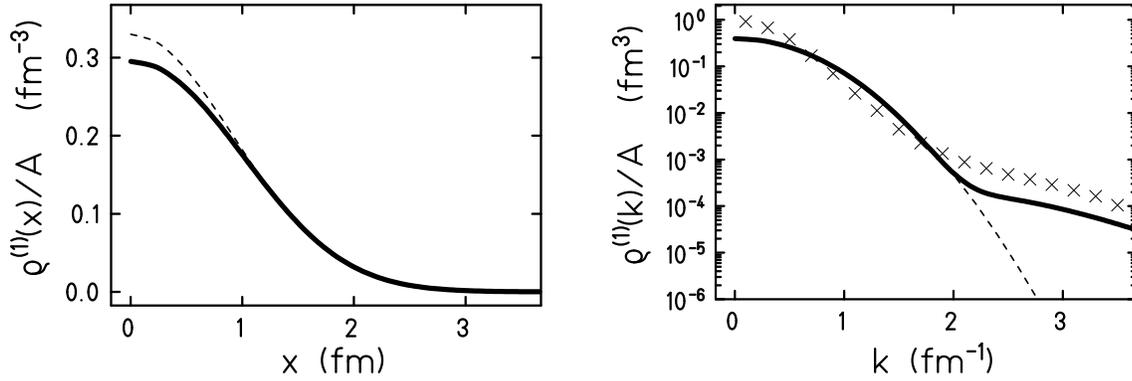


Abbildung 4.14: Unkorrelierte (unterbrochene Linien) und korrelierte Dichten (durchgezogene Linien) von ${}^4\text{He}$ für den durch Variation gefundenen Parametersatz. Links: Einteilchendichte im Ortsraum, rechts: Einteilchendichte im Impulsraum. Die experimentellen Daten Ref. [38] sind durch Kreuze wiedergegeben.

Im Ortsraum ist die korrelierte Einteilchendichte für kleine x abgesenkt, für große entspricht sie der unkorrelierten Dichte. Im Impulsraum verhält es sich gerade umgekehrt. Dort findet durch die Korrelation eine Umbesetzung von kleineren zu größeren Impulsen statt, was sich am ausgeprägten Impulsschwanz zeigt. Für kleine Impulse hat die Verteilung die Gaußform der unkorrelierten Dichte. Die gemessenen höheren Impulsdichten bei $k \lesssim 0.5 \text{ fm}^{-1}$ deuten darauf hin, daß die wahre Wellenfunktion des Alphateilchens für große Abstände mehr exponentiell als gaußförmig abfällt.

Nachdem der unitäre Korrelator durch die Transformation

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right)^{\frac{1}{3}} \exp \left\{ -\frac{r}{\beta} \right\}, \quad \alpha = 0.76\text{fm}, \beta = 0.73\text{fm} \quad (4.117)$$

festgelegt ist, kann jetzt die Hamiltonfunktion aufgeschrieben werden.

4.3.3 Die genäherte Hamiltonfunktion

Der Erwartungswert des Hamiltonoperators ist ein essentieller Bestandteil der Fermionischen Molekulardynamik. Durch seine Minima sind die Grundzustände des Modells gegeben. Seine Ableitungen nach den Parametern gehen als generalisierte Kräfte in die Bewegungsgleichungen ein.

Aus diesen Gründen ist es zum einen nötig, die Hamiltonfunktion so genau wie möglich zu spezifizieren, indem eine möglichst realistische Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung einschließlich der Coulombwechselwirkung verwendet wird, zum anderen ist es aber unumgänglich, den numerischen Aufwand zu begrenzen. Die zweite Aufgabe wird in der FMD durch die Verwendung von Gaußfunktionen gelöst. Da die Einteilchenwellenpakete Gaußform besitzen, ist es zweckmäßig, die Darstellung von Operatoren wie z.B. des Potentials durch eine Linearkombination von Gaußfunktionen zu approximieren, damit der Erwartungswert analytisch berechnet werden kann.

Eine weitere Näherung betrifft die nichtorthogonalen Einteilchenzustände im Zusammenhang mit der Antisymmetrisierung. Auch in dieser Arbeit wird die Idee verfolgt, den Effekt der Antisymmetrisierung auf Erwartungswerte von Zweiteilchenoperatoren durch eine eingeschränkte Anzahl von Matrixelementen und eine zustandsabhängige multiplikative Korrektur zu nähern. Diese Faktorisierungsnäherung wurde schon in Ref. [5] untersucht, sie reduziert den numerischen Aufwand von A^4 auf A^3 und arbeitet sehr gut.

Der Erwartungswert des Hamiltonoperators, der im weiteren als Hamiltonfunktion $\mathcal{H}(Q)$ der Parameter $Q = \{q_\mu\}$ bezeichnet wird, setzt sich in der Zweiteilchennäherung (Gleichungen (4.59) und (4.60)) aus der unkorrelierten kinetischen Energie $\mathcal{T}(Q)$, dem Zweiteilchenanteil $\mathcal{T}_{\text{HC}}(Q)$ der korrelierten kinetischen Energie, der nuklearen Wechselwirkungsenergie $\mathcal{V}(Q)$ und der Coulombenergie $\mathcal{V}_{\text{Coul}}(Q)$ zusammen

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(Q) &= \langle Q | \mathcal{C}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{C} | Q \rangle \\ &= \mathcal{T}(Q) + \mathcal{T}_{\text{HC}}(Q) + \mathcal{V}(Q) + \mathcal{V}_{\text{Coul}}(Q) . \end{aligned} \quad (4.118)$$

Der erste Term $\mathcal{T}(Q)$ bezeichnet den Erwartungswert der unkorrelierten kinetischen Energie \mathcal{T} , der gerade dem Einteilchenanteil der effektiven kinetischen Energie $\mathcal{C}^\dagger \mathcal{T} \mathcal{C}$ entspricht

$$\mathcal{T}(Q) = \sum_{k,l} \langle q_k | \mathcal{T} | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} . \quad (4.119)$$

Der Term der Wechselwirkungsenergie $\mathcal{V}(Q)$ setzt sich aus zwei Teilen (4.107) zusammen, zum einen aus dem Zweiteilchenanteil des effektiven Nukleon–Nukleon–Potentials $\mathcal{C}^\dagger \mathcal{V} \mathcal{C}$ und zum anderen aus dem potentialartigen Anteil von $\mathcal{C}^\dagger \mathcal{T} \mathcal{C} - \mathcal{T}$. Diese Summe wird in der Ortsdarstellung durch zwei Gaußfunktionen parametrisiert

und der Erwartungswert in einer Faktorisierungsnaherung berechnet [5]

$$\mathcal{V}(Q) = \sum_{k < l} \frac{\langle q_k q_l | \underline{V}_{\text{sum}} | q_k q_l \rangle_a}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \exp \left\{ -\frac{1}{4} c_{kl} \right\} \quad (4.120)$$

$$c_{kl} = \sum_{m \neq k, l}^A \left(\frac{\langle q_k q_m | q_m q_k \rangle}{\langle q_k q_m | q_k q_m \rangle} + \frac{\langle q_l q_m | q_m q_l \rangle}{\langle q_l q_m | q_l q_m \rangle} \right).$$

Die explizite Form des verwendeten $V_{\text{sum}}(x_{12})$ ist gegeben durch

$$V_{\text{sum}}(x_{12}) = \left(V_{01} \exp \left\{ -\frac{x_{12}^2}{r_{01}^2} \right\} + V_{02} \exp \left\{ -\frac{x_{12}^2}{r_{02}^2} \right\} \right) (w + m \underline{P} \vec{r}) \quad (4.121)$$

$$\begin{aligned} V_{01} &= 800.0 \text{ MeV} ; & r_{01} &= 0.45 \text{ fm} \\ V_{02} &= -128.7 \text{ MeV} ; & r_{02} &= 1.40 \text{ fm} \\ w &= 0.398 ; & m &= 0.602 . \end{aligned}$$

Die Austauschmischung in (4.121) entspricht der des effektiven Potentials V2 von Volkov [49].

Abbildung 4.15 zeigt sowohl die exakte radiale Abhängigkeit von $V_{\text{sum}}(x_{12})$ als unterbrochene Linien als auch die parametrisierte radiale Abhängigkeit als durchgezogene Linien.

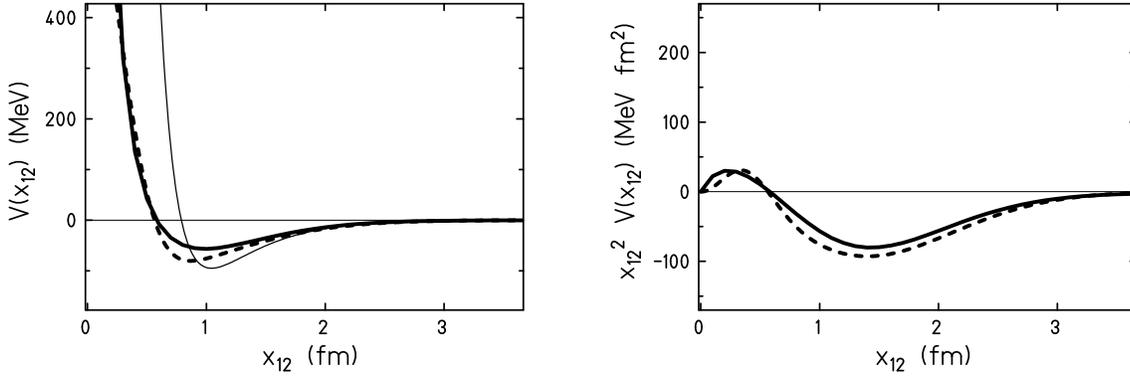


Abbildung 4.15: Radiale Abhängigkeit des effektiven Potentials $V_{\text{sum}}(x_{12})$ (fette unterbrochene Linien) und seine Approximation durch zwei Gaußfunktionen entsprechend Gl. (4.121) (fette durchgezogene Linien), sowie das Produkt mit x_{12} . Im linken Bild zeigt die dünne durchgezogene Linie das unkorrelierte Potential zum Vergleich.

Der Term $\mathcal{T}_{\text{HC}}(Q)$ in Gleichung (4.118) berücksichtigt den Anteil der korrelierten kinetischen Energie, der als kinetische Energie mit effektiver Masse in den Relativkoordinaten aufgefaßt werden kann, wie dies in Gleichung (4.103) angegeben ist. Auch

hier wird eine Faktorisierungsnaherung verwendet

$$\mathcal{T}_{\text{HC}}(Q) = \sum_{k < l} t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_k, q_l) \left((1 - \gamma_{kl}) + \gamma_{kl} \exp \left\{ - \frac{\langle q_k q_l | q_l q_k \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \right\} \right). \quad (4.122)$$

Die Ausdrücke $t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_k, q_l)$ approximieren dabei die Matrixelemente (4.103), in denen $(1/(R'_+(r))^2 - 1)$ durch die positive Funktion $\tau_0 \exp\{-r^2/\tau_1^2\}$ parametrisiert wird, wie es in Abbildung 4.9 durch die unterbrochene Linie dargestellt ist

$$\begin{aligned} t_{\text{HC}}(q_k, q_l; q_k, q_l) & \quad (4.123) \\ &= \frac{\tau_0}{4m} \left(\frac{\tau_1^2}{\tau_1^2 + 2\sigma_{kl}} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{3}{2\sigma_{kl}} - \frac{3}{\tau_1^2 + 2\sigma_{kl}} + \frac{2\vec{r}_{kl}^2}{(\tau_1^2 + 2\sigma_{kl})^2} + \vec{p}_{kl}^2 \right] \exp \left\{ - \frac{\vec{r}_{kl}^2}{\tau_1^2 + 2\sigma_{kl}} \right\} \\ \sigma_{kl} &= \frac{a_{kR}|a_l|^2 + a_{lR}|a_k|^2}{2 a_{kR} a_{lR}}; \quad \tau_0 = 197.63; \quad \tau_1 = 1.5\text{fm}. \end{aligned}$$

Zu guter Letzt geht die Coulombenergie $\mathcal{V}_{\text{Coul}}(Q)$ in die Hamiltonfunktion ein. Die Coulombwechselwirkung ist eine langreichweitige und im Kern im Vergleich zur Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung schwache Wechselwirkung. Deshalb haben die kurzreichweitigen Korrelationen nur einen geringen Einfluß auf den Erwartungswert, so daß ohne Abstriche der des unkorrelierten Operators verwendet werden kann. Auch die Coulombenergie wird in einer Faktorisierungsnaherung berechnet, die im Anhang C.3.1 erläutert wird

$$\mathcal{V}_{\text{Coul}}(Q) = \sum_{k < l}^A \frac{\langle q_k q_l | \mathcal{V}_{\text{Coul}} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \left((1 - \gamma_{kl}) + \gamma_{kl} \exp \left\{ - \frac{\langle q_k q_l | q_l q_k \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \right\} \right). \quad (\text{C.9}')$$

In den Gleichungen (4.122) und (4.124) wird die folgende Abkürzung benutzt

$$\gamma_{kl} = \text{erf} \left\{ \frac{1}{2} + \sum_{m \neq k, l}^A \left(\frac{\langle q_k q_m | q_m q_k \rangle}{\langle q_k q_m | q_k q_m \rangle} + \frac{\langle q_l q_m | q_m q_l \rangle}{\langle q_l q_m | q_l q_m \rangle} \right) \right\}, \quad (4.124)$$

die eine monotone Funktion der Überlapps der Einteilchenwellenpakete $|q_k\rangle$ und $|q_l\rangle$ mit den restlichen Einteilchenwellenpaketen ist. Mit ihrer Hilfe kann die zustandsabhängige Korrektur ausgedrückt werden.

An dieser Stelle ist es angebracht, noch einmal auf die Zeitableitung hinzuweisen. Da der unitäre Korrelationsoperator \mathcal{C} zustandsunabhängig ist, bleiben Ausdrücke, die Zeitableitungen enthalten, unverändert. Für das zeitabhängige Variationsprinzip (2.1) bedeutet das, daß der erste Term der Lagrangefunktion \mathcal{L}_0 für alle zustandsunabhängigen Korrelatoren unverändert bleibt.

$$\mathcal{L}_0 = \langle Q(t) | \mathcal{C}^\dagger \left(i \frac{d}{dt} \right) \mathcal{C} | Q(t) \rangle = \langle Q(t) | i \frac{d}{dt} | Q(t) \rangle \quad (4.125)$$

Dies gilt auch in der Zweiteilchennaherung.

Damit sind alle Voraussetzungen geschaffen, um im folgenden Kapitel Kerngrundzustände und Schwerionenreaktionen untersuchen zu können.

5. Grundzustände und Schwerionenreaktionen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit den Grundzustandseigenschaften von Kernen und Reaktionen zwischen ihnen. Zur Beschreibung der Grundzustände auch größerer Kerne ist die Verwendung einer realistischen Wechselwirkung mit kurzreichweitiger Abstoßung unerlässlich. Sie bewirkt die Sättigung der Nukleonendichte und der Bindungsenergie. Dieser Effekt muß, verwendet man lediglich eine Slaterdeterminante als Versuchszustand, durch effektive dichteabhängige Zweiteilchenwechselwirkungen wie im Skyrme–Hartree–Fock simuliert werden. Dadurch können zwar in der Regel Bindungsenergien und Ladungsradien richtig wiedergegeben werden, jedoch weisen die durch eine einzelne Slaterdeterminante gegebenen Ein- und Zweiteilchendichten die experimentell beobachteten kurzreichweitigen Korrelationen nicht auf. Außerdem besteht bis auf bestimmte allgemeine Symmetrieeigenschaften kein direkter Zusammenhang zwischen der effektiven Wechselwirkung und dem Nukleon–Nukleon–Potential, so wie es sich etwa aus Deuteroneigenschaften und Streuphasen ergibt.

Der Ansatz eines korrelierten Versuchszustandes

$$\mathcal{C} | Q \rangle, \quad (5.1)$$

der einer Superposition sehr vieler Slaterdeterminanten entspricht, ermöglicht sowohl, einen effektiven Hamiltonoperator abzuleiten (4.118), als auch, die Korrelationen im Vielteilchenzustand des wechselwirkenden Fermionensystems zu beschreiben (z.B. Abb. 4.14). Selbst wenn für die realistische Wechselwirkung ein relativ einfacher Ansatz gemacht wird (4.112), reproduziert der effektive Hamiltonoperator in der Zweiteilchennäherung die Grundzustandsdaten über einen großen Massenbereich sehr gut. Dies ist für ein Modell, das Reaktionen von Kernen beschreiben will, bei denen Phänomene wie Fusion, Fragmentation oder Evaporation auftreten, von großer Wichtigkeit. Die Häufigkeiten von Reaktionsprodukten und Verhältnisse dieser Häufigkeiten hängen stark von den Bindungsenergien der zu bildenden Reaktionsprodukte ab. Ebenso besteht ein enger Zusammenhang zwischen den quadratischen Radien der Kerne und den Streuquerschnitten in Reaktionen. Eine korrekte Beschreibung der Grundzustandseigenschaften ist deshalb eine unumgängliche Voraussetzung, um in dynamischen Problemen Vorhersagekraft zu erhalten, die über die durch Erhaltungsgrößen dominierten globalen Phänomene hinausgeht.

Auch in Reaktionen von Atomkernen spielen kurzreichweitige Korrelationen eine wichtige Rolle. Die kurzreichweitige Abstoßung ist der Ursprung harter Stöße zwischen den Nukleonen, bei denen große Impulse übertragen werden können. Deshalb führen die meisten Modelle (BUU, QMD, AMD) neben einem mittleren Feld explizit Zweiteilchenstöße ein. In der Quantenmolekulardynamik [13, 14, 15, 16, 17] und der Antisymmetrisierten Molekulardynamik [10, 11, 12] wirken sie wie eine fluktuierende Langevin-Kraft, die in stochastischer Weise die mittleren Impulse der Wellenpakete ändert. Eine eindeutige Auftrennung der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung in ein mittleres Feld und einen fluktuierenden Stoßterm ist jedoch nicht möglich.

In der Fermionischen Molekulardynamik bestimmt die Wahl des Versuchszustandes, welche physikalischen Phänomene berücksichtigt werden sollen. Der Ansatz einer korrelierten Wellenfunktion führt hier auf natürliche Weise auf die Sättigung der Bindungsenergie und die starke Abstoßung bei kleinen Relativabständen. Die Bewegungsgleichungen, die sich auch für den korrelierten Versuchszustand aus dem zeitabhängigen Variationsverfahren ergeben, sind deterministisch, auch wenn sie bei höheren Anregungen chaotisches Verhalten zeigen. Empfindliche Vielteilchenkorrelationen, die im System vorhanden sein können (Cluster), werden in der FMD nicht wie in anderen Molekulardynamikmodellen durch die Zufälligkeit des stochastischen Stoßterms zerstört.

Die Bewegungsgleichungen sind in der Lage, eine große Palette an Phänomenen zu beschreiben. Sowohl tief inelastische Reaktionen an der Coulombschwelle als auch Multifragmentationsreaktionen können untersucht werden. Dabei zeigen die simulierten Reaktionen diejenigen Phänomene, die in den untersuchten Energiebereichen typisch sind. In tief inelastischen Reaktionen entstehen bei kleinen Stoßparametern fusionierte Kerne, die im Zeitverlauf Nukleonen abdampfen, bei größeren Stoßparametern kommt es zur Dissipation der kinetischen Energie bis zur Viola-Energie vollständig relaxierter Stöße. In Multifragmentationsreaktionen werden große Fluktuationen im Ausgangskanal beobachtet. Diese äußern sich in einer breiten Massenverteilung der erzeugten Fragmente. Sowohl schnelle Anteile der Reaktion, wie die sofortige Emission von Nukleonen als auch langsamere Anteile, wie die Abregung heißer Kerne durch Evaporation und sequentiellen Zerfall werden in der Fermionischen Molekulardynamik beschrieben.

5.1 Grundzustandsdaten

Die Grundzustände der Fermionischen Molekulardynamik ergeben sich aus dem Ritzschen Variationsprinzip durch Minimierung der Energie, d.h., der Erwartungswert des Hamiltonoperators $\mathcal{H}(Q) = \langle Q | \mathcal{C}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{C} | Q \rangle$ bezüglich des Grundzustandes bildet ein globales Minimum im Raum der Parameter Q . Das bedeutet insbesondere, daß die Ableitungen von $\mathcal{H}(Q)$ bezüglich aller Parameter q_μ verschwinden

$$0 = \frac{\partial}{\partial q_\mu} \mathcal{H}(Q) , \quad \forall q_\mu . \quad (2.47')$$

Aus dieser notwendigen Bedingung folgt mit den Bewegungsgleichungen (2.5) außerdem sofort, daß die Grundzustände der FMD stationär sind, da alle generalisierten Kräfte identisch Null sind.

Der Hamiltonoperator \tilde{H} enthält als Bestandteil der kinetischen Energie auch den Operator der kinetischen Energie des Schwerpunktes \tilde{T}_{CM} . Sein Erwartungswert ist im Grundzustand ungleich Null, da die Schwerpunktswellenfunktion nicht separiert und durch die Lokalisierung des Einteilchenwellenpakete im Kern gefangen bleibt.

Der Kern trägt dadurch stets die Nullpunktsenergie seines Schwerpunktes mit sich. Dieses Problem ist allen Modellen gemein, die den Vielteilchenzustand mit Einteilchenkoordinaten anstelle von Relativabständen beschreiben. Für große Kerne beträgt die Schwerpunktsenergie unabhängig von der Teilchenzahl etwa 10 MeV, für kleine Kerne kann sie fast das Doppelte betragen. Wie der Schwerpunkt am besten zu behandeln ist, insbesondere welchen Einfluß er auf Fragmentationsreaktionen hat, in denen sich die Zahl der Reaktionspartner und damit auch die Zahl der Schwerpunkte ändert, muß noch untersucht werden. In Fragmentationsreaktionen kann man davon ausgehen, daß die Fragmente bei der hohen Anregungsenergie des Systems lokalisiert gebildet werden, so daß auch in der Realität für jedes Fragment eine Lokalisierungsenergie aufzubringen ist. Im Modell der Antisymmetrisierten Molekulardynamik wird die Idee verfolgt, die Anzahl der räumlich getrennten Fragmente in die Hamiltonfunktion einzubeziehen und ihre Schwerpunktsenergie abzuziehen.

Einem solchen Ansatz soll hier nicht nachgegangen werden. In dieser Arbeit wird der Erwartungswert des Hamiltonoperators inklusive der Nullpunktsenergie des Schwerpunktes als Grundzustandsenergie betrachtet, da die partiellen Ableitungen dieses Erwartungswertes in die Bewegungsgleichungen eingehen.

Tabelle 5.1 zeigt die Energien und Ladungsradien der Grundzustände von Kernen bis $A = 58$, wie sie sich mit der in Gleichung (4.118) definierten Hamiltonfunktion ergeben. Dabei setzt sich der Ladungsradius

$$r_{cms}^2 = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^A \langle Q | \mathcal{C}^\dagger (X(i) - X_{\text{CM}})^2 P^p(i) \mathcal{C} | Q \rangle + r_{\text{Proton}}^2 \quad (5.2)$$

aus dem quadratischen Radius der Protonenverteilung im Kern und dem quadratischen Radius des einzelnen Protons, $r_{\text{Proton}} = 0.876\text{fm}$, zusammen [8].

Isotop	Experiment		FMD		Experiment	FMD
	E_B (MeV)	E_B/A (MeV)	$\langle \tilde{H} \rangle$ (MeV)	$\langle \tilde{H} \rangle / A$ (MeV)	r_{cms} (fm)	r_{cms} (fm)
^3He	-7.718	-2.57	-0.64	-0.21	1.87	1.86
^4He	-28.296	-7.07	-28.23	-7.06	1.63	1.72
^5He	-27.410	-5.48	-29.88	-5.98		1.75
^5Li	-26.330	-5.27	-28.67	-5.73		2.12
^6Li	-31.994	-5.33	-33.50	-5.58	2.50	2.13
^7Li	-39.244	-5.61	-43.12	-6.16	2.39	2.06
^7Be	-37.600	-5.37	-41.28	-5.90		2.18
^8Be	-56.500	-7.06	-58.30	-7.29		2.26
^9Be	-58.165	-6.46	-62.46	-6.94	2.42	2.24
^9B	-56.315	-6.26	-60.51	-6.72		2.40
^{10}B	-64.751	-6.48	-66.86	-6.68	2.45	2.44
^{11}B	-76.206	-6.93	-76.35	-6.94	2.42	2.38
^{11}C	-73.441	-6.68	-73.78	-6.71		2.49
^{12}C	-92.163	-7.68	-90.92	-7.58	2.42	2.49
^{13}C	-97.109	-7.47	-96.90	-7.45	2.32	2.46
^{13}N	-94.106	-7.24	-94.11	-7.24		2.60
^{14}N	-104.66	-7.48	-102.28	-7.30	2.46	2.59
^{15}N	-115.49	-7.70	-113.97	-7.60		2.54
^{15}O	-111.95	-7.46	-110.51	-7.37		2.65
^{16}O	-127.62	-7.98	-127.42	-7.96	2.71	2.62
^{17}O	-131.76	-7.75	-128.00	-7.53	2.67	2.62
^{17}F	-128.22	-7.54	-129.39	-7.61		2.79
^{18}F	-137.37	-7.63	-136.68	-7.59		2.79
^{19}F	-147.80	-7.78	-146.29	-7.70	2.90	2.75
^{19}Ne	-143.78	-7.56	-142.18	-7.48		2.88
^{20}Ne	-160.64	-8.03	-155.49	-7.77	3.01	2.85
^{21}Ne	-167.40	-7.97	-156.17	-7.44		2.84
^{24}Mg	-198.256	-8.26	-197.17	-8.22	3.02	3.02
^{27}Al	-224.952	-8.33	-217.45	-8.05	3.02	3.08
^{28}Si	-236.537	-8.44	-224.18	-8.01	3.10	3.16
^{32}S	-271.783	-8.49	-257.03	-8.03	3.25	3.29
^{40}Ca	-342.056	-8.55	-341.49	-8.54	3.48	3.42
^{56}Fe	-492.27	-8.79	-497.34	-8.88	3.74	3.63
^{56}Ni	-484.00	-8.64	-483.25	-8.63		3.75
^{58}Ni	-506.47	-8.73	-501.54	-8.65	3.77	3.74

Tabelle 5.1: Vergleich experimenteller Bindungsenergien [51, 52] und Ladungsradien [53, 54] mit denen der Fermionischen Molekulardynamik. Die experimentellen Fehler sind kleiner als die letzte angegebene Stelle.

Die folgenden Abbildungen, in denen die Grundzustände nach verschiedenen Schnitten durch das Tal der Stabilität geordnet sind, geben einen systematischen Überblick über die Grundzustandseigenschaften.

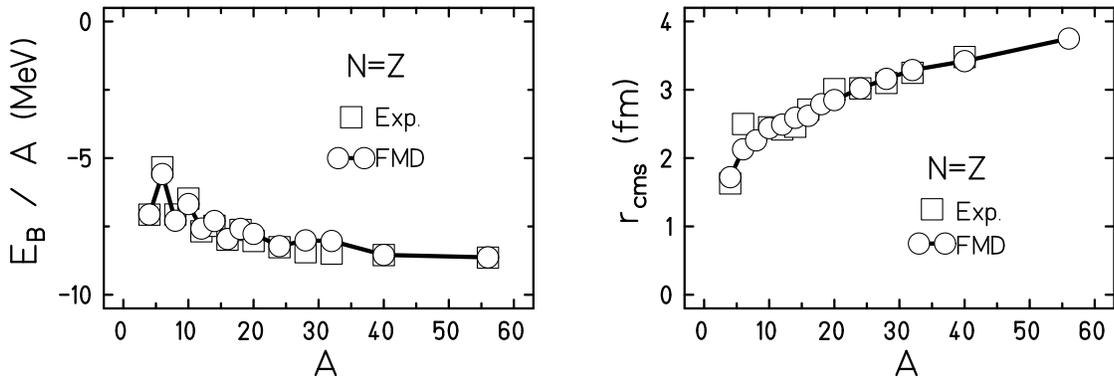


Abbildung 5.1: Bindungsenergien und Radien für Kerne mit $N = Z$. Die experimentellen Daten sind durch Quadrate, die Ergebnisse der FMD durch Kreise dargestellt. Die Linie soll lediglich das Auge leiten.

Abbildung 5.1 zeigt die Bindungsenergien und Radien der symmetrischen Kerne mit gleicher Protonen- und Neutronenzahl. Sowohl die Energien als auch die Radien stimmen sehr gut mit den experimentellen Daten überein.

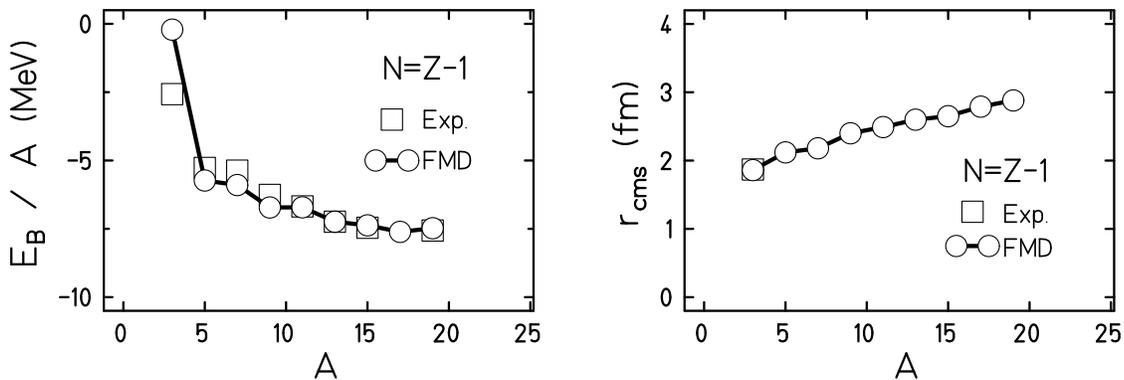


Abbildung 5.2: Bindungsenergien und Radien für Kerne mit $N = Z - 1$.

Für die Kerne mit $N = Z - 1$ erkennt man in Abbildung 5.2 eine Abweichung beim ^3He . Diese Abweichung resultiert daraus, daß kleine Kerne einen Großteil ihrer Bindung aus dem exponentiell abfallenden Schwanz ihrer Wellenfunktion gewinnen. Die gaußförmig abfallenden Einteilchenwellenfunktionen der Fermionischen Molekular-dynamik sind für diese kleinen Systeme ($A < 4$) nicht geeignet. Für höhere Massen werden die experimentellen Bindungsenergien jedoch gut wiedergegeben.

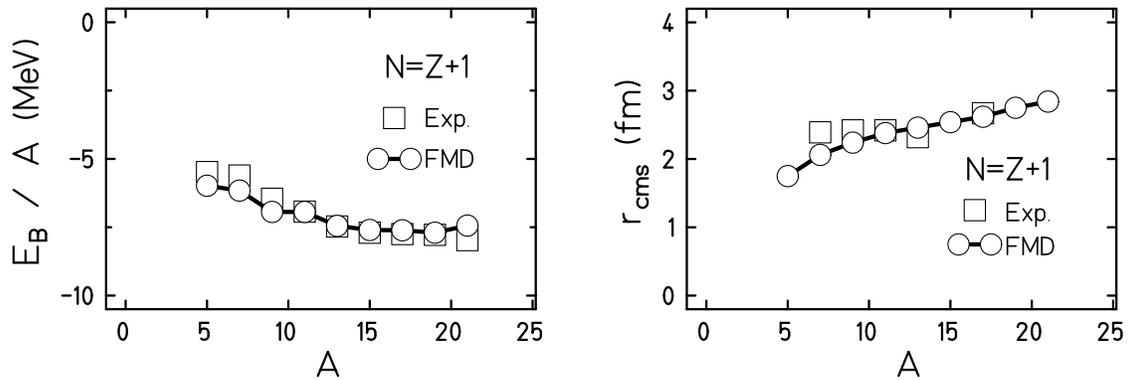


Abbildung 5.3: Bindungsenergien und Radien für Kerne mit $N = Z + 1$.

Für Massen $A < 10$ zeigt die Verteilung Abb. 5.2 ebenso wie die der Kerne mit $N = Z + 1$ (Abb. 5.3) eine kleine systematische Abweichung zu stärker gebundenen Kernen hin. Auch weichen die experimentellen Radien für Lithium von den berechneten ab. Hierbei ist jedoch nicht klar, ob nicht die experimentellen Radien etwas zu groß sind, sie scheinen auch nicht in das systematische Verhalten der Ladungsradien zu passen.

Abbildung 5.4 zeigt die Bindungsenergien der Isotope des Kohlenstoffs ($Z = 6$) und des Magnesiums ($Z = 12$).

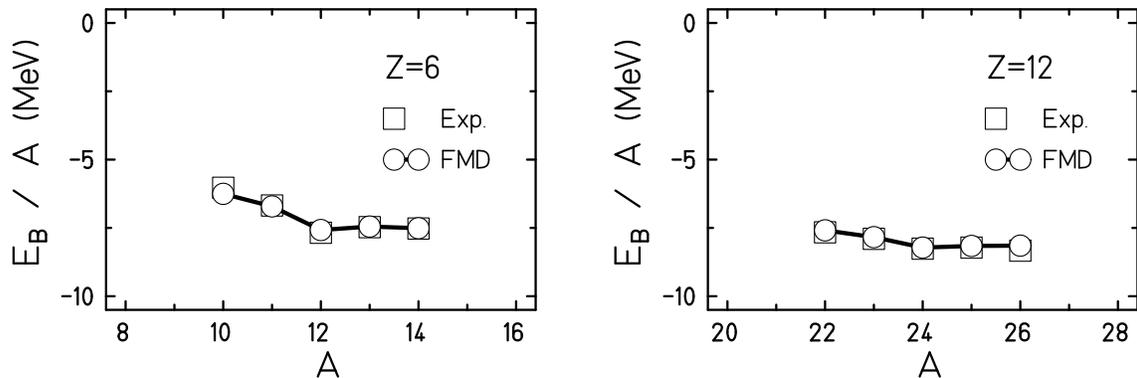


Abbildung 5.4: Bindungsenergien der Kohlenstoff- und Magnesiumisotope.

Man sieht, daß die Bindungsenergien von ^{10}C bis ^{14}C und ^{22}Mg bis ^{26}Mg die experimentell bestimmten gut reproduzieren.

Auch für einen Schnitt entlang konstanter Massenzahl A ergibt sich eine gute Beschreibung der experimentellen Bindungsenergien. In Abbildung 5.5 sind dazu die Energien der $A = 24$ - und $A = 27$ -Isobare dargestellt.

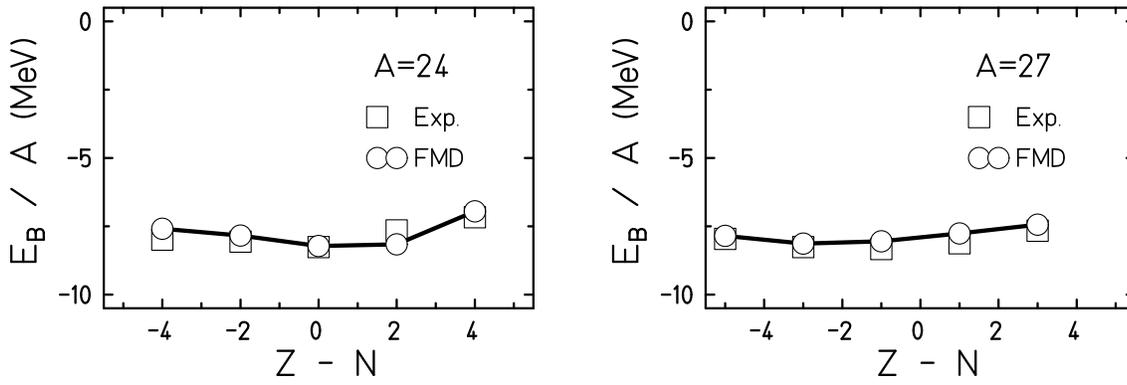


Abbildung 5.5: Bindungsenergien der $A = 24$ - und $A = 27$ -Isobare.

Die in den Abbildungen 5.1–5.5 dargestellte sehr gute Übereinstimmung der experimentellen Bindungsenergien mit denen, die sich in der Fermionischen Molekular-dynamik ergeben, ist auf den ersten Blick verwunderlich. Schließlich unterscheidet sich die effektive Wechselwirkung in der Zweiteilchennäherung (Gleichungen (4.121) und (4.120)) kaum von der effektiven Wechselwirkung V_2 von Volkov [49], insbesondere ist die Austauschmischung gleich. Von der Volkovschen effektiven Wechselwirkung ist aber bekannt, daß sie schwere Kerne überbindet [5]. So liegt die Bindungsenergie für ^{16}O schon bei $8.8 A$ MeV, mit steigender Masse wird die Abweichung immer größer.

Der Grund für die Sättigung bei Verwendung der Hamiltonfunktion (4.118) ist darin zu sehen, daß durch die unitäre Korrelation nicht nur die Wechselwirkung verändert wird, sondern auch die kinetische Energie. Die Zweiteilchenterme der kinetischen Energie bewirken die Sättigung der Bindungsenergie. Anhand der Gleichung (4.98) kann man erkennen, daß die Zweiteilchenterme der korrelierten kinetischen Energie auf eine Abstoßung führen, für die

$$\mathcal{T}_{\text{HC}}(Q) \propto k_F^2 A^2 \quad (5.3)$$

gilt. Das bedeutet aber nichts anderes, als daß diese Terme die der anziehenden effektiven Wechselwirkung kompensieren.

Diese Eigenschaft überträgt sich auch auf Kernmaterie, für die die unkorrelierte kinetische Energie pro Teilchen mit k_F^2 zur Gesamtenergie beiträgt. Die im wesentlichen anziehende effektive Wechselwirkung überwiegt, da ihr Beitrag zur Gesamtenergie pro Teilchen proportional der Dichte, also k_F^3 ist, den Term der unkorrelierten kinetischen Energie. Die abstoßenden Zweiteilchenterme der kinetischen Energie, die pro Teilchen proportional zu k_F^5 anwachsen (siehe (4.103)), verhindern, daß mit steigender Kernmateriedichte die Bindungsenergie pro Teilchen immer weiter wächst.

5.2 Von Fusion bis Multifragmentation

Nachdem die Kerngrundzustände gefunden und ihre wesentlichen Eigenschaften bestimmt sind, können jetzt Reaktionen zwischen ihnen untersucht werden. Die Bewegungsgleichungen der Dynamik ergeben sich aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip (2.1), wie dies im Abschnitt 2.1 dargestellt ist. Auch bei Verwendung korrelierter Versuchszustände behalten die Bewegungsgleichungen ihre Gestalt, an die Stelle des Hamiltonoperators tritt lediglich der effektive Hamiltonoperator. Dies ist ja gerade einer der Vorteile eines unitären und zustandsunabhängigen Korrelationsoperators.

Die Bewegungsgleichungen lauten damit

$$\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu}(Q(t)) \dot{q}_{\nu} = -\frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \langle Q(t) | \tilde{H}_{\text{eff}} | Q(t) \rangle. \quad (2.5''''')$$

$\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q(t))$ ist die in den Gleichungen (2.6) und (2.34) definierte schiefsymmetrische Matrix. Da der Korrelationsoperator $\tilde{\mathcal{C}}$ nicht von der Zeit abhängt, ändert sich $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q(t))$ beim Übergang vom unkorrelierten Versuchszustand $|Q(t)\rangle$ zum korrelierten Versuchszustand $\tilde{\mathcal{C}}|Q(t)\rangle$ nicht. Die Matrix $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q(t))$ spiegelt die geometrische Struktur der Parametermannigfaltigkeit wider, wie sie durch den antisymmetrischen Versuchszustand gegeben ist. Auf diese Weise überträgt sich das Pauliprinzip auf die Parametertrajektorien, die sich so verhalten, als würden virtuelle Kräfte in einem gekrümmten Raum wirken.

Die Bewegungsgleichungen der Fermionischen Molekulardynamik sind nicht linear. Aus diesem Grund kann es im Verlauf der Kern–Kern–Kollision zu großen Fluktuationen kommen. Das Ergebnis einer Reaktion hängt empfindlich von den Anfangsbedingungen ab. Innerhalb des Ereignisensembles (Abschnitt 2.7) sind bei einem Stoßparameter und einer Energie ganz unterschiedliche Endzustände zu beobachten. Dieses Verhalten entspricht den experimentellen Befunden.

Der Einfluß der kurzreichweitigen Korrelationen auf die Bewegungsgleichungen geschieht über die Hamiltonfunktion $\mathcal{H}(Q(t)) = \langle Q(t) | \tilde{\mathcal{C}}^{\dagger} \tilde{H} \tilde{\mathcal{C}} | Q(t) \rangle$, die die kurzreichweitige Abstoßung der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung enthält. Wie in den folgenden Beispielen demonstriert wird, führt diese Abstoßung zu harten Stößen der Nukleonen mit hohen Impulsüberträgen. Bei zentralen Stößen ist ein Abbremsen der Kerne zu beobachten. Dabei entsteht ein Fluß von Nukleonen und Fragmenten senkrecht zur Einschußrichtung. In einem Modell ohne kurzreichweitige Abstoßung sind diese Phänomene nicht zu beobachten.

5.2.1 Tief inelastische Reaktionen von ^{19}F und ^{27}Al

Als erstes Beispiel wird die tief inelastische Reaktion von ^{19}F und ^{27}Al bei einer Energie von $E_{\text{Lab}} = 5.9 A \text{ MeV}$ untersucht. Zu dieser Reaktion liegen aktuelle experimentelle Daten [57] und verschiedene theoretische Berechnungen [58, 59, 60] vor.

Da die Untersuchung aus einer frühen Periode dieser Arbeit stammt, wird eine andere Parametrisierung der Hamiltonfunktion verwendet, die im Anhang, Gleichung C.23 ff, angegeben ist. Die physikalischen Eigenschaften dieser Hamiltonfunktion sind jedoch den bisher diskutierten sehr ähnlich.

Die Reaktion von ^{19}F und ^{27}Al bei einer Energie von 5.9 MeV pro Teilchen ist entsprechend der niedrigen Energie durch drei Prozesse gekennzeichnet. Für Stoßparameter $b \lesssim 5$ fm ist die Reaktion vollständig von der Fusion der Ausgangskerne dominiert. Erst bei peripheren Stößen mit größeren Stoßparametern kommt es zu unvollständigen Fusionen und tief inelastischen Reaktionen. Letztere sind der Gegenstand der experimentellen Untersuchungen.

Tief inelastische Reaktionen werden oft durch doppelt differentielle Wirkungsquerschnitte charakterisiert. Die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts von der gesamten kinetischen Energie TKE und dem Streuwinkel eines Reaktionsproduktes θ_{CM} im Schwerpunktssystem bezeichnet man als $d^2\sigma/(d\theta_{\text{CM}}d\text{TKE})$. Die Darstellung des Wirkungsquerschnittes als Funktion der kinetischen Energie TKE und der Ladung Z des einen Reaktionsproduktes wird Diffusionsplot genannt.

Ein charakteristisches Phänomen tief inelastischer Reaktionen ist das Kreisen der Reaktionspartner umeinander. Nach der Kontaktzeit lösen sie sich wieder und erreichen den Detektor. In theoretischen Rechnungen kann dabei zwischen Streuung in positive und negative Winkel θ unterschieden werden, wie Abbildung 5.6 veranschaulicht.

Experimentell ist die Unterscheidung positiver und negativer Streuwinkel sehr schwierig, und nur der Betrag des Winkels wird gemessen. Aus der Form des doppelt differentiiellen Wirkungsquerschnitts $d^2\sigma/(d\theta_{\text{CM}}d\text{TKE})$ kann aber auf die Existenz negativer Streuwinkel geschlossen werden.

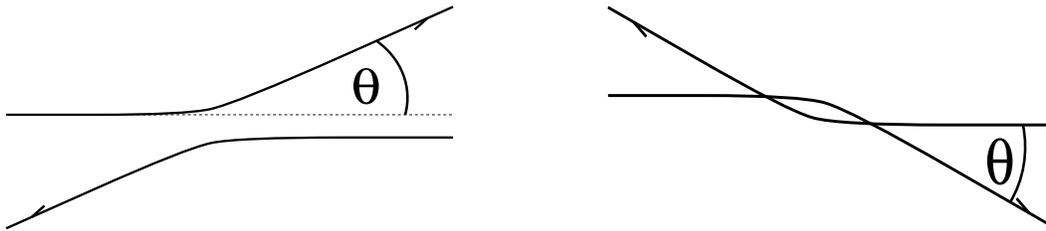


Abbildung 5.6: Definition des Winkels θ , links: Streuung in positive Winkel, rechts: Streuung in negative Winkel.

Abbildung 5.7 zeigt den Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(d\theta_{\text{CM}}d\text{TKE})$ als Contourlinien, wie er experimentell bestimmt wurde (linke Graphik) und wie er in der Fermionischen Molekulardynamik durch Simulation von 300 Reaktionen im Stoßparameterbereich $4.8\text{fm} \leq b \leq 7.5\text{fm}$ und $b = 8.0, 9.0, 10.0\text{fm}$ ermittelt wurde (rechte Graphik). Die Symbole geben die Ergebnisse anderer Modelle wieder [58, 59, 60].

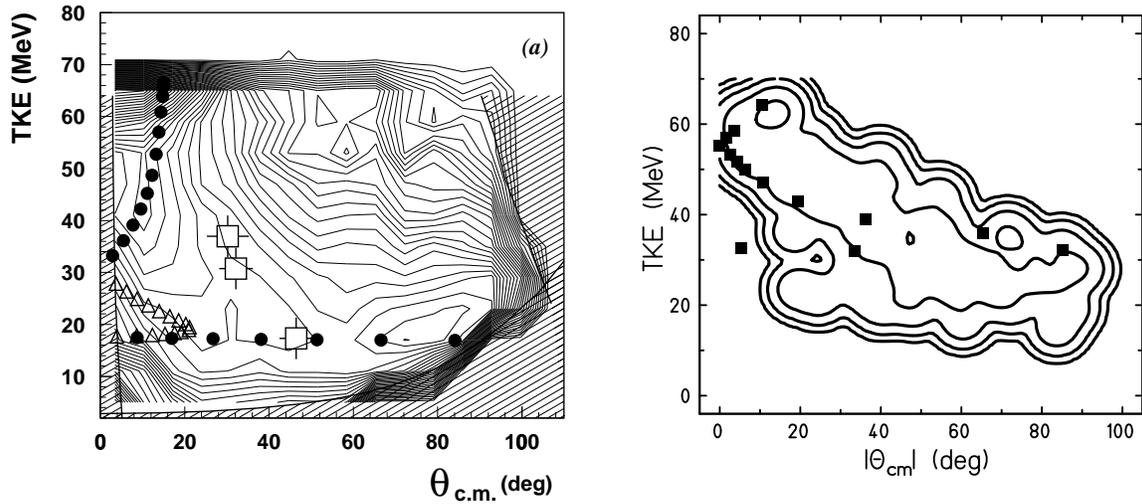


Abbildung 5.7: $^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: der doppelt differenzielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(d\theta_{\text{CM}}d\text{TKE})$ als Funktion des Betrages $|\theta_{\text{CM}}|$ und TKE. Links: logarithmische Repräsentation der experimentellen Ergebnisse [57] mit einem Verhältnis der Höhen aufeinanderfolgender Linien von 1.93, Kreise und Dreiecke – Parametrisierung der Ablenkfunktion [58], offene Quadrate – Nordheim–Vlasov [59]. Rechts: logarithmische Repräsentation der Ergebnisse der FMD-Simulation mit einem Faktor von 10 zwischen benachbarten Höhenlinien, volle Quadrate – HI-COL [60].

Die rechte Graphik in Abb. 5.7 ist entstanden, nachdem die Ergebnisse der Simulation den experimentellen Bedingungen, $3^\circ \leq \theta_{\text{Lab}} \leq 54^\circ$, angepaßt worden sind. Die einzelnen Punkte $(\theta_{\text{CM}}, \text{TKE})$ gehen als Gaußsche Verteilungen dem Stoßparameter entsprechend gewichtet mit $\Delta|\theta_{\text{CM}}| = 1.9^\circ$ und $\Delta\text{TKE} = 1.6 \text{ MeV}$ in die Graphik ein. Die Breite der Verteilungen dient dazu, die Form des Wirkungsquerschnittes zu glätten.

Man erkennt, daß die Fermionische Molekulardynamik das generelle Verhalten richtig wiedergibt.

Für große Stoßparameter tritt lediglich Coulombstreuung auf, d.h., die Reaktionspartner erreichen den Detektor mit annähernd der ursprünglichen kinetischen Energie. In der Graphik ist dies bei $|\theta_{\text{CM}}| \approx 15^\circ$ und $\text{TKE} \approx 65 \text{ MeV}$ zu sehen. Verringert sich der Stoßparameter, spüren die Kerne nicht mehr allein die abstoßende Coulombkraft, sondern auch die anziehende Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung. Der bisher positive Winkel θ_{CM} wird kleiner, TKE nimmt aufgrund gegenseitiger Anregung ebenfalls ab. Ist der Stoßparameter klein genug, tritt Streuung in negative Winkel auf. In Abbildung 5.8 ist dieser Verlauf deutlich zu sehen. Gleichzeitig berühren sich die Kerne stärker und länger und verlieren deshalb weiter kinetische Energie, die sich in Anregungsenergie umwandelt.

Rechnungen mit einer Nordheim–Vlasov–Transporttheorie [59, 57] verneinen die Streuung zu negativen Winkeln (offene Quadrate in Abb. 5.7 links).

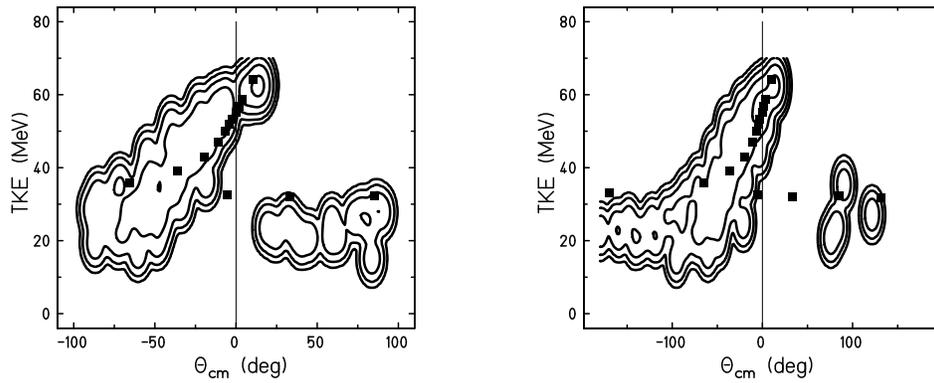


Abbildung 5.8: $^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: der doppelt differenzielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(d\theta_{\text{CM}}d\text{TKE})$ als Funktion von θ_{CM} und TKE. Man erkennt deutlich die Streuung in negative Winkel.

Links: Resultat bei Verwendung der experimentellen Bedingungen, rechts: Resultat bei Verwendung der Bedingung $Z \leq 11$.

Irgendwann haften die beiden Kerne solange zusammen, daß der beobachtete Reaktionspartner nach der Ablösung wieder unter einem positiven Winkel erscheint. Da für lange Kontaktzeiten, in denen sich die Kerne wenigstens einmal umeinander drehen, die Wahrscheinlichkeit für alle θ_{CM} gleich wird, bildet sich ein in θ_{CM} gleichverteilter Anteil des Wirkungsquerschnittes heraus, der bei der Viola-Energie vollständig relaxierter Stöße von etwa $\text{TKE} \approx 20$ MeV liegt.

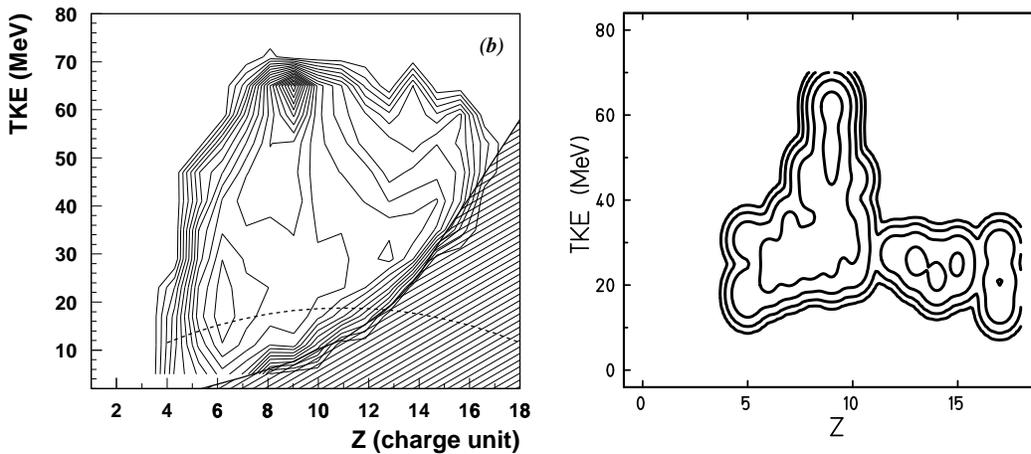


Abbildung 5.9: $^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: der doppelt differenzielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dZ, d\text{TKE})$ als Funktion von Z und TKE. Links: logarithmische Repräsentation der experimentellen Ergebnisse mit einem Verhältnis der Höhen aufeinanderfolgender Linien von 1.93, rechts: logarithmische Repräsentation der Ergebnisse der FMD-Simulation mit einem Faktor von 10 zwischen benachbarten Höhenlinien.

Eine weitere Möglichkeit, tief inelastische Reaktionen zu beschreiben, ergibt sich

durch die Darstellung der Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes von der kinetischen Energie TKE und der Ladung Z eines Reaktionsproduktes. Dieser Diffusionsplot ist in Abbildung 5.9 zu sehen. In der linken Graphik sind die experimentellen Resultate, in der rechten die der FMD aufgetragen.

In der Graphik der experimentellen Ergebnisse ist durch den schattierten Bereich zusätzlich die Energieschwelle des Detektorsystems angegeben. Die FMD-Daten sind ohne Berücksichtigung dieser Schwelle gezeichnet.

Beide Graphiken zeigen für $Z < 10$ das typische Verhalten einer Verbreiterung der Verteilung mit zunehmender dissipierter Energie. In Ref. [57] wird außerdem darauf verwiesen, daß die Verschiebung des Maximums von $Z = 9$ zu $Z = 8$ auf Schalenefekte hindeutet. Diese Verschiebung kann durch die FMD-Simulation nicht erhärtet werden.

Zusätzlich zu den experimentellen Daten kann man in der rechten Graphik für $Z > 10$ Reaktionsprodukte von unvollständigen Fusionen sehen. Bis $Z = 13$ tragen sowohl tief inelastische Reaktionen als auch unvollständige Fusionen zum Wirkungsquerschnitt bei, ab $Z = 14$ handelt es sich auf jeden Fall um unvollständige Fusion (eventuell auch Protonentransfer).

Filtert man aus den Reaktionen alle Reaktionsprodukte mit $Z \geq 12$ heraus, so erhält man zusätzlich zu den Beiträgen der tief inelastischen Reaktionen und der unvollständigen Fusionen auch noch die Verdampfungsrestkerne aus Fusionen, die im Diffusionsplot bei kinetischen Energien nahe Null und großen Ladungszahlen $Z \approx 20$ zu finden sind. Abbildung 5.10 zeigt diese Ereignisse.

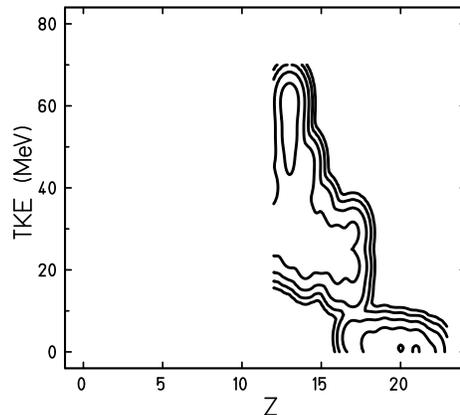


Abbildung 5.10: $^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: der doppelt differenzielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dZ dTKE)$ als Funktion von Z und TKE für $Z \geq 12$. Man erkennt deutlich die Verdampfungsrestkerne um $Z \approx 20$.

Es zeigt sich, daß die Fermionische Molekulardynamik in der Lage ist, die generelle Eigenschaften der Reaktion zu erklären. Sie gibt darüber hinaus aber auch die Größenordnung der Fluktuationen richtig wieder.

Die Stärke der Fluktuationen wird durch die folgende Abbildung 5.11 verdeutlicht.

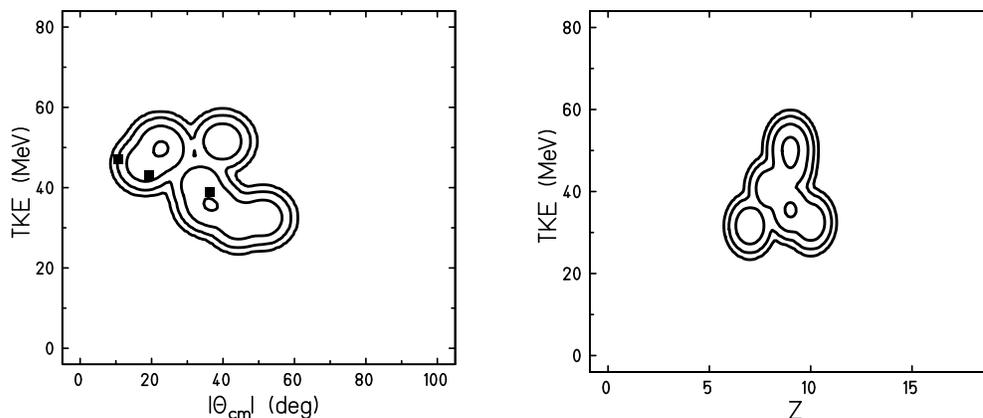


Abbildung 5.11: $^{19}\text{F}-^{27}\text{Al}$: $d^3\sigma/(db d\theta_{\text{CM}} d\text{TKE})$ und $d^3\sigma/(db dZ d\text{TKE})$ für 10 Reaktionen bei $b = 6.7\text{fm}$. Die Quadrate (HICOL [60]) gehören zu einem Stoßparameterintervall von $6.65\text{fm} - 6.75\text{fm}$.

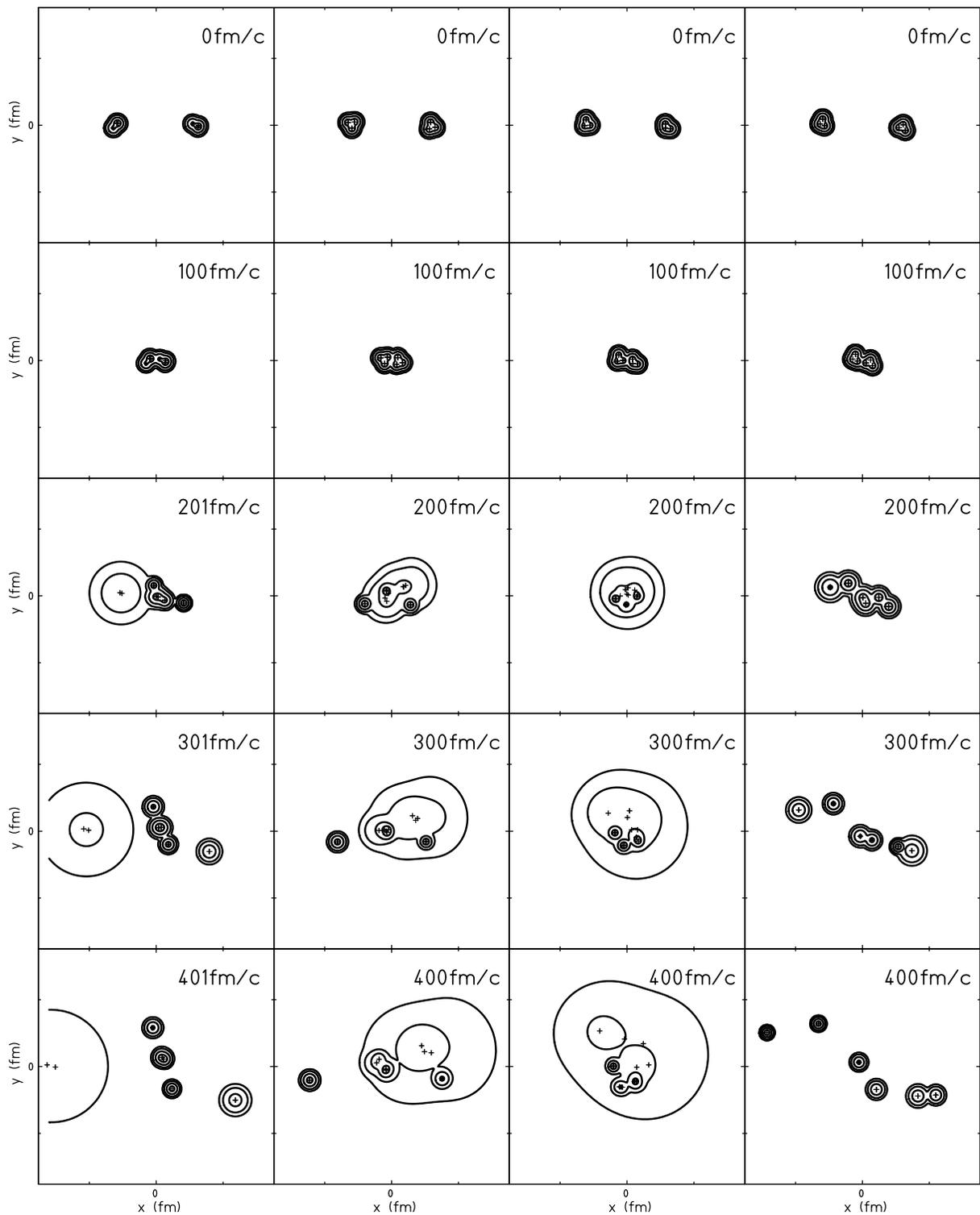
In der Abbildung ist auf der linken Seite der dreifach differentielle Wirkungsquerschnitt $d^3\sigma/(db d\theta_{\text{CM}} d\text{TKE})$ und auf der rechten Seite $d^3\sigma/(db dZ d\text{TKE})$ für 10 Reaktionen bei einem einzigen Stoßparameter von $b = 6.7\text{fm}$ aufgetragen. Die einzelnen Reaktionen unterscheiden sich nur durch die Orientierung der Reaktionspartner.

5.2.2 Fragmentationsreaktionen von ^{12}C und ^{12}C

Die Schwerionenreaktion von ^{12}C und ^{12}C bei einer Einschußenergie im Laborsystem von $E = 28.7 \text{ A MeV}$ ist eher eine Reaktion relativ leichter Kerne. Sie wird in einem Energiebereich untersucht, in dem schon Fragmentation auftritt. Der größte Teil des Wirkungsquerschnitts fällt dabei jedoch der Produktion von Alphateilchen zu. Im Experiment erreicht der Wirkungsquerschnitt für die Bildung von Alphateilchen einen Wert von 1752 mbarn [61].

Stellt man in Rechnung, daß die Reaktionen für einen Stoßparameter von $b = 4.5 \text{ fm}$, der in etwa dem Zweifachen des Ladungsradius entspricht, abbricht und nimmt man zusätzlich einmal an, daß nur Alphateilchen produziert würden, so käme man auf einen Wirkungsquerschnitt von ungefähr 3800 mbarn . Dabei ist noch nicht berücksichtigt, daß die experimentelle Apparatur Einschränkungen unterliegt ($4^\circ \leq \theta_{\text{Lab}} \leq 36^\circ$, $E_{\text{Lab}}(^4\text{He}) \geq 20 \dots 30\text{MeV}$) [61].

Aus diesem sehr großen Anteil, den die Alphateilchenproduktion im Vergleich zu anderen Prozessen einnimmt, kann man schließen, daß der Kohlenstoffkern in guter Näherung als ein aus drei Alphateilchen bestehendes System betrachtet werden kann, so daß man davon sprechen kann, daß die Alphateilchen in der Reaktion schon vorformiert sind. In der Fermionischen Molekulardynamik ist diese intrinsische Struktur des Grundzustandes deutlich ausgeprägt.



$b = 0.25\text{fm}$ $b = 0.75\text{fm}$ $b = 1.25\text{fm}$ $b = 1.75\text{fm}$

Abbildung 5.12: $^{12}\text{C}-^{12}\text{C}$ Reaktionen bei verschiedenen Stoßparametern als Contourplot der Einteilchendichte im Ortsraum. Die x - und y -Achsen erstrecken sich jeweils über 80fm.

Abbildung 5.12 zeigt vier ausgewählte Reaktionen bei unterschiedlichen Stoßparametern für Zeiten zwischen $t = 0$ fm/ c und $t = 400$ fm/ c . In jeder dieser Reaktionen werden Alphateilchen gebildet. Es entstehen jedoch auch Fragmente und freie Nukleonen, die in den Contourplots als ausgedehnte Verteilungen zu erkennen sind, da freie Einteilchenwellenpakete im Ort auseinanderlaufen. Weil das System klein ist, kommt es nicht zur Bildung einer langlebigen, zentralen, heißen Quelle. Vielmehr geht die Reaktion sehr schnell vonstatten.

Da die Alphaclusterstruktur der Kohlenstoffkerne durch die zentrale Wechselwirkung, die nur einen Ortsaustausch enthält (4.121), nicht gebrochen wird, bleibt die Alphaclusterstruktur im Verlauf der Zeitentwicklung im wesentlichen erhalten. Für eine bessere Beschreibung der Fragmentverteilung ist deshalb eine Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung, die Spin-Bahn- und Tensorterme einschließt und damit die Alphasymmetrie bricht, unumgänglich. Die Alphaclustersymmetrie wird deshalb in den folgenden Reaktionen durch kleine Auslenkungen der Nukleonen aus ihren Ruhelagen explizit gebrochen.

Abbildung 5.13 zeigt den totalen Wirkungsquerschnitt für die Produktion verschiedener Isotope in einem Stoßparameterbereich von $0 \text{ fm} \leq b \leq 5.25 \text{ fm}$. Man erkennt, daß das zweithäufigste Reaktionsprodukt ^{12}C im Experiment lediglich den siebzehnten Teil des Wirkungsquerschnittes besitzt, den das Alphateilchen erreicht.

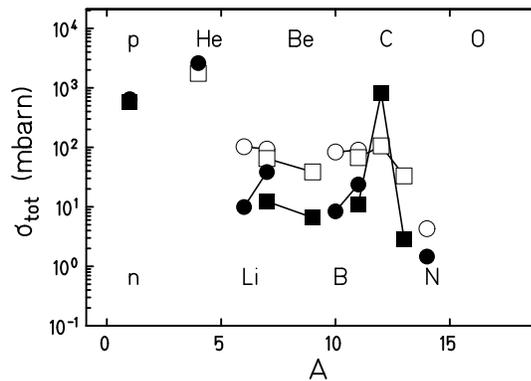


Abbildung 5.13: ^{12}C – ^{12}C : Totaler Wirkungsquerschnitt für die Produktion einzelner Isotope. Die offenen Symbole geben die experimentellen Resultate wieder [61], die vollen Symbole das ungefilterte Ergebnis der FMD-Simulation. Verbundene Symbole gehören zum selben Element.

Man erkennt, daß die FMD–Simulationen, die bei 1000 fm/ c abgebrochen werden, die Wirkungsquerschnitte nicht in voller Genauigkeit wiedergeben können. Das hat verschiedene Ursachen. Die erste liegt in der schon erwähnten Struktur der verwendeten Wechselwirkung, die die Bildung von Alphaclustern bevorzugt. Das explizite Brechen dieser Symmetrie im Grundzustand verhindert nicht, daß die Wechselwirkung im Zeitverlauf versucht, diese Symmetrie zu restaurieren. Die Wechselwirkung muß

um die symmetriebrechenden Terme der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung erweitert werden.

Eine weitere Ursache, die sich insbesondere auf die Abweichungen bei den Isotopen mit Massenzahlen kleiner Zwölf bezieht, liegt in den unterschiedlichen Zeitskalen der in der Reaktion ablaufenden Prozesse. Die Fragmentation des Systems, die bei dieser Energie in Zeiten von etwa 200 fm/ c abläuft, kann innerhalb der Simulationszeit gut beschrieben werden. Die Abregung der resultierenden angeregten Fragmente geschieht jedoch über einen Zeitraum von mehreren Tausend fm/ c und liegt damit außerhalb der Simulationszeit. Die Fermionische Molekulardynamik ist in der Lage die Abregung angeregter Kerne durch Nukleonenevaporation zu beschreiben, für angeregte ^{12}C -Kerne konnte in Simulationsrechnungen bis 5000 fm/ c gezeigt werden, daß je nach Anregung die unterschiedlichsten Restkerne mit $A < 12$ entstehen können. In den Modellen der QMD und der AMD werden diese im Vergleich zur Fragmentation langsamen Prozesse durch einen an die dynamische Simulation angeschlossenen Zerfallscode simuliert.

5.2.3 ^{40}Ca – ^{40}Ca bei $E_{\text{Lab}} = 35 \text{ A MeV}$

Als Abschluß und Ausblick dieses Kapitels soll eine Reaktion untersucht werden, die mit verschiedenen Modellen analysiert worden ist und dadurch mehrere Fragen aufgeworfen hat [62]. Es handelt sich bei dieser Reaktion um die Schwerionenkollision von ^{40}Ca und ^{40}Ca bei einer Einschußenergie von $E = 35 \text{ A MeV}$ im Laborsystem.

Die Reaktion ist mit den Modellen der Quantenmolekulardynamik [11], dem statistischen Modell GEMINI [29], dem Modell der simultanen Multifragmentation [28] sowie der Antisymmetrischen Molekulardynamik [10, 11, 12] untersucht worden. Sie eignet sich deshalb hervorragend, um mit diesen Modellen zu vergleichen.

Ein kontroverser Punkt der Reaktionsbeschreibung ist die Ausbeute an Protonen, Alphateilchen und Fragmenten (IMF). Insbesondere zeigt sich keines der zitierten Modelle in der Lage, die Häufigkeitsverteilung der Alphateilchen wiederzugeben, die ein Mittel von 5.2 Alphateilchen pro Reaktion aufweist. Dies hat verschiedene Ursachen, von denen hier nur zwei angedeutet werden sollen. Im Fall der QMD, die einen Produktzustand als Versuchszustand verwendet, kommt es wegen der fehlenden Antisymmetrisierung und der Gleichsetzung von Protonen und Neutronen als Nukleonen nicht zur Ausbildung von Schaleneffekten im Grundzustand der Kerne, die sich in der Alphaclusterstruktur äußern. Im Fall der AMD, deren Versuchszustand eine Slaterdeterminante ist, kann man diese Schaleneffekte in den Grundzuständen beobachten. In der Dynamik können sich freie Alphateilchen jedoch nicht bilden, da die Bewegungsgleichungen auf feste Breiten der Einteilchenwellenpakete eingeschränkt sind. Dieser Freiheitsgrad ist aber für die Beschreibung der Nukleonenevaporation und von Fragmentation unerlässlich [5, 8]. Um diesen Mangel zu kompensieren, werden im Modell der Antisymmetrisierten Molekulardynamik drei zusätzliche Mechanismen konstruiert. Der kurzreichweitige Anteil der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung wird durch

eine Langevin-Kraft simuliert, die zu hohen Impulsüberträgen führen soll. Durch eine ständige Korrektur der Nullpunktenergie des Schwerpunktes soll die Bildung von Fragmenten erleichtert werden. Zusätzlich wird eine stochastische Kraft eingeführt, die nur am Kernrand wirkt und so die Nukleonenevaporation verbessern soll [12]. Mit diesem Modell, das als AMD-V bezeichnet wird, können die Multiplizitäten letztendlich beschrieben werden.

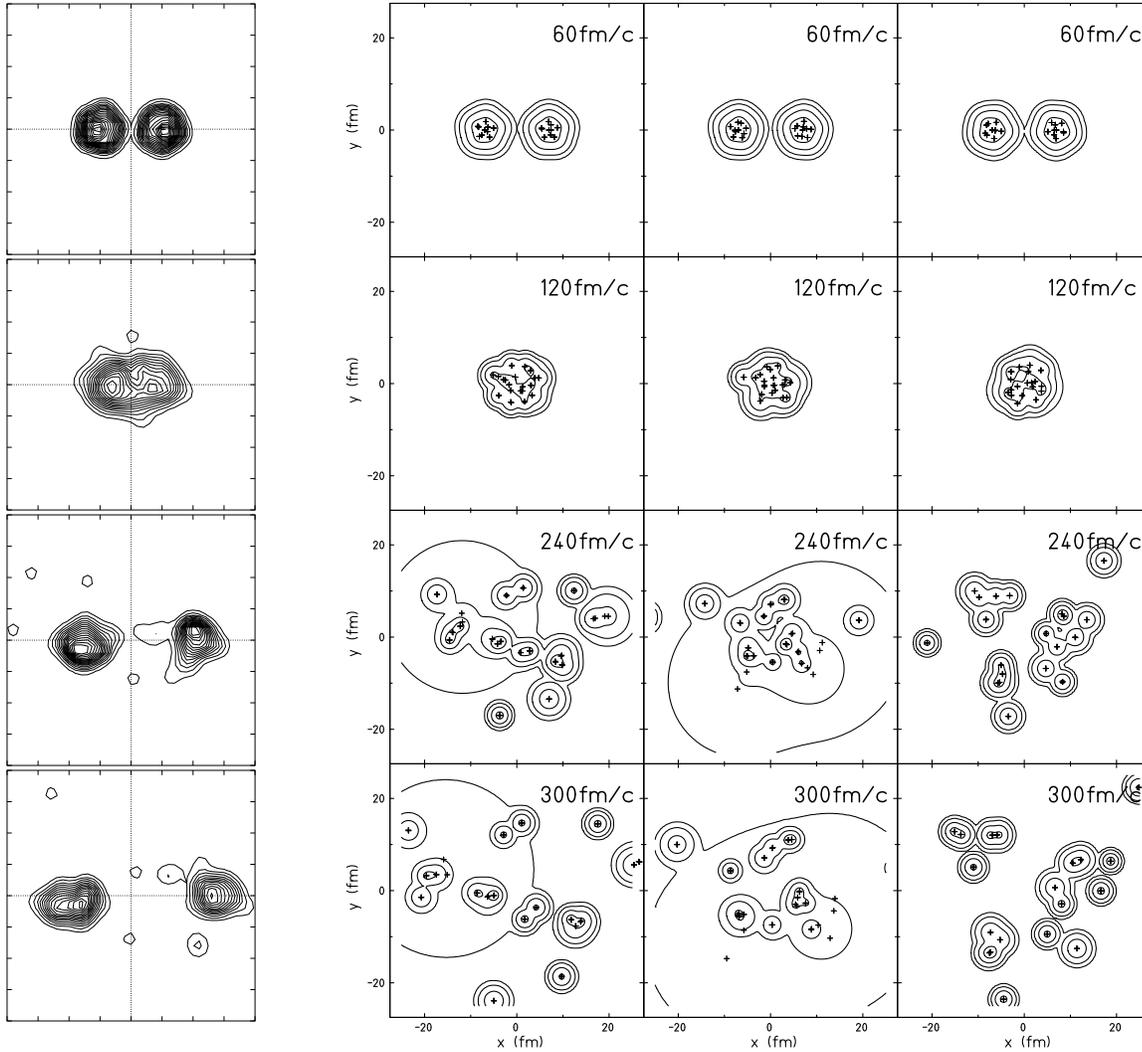


Abbildung 5.14: ^{40}Ca - ^{40}Ca Reaktionen bei einem Stoßparameter von $b = 0$ fm, links: Zeitentwicklung in der Antisymmetrisierten Molekulardynamik für $t = 0, 60, 180, 240$ fm/c mit Achsenlängen von jeweils 80 fm, rechts: Zeitentwicklung in der Fermionischen Molekulardynamik mit den gleichen zeitlichen Abständen.

Die Abbildung 5.14 demonstriert, daß es möglich ist, den Reaktionsverlauf und die dabei zu beobachtenden Phänomene durch den Ansatz eines Versuchszustandes zu

beschreiben, der die relevanten Freiheitsgrade enthält. Dieser Versuchszustand der Fermionischen Molekulardynamik enthält sowohl die für Evaporation und Fragmentation erforderlichen zeitabhängigen Parameter der Breite als auch die für die Beschreibung der Abbremsung der Reaktionspartner notwendigen kurzreichweitigen Korrelationen. Jedoch sind auch in der Fermionischen Molekulardynamik noch Abweichungen der berechneten Fragmentverteilungen von den experimentellen zu beobachten (siehe Abbildung 5.13), insbesondere ist die Alphaclusterstruktur in einigen Grundzuständen zu dominant ausgeprägt. Es ist aber der falsche Weg, diese Abweichungen durch Hinzufügen willkürlicher Mechanismen korrigieren zu wollen. Für die Fermionische Molekulardynamik bedeutet das, daß auch die Terme der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung berücksichtigt werden müssen, die eine Brechung der Alphaclustersymmetrie bewirken.

In der linken Spalte ist der Zeitverlauf eines typischen Ereignisses der Antisymmetrisierten Molekulardynamik (ohne stochastische Kraft am Kernrand) als Contourplot der Einteilchendichte im Ortsraum abgebildet [12]. Die drei rechten Spalten zeigen FMD–Simulationen bei demselben Stoßparameter.

Vergleicht man die linke Spalte mit den drei anderen, so erkennt man, daß die Kalziumkerne im Modell der Antisymmetrisierten Molekulardynamik im wesentlichen ungehindert durcheinander hindurch fliegen. Sie sind zwar angeregt und evaporieren einige Nukleonen, jedoch kommt es trotz kurzreichweitiger Zufallskraft und Schwerpunktskorrektur weder zum Abbremsen der Kerne noch zur Fragmentation. Die drei rechten Spalten zeigen Simulationen im Modell der Fermionischen Molekulardynamik bei demselben Stoßparameter von $b = 0$ fm. Hier kommt es zur Ausbildung eines komprimierten und hochangeregten Nukleonensystems, das im weiteren Zeitverlauf fragmentiert. Es entstehen dabei freie Nukleonen (breite Verteilungen), Alphateilchen und Fragmente bis zum Kohlenstoff.

Zukünftige Untersuchungen werden sich mit der statistischen Auswertung der Ca–Ca–Reaktionen befassen. Dazu ist jedoch ein großer numerischer Aufwand nötig, denn die Berechnung eines Ereignisses ($A = 80, t = 300$ fm/c) benötigt etwa 24 Stunden CPU–Zeit auf einer Workstation RS6000/590. Deshalb wird es in Zukunft auch darum gehen, die numerischen Methoden zeitlich zu optimieren. Ein Problem wird dabei aber immer bestehen bleiben, der numerische Aufwand ist wegen der Berechnung der Matrix $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q)$ proportional zu A^4 . Diese Eigenschaft resultiert direkt aus der Antisymmetrisierung des Versuchszustandes und kann, da die Antisymmetrisierung ein genuiner Bestandteil der Fermionischen Molekulardynamik ist, nicht verändert werden.

A. Grundlegende Formeln

A.1 Einteilchenwellenfunktion

Zwei äquivalente Darstellungen der Einteilchenwellenfunktion lauten:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | q(t) \rangle &= \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{b}(t))^2}{2a(t)} \right\} \otimes |\chi(t)\phi(t)\rangle \otimes |\xi\rangle \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{r}(t))^2}{2a(t)} + i\vec{p}(t) \cdot \vec{x} \right\} \otimes |\chi(t)\phi(t)\rangle \otimes |\xi\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Die komplexen Größen $\vec{b} = \vec{b}_R + i\vec{b}_I$ und $a = a_R + ia_I$ lassen sich nach folgenden Formeln in die reellen Größen \vec{r} und \vec{p} umwandeln:

$$\begin{aligned} \vec{b} &= \vec{r} + ia\vec{p} = \vec{r} - a_I\vec{p} + ia_R\vec{p} \\ \vec{r} &= \vec{b}_R + \frac{a_I}{a_R}\vec{b}_I \\ \vec{p} &= \frac{1}{a_R}\vec{b}_I \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Die Überlappmatrixelemente errechnen sich zu:

$$\langle q_k | q_l \rangle = \left(2\pi \frac{a_k^* a_l}{a_k^* + a_l} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{(\vec{b}_k^* - \vec{b}_l)^2}{2(a_k^* + a_l)} \right\} S_{kl} T_{kl} \quad (\text{A.3})$$

Dabei benötigt man die Spin- und Isospinüberlapps:

$$\begin{aligned} S_{kl} &= \langle \chi_k \phi_k | \chi_m \phi_m \rangle \\ &= \cos \frac{\chi_k}{2} \cos \frac{\chi_l}{2} + \sin \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \\ T_{kl} &= \langle \xi_k | \xi_m \rangle \\ &= 2 \left(\frac{1}{4} + m_t(k) m_t(l) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

In Impulsdarstellung lautet die Einteilchenwellenfunktion:

$$\langle \vec{k} | q \rangle = a^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} a \vec{k}^2 - i\vec{k} \cdot \vec{b} \right\} \otimes |\chi(t)\phi(t)\rangle \otimes |\xi\rangle \quad (\text{A.5})$$

A.2 Charakteristische Größen eines Wellenpaketes

normierter Einteilchenzustand:

$$\langle \vec{x} | q \rangle = (\pi a_R)^{-\frac{3}{4}} \exp \left\{ \frac{a_R}{2} \vec{p}^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{b})^2}{2a} \right\} \otimes |\chi\phi\rangle \otimes |\xi\rangle \quad (\text{A.6})$$

$$\langle \vec{k} | q \rangle = (\pi a_R)^{-\frac{3}{4}} a^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ \frac{a_R}{2} \vec{p}^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} a \vec{k}^2 - i\vec{k} \cdot \vec{b} \right\} \otimes |\chi\phi\rangle \otimes |\xi\rangle$$

mittlerer Ort:

$$\langle \vec{x} \rangle = \vec{r} \quad (\text{A.7})$$

Ortsunschärfe:

$$\langle \vec{x}^2 \rangle - \langle \vec{x} \rangle^2 = \frac{3}{2} \frac{|a|^2}{a_R} \quad (\text{A.8})$$

mittlerer Impuls:

$$\langle \vec{k} \rangle = \vec{p} \quad (\text{A.9})$$

Impulsunschärfe:

$$\langle \vec{k}^2 \rangle - \langle \vec{k} \rangle^2 = \frac{3}{2} \frac{1}{a_R} \quad (\text{A.10})$$

Unbestimmtheit:

$$\Delta x \Delta k = \frac{3}{2} \sqrt{1 - \frac{a_I^2}{a_R^2}} \quad (\text{A.11})$$

kinetische Energie:

$$\langle \hat{t} \rangle = \frac{1}{2m} \left[\frac{3}{2a_R} + \vec{p}^2 \right] \quad (\text{A.12})$$

Energie im harmonischen Oszillator:

$$\begin{aligned} \langle \hat{h} \rangle &= \frac{1}{2m} \left[\frac{3}{2a_R} + \vec{p}^2 \right] + \frac{1}{2} m\omega^2 \left[\frac{3|a|^2}{2a_R} + \vec{r}^2 \right] \\ &= \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{r}^2 + \frac{1}{2m} \frac{3}{2a_R} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{3|a|^2}{2a_R} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

A.3 Kinetische Energie

Erwartungswert der kinetischen Energie:

$$\langle \underline{T} \rangle = \sum_{k,l}^A \langle q_k | \underline{t} | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk}, \quad \underline{t} = \frac{\vec{k}^2}{2m} \quad (\text{A.14})$$

$$\langle q_k | \underline{t} | q_l \rangle = \frac{1}{2m_l} \left[\frac{3}{a_k^* + a_l} - \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right] \langle q_k | q_l \rangle$$

Ableitungen [8]:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \vec{b}_k^*} q_k | \underline{t} | q_l \right\rangle = -\frac{1}{2m} \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \left(\frac{5}{a_k^* + a_l} - \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \langle q_k | q_l \rangle, \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial a_k^*} q_k | \underline{t} | q_l \right\rangle &= \left[\frac{3}{2m} \frac{1}{a_k^* + a_l} \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_k^*} - \frac{5}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2m} \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_k^*} - \frac{7}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right] \langle q_k | q_l \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \phi_k} q_k | \underline{t} | q_l \right\rangle = -i \sin \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \frac{\langle q_k | \underline{t} | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial \chi_k} q_k | \underline{t} | q_l \right\rangle &= \frac{1}{2} \left(-\sin \frac{\chi_k}{2} \cos \frac{\chi_l}{2} \right. \\ &\quad \left. + \cos \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \right) \frac{\langle q_k | \underline{t} | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Erwartungswert von \underline{T}^2 :

$$\begin{aligned} \langle \underline{T}^2 \rangle &= \sum_{k,l}^A \langle q_k | \underline{t}^2 | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} \\ &\quad + \sum_{k,l,m,n}^A \langle q_k q_l | (\underline{t} \otimes \underline{t}) | q_m q_n \rangle (\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk}) \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned} \langle q_k | \underline{t}^2 | q_l \rangle &= \frac{1}{(2m_l)^2} \left[\left(\frac{3}{a_k^* + a_l} - \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{a_k^* + a_l} \left(\frac{3}{a_k^* + a_l} - 2 \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right] \langle q_k | q_l \rangle \end{aligned}$$

A.4 Äußerer harmonischer Oszillator

Erwartungswert des Potentials:

$$\langle \underline{V} \rangle = \sum_{k,l}^A \langle q_k | \underline{v} | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk}, \quad \underline{v} = \frac{1}{2} m\omega^2 \underline{\tilde{x}}^2 \quad (\text{A.20})$$

$$\langle q_k | \underline{v} | q_l \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \left[\frac{3a_k^* a_l}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{a_l \vec{b}_k^* + a_k^* \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right] \langle q_k | q_l \rangle$$

Ableitungen:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \vec{b}_k^*} q_k | \underline{v} | q_l \right\rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \left[\frac{2a_l}{a_k^* + a_l} \left(\frac{a_l \vec{b}_k^* + a_k^* \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right) \right] \langle q_k | q_l \rangle - \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \langle q_k | \underline{v} | q_l \rangle \quad (\text{A.21})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial a_k^*} q_k | \underline{v} | q_l \right\rangle &= \frac{1}{2} m\omega^2 \left[\frac{3a_l^2}{(a_k^* + a_l)^2} - 2 \left(\frac{a_l \vec{b}_k^* + a_k^* \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right) \frac{a_l (\vec{b}_k^* - \vec{b}_l)}{(a_k^* + a_l)^2} \right] \langle q_k | q_l \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \left[\frac{3}{a_k^*} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right] \langle q_k | \underline{v} | q_l \rangle \end{aligned}$$

Die Ableitungen bezüglich der Spinfreiheitsgrade errechnen sich wie im Beispiel der kinetischen Energie angegeben (A.17 und A.18).

A.5 Ableitungen der Überlappmatrix

Ableitungen nach den Ketparametern [3, 8]:

$$\langle q_k | \frac{\partial}{\partial \vec{b}_l} q_l \rangle = \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \langle q_k | q_l \rangle, \quad (\text{A.22})$$

$$\langle q_k | \frac{\partial}{\partial a_l} q_l \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \langle q_k | q_l \rangle, \quad (\text{A.23})$$

$$\langle q_k | \frac{\partial}{\partial \phi_l} q_l \rangle = i \sin \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.24})$$

$$\langle q_k | \frac{\partial}{\partial \chi_l} q_l \rangle = \frac{1}{2} \left(-\cos \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} + \sin \frac{\chi_k}{2} \cos \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \right) \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle}. \quad (\text{A.25})$$

Ableitungen nach einem beliebigen Parameter r_λ im Bra:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial r_\lambda^*} q_l | q_k \right\rangle = \left(\left\langle q_k | \frac{\partial}{\partial r_\lambda} q_l \right\rangle \right)^* \quad (\text{A.26})$$

Ableitungen in Bra und Ket [3, 8]:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial b_{ki}^*} q_k \mid \frac{\partial}{\partial b_{lj}} q_l \right\rangle = \left(\frac{\delta_{ij}}{a_k^* + a_l} - \frac{(b_{ki}^* - b_{li})(b_{kj}^* - b_{lj})}{(a_k^* + a_l)^2} \right) \langle q_k \mid q_l \rangle \quad (\text{A.27})$$

für die drei Raumrichtungen $i, j = 1, 2, 3$.

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial a_k^*} q_k \mid \frac{\partial}{\partial a_l} q_l \right\rangle &= \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_k^*} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{a_k^* + a_l} \left(\frac{1}{2} \frac{3}{a_k^* + a_l} - \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \right\} \langle q_k \mid q_l \rangle, \quad (\text{A.28}) \end{aligned}$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial a_k^*} q_k \mid \frac{\partial}{\partial \vec{b}_l} q_l \right\rangle = \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_k^*} - \frac{5}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \langle q_k \mid q_l \rangle, \quad (\text{A.29})$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \phi_k} q_k \mid \frac{\partial}{\partial \phi_l} q_l \right\rangle = \sin \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \frac{\langle q_k \mid q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k \mid \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial \chi_k} q_k \mid \frac{\partial}{\partial \chi_l} q_l \right\rangle &= \frac{1}{4} \left(-\sin \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} \cos \frac{\chi_k}{2} \cos \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \right) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k \mid q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k \mid \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.31}) \end{aligned}$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \chi_k} q_k \mid \frac{\partial}{\partial \phi_l} q_l \right\rangle = \frac{i}{2} \cos \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \frac{\langle q_k \mid q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k \mid \chi_l, \phi_l \rangle} \quad (\text{A.32})$$

$$, \left\langle \frac{\partial}{\partial \phi_k} q_k \mid \frac{\partial}{\partial \chi_l} q_l \right\rangle = -\frac{i}{2} \sin \frac{\chi_k}{2} \cos \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \frac{\langle q_k \mid q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k \mid \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.33})$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \phi_k} q_k \mid \frac{\partial}{\partial \vec{b}_l} q_l \right\rangle = -i \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \sin \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \frac{\langle q_k \mid q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k \mid \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.34})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial \chi_k} q_k \mid \frac{\partial}{\partial \vec{b}_l} q_l \right\rangle &= \frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \frac{1}{2} \left(-\sin \frac{\chi_k}{2} \cos \frac{\chi_l}{2} + \cos \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \right) \\ &\quad \times \frac{\langle q_k \mid q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k \mid \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.35}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial \phi_k} q_k \mid \frac{\partial}{\partial a_l} q_l \right\rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \\ &\quad \left(-i \sin \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \right) \frac{\langle q_k \mid q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k \mid \chi_l, \phi_l \rangle}, \quad (\text{A.36}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial}{\partial \chi_k} q_k \middle| \frac{\partial}{\partial a_l} q_l \right\rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{3}{a_l} - \frac{3}{a_k^* + a_l} + \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l} \right)^2 \right) \\
&\quad \frac{1}{2} \left(-\sin \frac{\chi_k}{2} \cos \frac{\chi_l}{2} + \cos \frac{\chi_k}{2} \sin \frac{\chi_l}{2} e^{-i(\phi_k - \phi_l)} \right) \frac{\langle q_k | q_l \rangle}{\langle \chi_k, \phi_k | \chi_l, \phi_l \rangle}
\end{aligned} \tag{A.37}$$

Alle anderen gemischten Ableitungen können durch die folgende Identität erhalten werden.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial r_\lambda^*} q_l \middle| \frac{\partial}{\partial r_\kappa} q_k \right\rangle = \left(\left\langle \frac{\partial}{\partial r_\kappa^*} q_k \middle| \frac{\partial}{\partial r_\lambda} q_l \right\rangle \right)^* \tag{A.38}$$

B. Statistik

B.1 Matricelemente zum statistischen Operator

B.1.1 Freie Bewegung

$$\langle q_k | \exp\{-\beta \underline{t}\} | q_l \rangle = \left(2\pi \frac{a_k^* a_l}{a_k^* + a_l + \frac{\beta}{m}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{(\vec{b}_k^* - \vec{b}_l)^2}{2(a_k^* + a_l + \frac{\beta}{m})} \right\} \quad (\text{B.1})$$

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \langle q_k | \exp\{-\beta \underline{t}\} | q_l \rangle = \frac{1}{2m} \left[\frac{3}{a_k^* + a_l + \frac{\beta}{m}} - \left(\frac{\vec{b}_k^* - \vec{b}_l}{a_k^* + a_l + \frac{\beta}{m}} \right)^2 \right] \times \langle q_k | \exp\{-\beta \underline{t}\} | q_l \rangle$$

B.1.2 Harmonischer Oszillator

$$a_k = \frac{1}{m \omega}, \quad \forall k \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} & \langle q_k | \exp\{-\beta \underline{h}_{\text{HO}}\} | q_l \rangle \\ &= \left(\frac{\pi}{m \omega} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{3}{2} \beta \omega - \frac{m \omega}{4} (\vec{b}_k^* - \vec{b}_l)^2 - \frac{m \omega}{2} \vec{b}_k^* \cdot \vec{b}_l [1 - e^{-\beta \omega}] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \langle q_k | \exp\{-\beta \underline{h}_{\text{HO}}\} | q_l \rangle = \left[\frac{3}{2} \omega + \frac{m \omega^2}{2} \vec{b}_k^* \cdot \vec{b}_l e^{-\beta \omega} \right] \langle q_k | \exp\{-\beta \underline{h}_{\text{HO}}\} | q_l \rangle$$

B.2 Kanonisches Ensemble des harmonischen Oszillators

Für A identische Fermionen mit gleicher Spinquantenzahl kann die Abhängigkeit der mittleren Energie von der Temperatur für den eindimensionalen harmonischen Oszillator analytisch angegeben werden¹. Die Zustandssumme lautet

$$\begin{aligned}
 Z(\beta) &= \sum_{n_1 < \dots < n_A}^{\infty} \exp \left\{ -\beta \left(E(n_1, \dots, n_A) - E_0(A) \right) \right\} = \prod_{k=1}^A \frac{1}{1 + \exp(-\beta \omega k)} \\
 E(n_1, \dots, n_A) &= \omega \sum_{i=1}^A \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \\
 E_0(A) &= \sum_{k=1}^A \frac{\omega (2k - 1)}{2},
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

damit ergibt sich

$$\langle \langle \tilde{H} \rangle \rangle \Big|_T = E_0(A) + \sum_{k=1}^A \frac{\omega k}{2} \left[\coth \left(\frac{\beta \omega k}{2} \right) - 1 \right]. \tag{B.5}$$

B.3 Eigenfunktionen des Harmonischen Oszillators

Die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators lassen sich in sehr guter Näherung aus äquidistanten Gaußschen Wellenpaketen erzeugen. Dies hat den Vorteil, daß sich die zur Berechnung der Besetzungszahlen nötigen Überlapps einfach ermitteln lassen. Dazu geht man für den eindimensionalen Oszillator am besten von einer linearen, äquidistanten Anordnung Gaußscher Wellenpakete aus und bestimmt durch zweimaliges Diagonalisieren die Eigenzustände des Hamiltonoperators.

Bezeichnung: $|q_k^B\rangle$, Anzahl N^B

$$|q_k^B\rangle = \left| \vec{r}_k^B = d \left(k - \frac{N^B + 1}{2} \right), \vec{p}_k^B = 0, a_k = \frac{1}{m\omega} \right\rangle \tag{B.6}$$

$$d = \frac{0.5}{\sqrt{m\omega}}$$

Inverse Überlappmatrix:

$$(O^B)_{kl}^{-1} = \langle q_k^B | q_l^B \rangle \tag{B.7}$$

¹Diese Formel geht auf Jörn Knoll, GSI Darmstadt, zurück.

Orthonormalbasis durch Diagonalisieren der inversen Überlappmatrix [5]:

$$\sum_{n=1}^{N^B} O_{mn}^B C_{nk} = o_k C_{mk} , \quad |O^B; k\rangle = (o_k)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=1}^{N^B} C_{nk} |q_n^B\rangle \quad (\text{B.8})$$

Matrizelemente von \tilde{h}_{HO} in dieser orthonormierten Basis:

$$\langle O^B; k | \tilde{h}_{\text{HO}} | O^B; l \rangle = (o_k)^{\frac{1}{2}} (o_l)^{\frac{1}{2}} \sum_{m,n=1}^{N^B} (C_{mk})^* C_{nl} \langle q_m^B | \tilde{h}_{\text{HO}} | q_n^B \rangle \quad (\text{B.9})$$

Nochmaliges Diagonalisieren, diesmal von $\langle O^B; k | \tilde{h}_{\text{HO}} | O^B; l \rangle$, gibt approximative Eigenbasis des harmonischen Oszillators:

$$\sum_{n=1}^{N^B} \langle O^B; m | \tilde{h}_{\text{HO}} | O^B; n \rangle D_{nk} = h_k D_{mk} \quad (\text{B.10})$$

$$|n\rangle = \sum_{k,l=1}^{N^B} (o_k)^{\frac{1}{2}} C_{lk} D_{nl} |q_m^B\rangle$$

Die so gefundenen Zustände $|n\rangle$ entsprechen für ausreichend kleine Abstände d der ursprünglichen, linearen Anordnung Gaußscher Wellenfunktionen sehr gut den Eigenzuständen des Harmonischen Oszillators [5]. Dies zeigt auch folgende Graphik, in der die Differenzen der in (B.10) berechneten zu den exakten Eigenwerten dargestellt sind. Zumindest die ersten 13 Zustände zeigen in ihrer Energie keine relevante Abweichung.

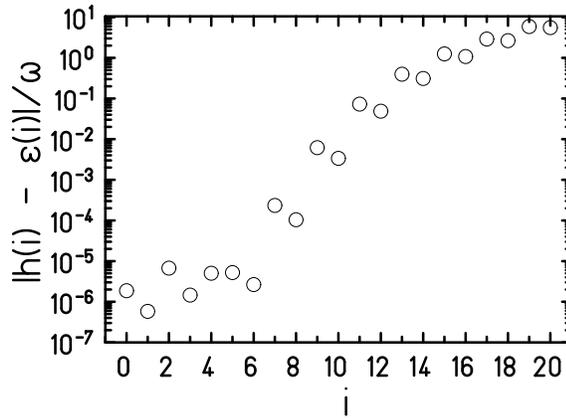


Abbildung B.1: Abweichung der Energieeigenwerte von den exakten Eigenwerten im Raum von 21 nicht orthogonalen Gaußfunktionen aufgetragen über der Quantenzahl des jeweiligen Zustandes

C. Kurzreichweitige Korrelationen

C.1 Schwerpunkt- und Relativkoordinaten

Schwerpunkt- und Relativkoordinaten sowie die entsprechenden Parameter:

$$\begin{aligned}
 \vec{x}_{12} &= \vec{x}_1 - \vec{x}_2 & \vec{x}_1 &= \vec{X}_{12} + \frac{1}{2} \vec{x}_{12} \\
 \vec{X}_{12} &= \frac{1}{2} (\vec{x}_1 + \vec{x}_2) & \vec{x}_2 &= \vec{X}_{12} - \frac{1}{2} \vec{x}_{12} \\
 \\
 \vec{b}_{12} &= \vec{b}_1 - \vec{b}_2 & \vec{b}_1 &= \vec{B}_{12} + \frac{1}{2} \vec{b}_{12} \\
 \vec{B}_{12} &= \frac{1}{2} (\vec{b}_1 + \vec{b}_2) & \vec{b}_2 &= \vec{B}_{12} - \frac{1}{2} \vec{b}_{12} \\
 \\
 \vec{k}_{12} &= \frac{1}{2} (\vec{k}_1 - \vec{k}_2) & \vec{k}_1 &= \frac{1}{2} \vec{K}_{12} + \vec{k}_{12} \\
 \vec{K}_{12} &= \vec{k}_1 + \vec{k}_2 & \vec{k}_2 &= \frac{1}{2} \vec{K}_{12} - \vec{k}_{12}
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

C.2 Wirkungsweise des unitären Korrelationsoperators

exemplarischer Beweis der Identitäten (4.20):

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{x} | \mathcal{C} | \phi \rangle &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - \frac{s(x)}{x} - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} \phi(\vec{x}) \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[1 + \frac{1}{n} \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - \frac{s(x)}{x} - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} \right]^n \phi(\vec{x}) \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[1 + \frac{1}{n} \frac{1}{x} \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \right]^n \phi(\vec{x}) \\
 &= \frac{1}{x} \exp \left\{ -\frac{1}{2} s'(x) - s(x) \frac{\partial}{\partial x} \right\} x \phi(\vec{x})
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

C.3 Wechselwirkungen und ihre Matrixelemente

C.3.1 Coulombwechselwirkung

Die Coulombwechselwirkung wird vom Korrelator kaum beeinflusst, da sie langreichweitig ist. Der Erwartungswert ändert sich deshalb kaum, geht man vom unkorrelierten zum korrelierten System über:

$$\begin{aligned} \langle \underline{V} \rangle &= \text{Sp} \left(\underline{v} \underline{\rho}^{(2)} \right) \approx \text{Sp} \left(\underline{v} \underline{\rho}_0^{(2)} \right) \\ &\approx \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n}^A \langle q_k q_l | \underline{v} | q_m q_n \rangle \left(\mathcal{O}_{mk} \mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{ml} \mathcal{O}_{nk} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

wobei

$$\begin{aligned} v(x_{12}) &= \frac{V_0}{x_{12}} \underline{P}^p \otimes \underline{P}^p; \quad V_0 = 1.44 \text{MeV fm} \\ \langle q_k q_l | \underline{v} | q_m q_n \rangle &= V_0 R_{klmn} S_{km} S_{ln} T_{km} T_{ln} P_{km}^p P_{ln}^p \end{aligned}$$

S_{km} und T_{km} bezeichnen die Spin- und Isospinüberlapps, \underline{P}^p den Projektor auf Protonen und P_{km}^p die Matrixelemente dieses Projektors.

Definition des Projektors auf die Protonen:

$$\underline{P}^p | q_m \rangle = \underline{P}^p | \vec{r}_m, \vec{p}_m, a_m, \chi_m, p h i_m, \xi_m \rangle = \frac{1}{2} (1 + \xi_m) | q_m \rangle \quad (\text{C.4})$$

$$P_{kl}^p = \langle \xi_k | \underline{P}^p | \xi_l \rangle = \frac{1}{2} (1 + \xi_l) \langle \xi_k | \xi_l \rangle \quad (\text{C.5})$$

Dabei ist $\xi_m = 1$ für Protonen und $\xi_m = -1$ für Neutronen.

Das Radialintegral

$$R_{klmn} = \int d^3 x_1 d^3 x_2 \langle \vec{b}_k, a_k; \vec{b}_l, a_l | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \frac{1}{x_{12}} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{b}_m, a_m; \vec{b}_n, a_n \rangle$$

kann nur für Spezialfälle analytisch angegeben werden.

Diagonalterme des Potentials:

$$\frac{\langle q_k q_l | \underline{v} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} = \frac{V_0}{r_{kl}} \text{erf} \left\{ \sqrt{\frac{\lambda_{klkl}}{2}} r_{kl} \right\} P_k^p P_l^p \quad (\text{C.6})$$

Die Abkürzungen sind folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} r_{kl} &= |\vec{r}_k - \vec{r}_l| \\ \lambda_{klkl} &= \frac{2 a_{kR} a_{lR}}{a_{kR} |a_l|^2 + a_{lR} |a_k|^2} \\ \text{erf}(x) &:= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x du \exp\{-u^2\} \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Die Coulombwechselwirkung innerhalb des Kerns ist kleiner als die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung, aber langreichweitig. Für große Entfernungen tragen nur die Diagonalterme bei, im Kern wird mit einer Faktorisierungsnäherung gearbeitet. Dazu wird der exakt berechenbare Erwartungswert einer Näherung des Coulombpotentials durch Gaußfunktionen mit Näherungen verglichen, die nur die Diagonalterme der Coulombwechselwirkung berücksichtigen.

Anpassung von 12 Gaußfunktionen an das Coulombpotential:

$$V(x_{12}) = \sum_{i=1}^{12} V_0^i \exp \left\{ -\frac{x_{12}^2}{r_i^2} \right\} \quad (\text{C.8})$$

i	V_0^i/MeV	r_i/fm
1	83.22	0.01
2	69.44	0.02
3	27.76	0.04
4	11.10	0.08
5	6.94	0.16
6	3.47	0.32
7	1.94	0.64
8	0.69	1.28
9	0.40	2.56
10	0.29	5.12
11	0.01	10.24
12	0.17	20.48

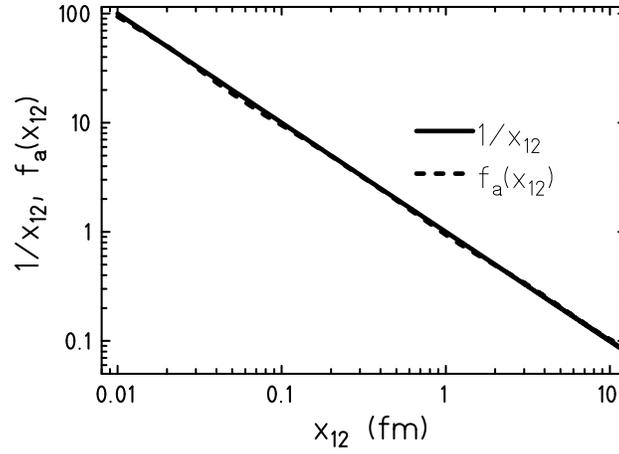


Abbildung C.1: Approximation von des Coulombpotentials durch 12 Gaußfunktionen. Links: Stärken und Radien entsprechend Gleichung C.8. Rechts: Vergleich der Approximation (durchgezogene Linie) mit der ursprünglichen Funktion $1/r$ (unterbrochene Linie).

Die Näherung der Coulombenergie lautet in der Faktorisierungsnäherung

$$\mathcal{V}_{\text{Coul}}(Q) = \sum_{k < l}^A \frac{\langle q_k q_l | \mathcal{V}_{\text{Coul}} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \left((1 - \gamma_{kl}) + \gamma_{kl} \exp \left\{ -\frac{\langle q_k q_l | q_l q_k \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \right\} \right) \quad (\text{C.9})$$

$$\gamma_{kl} = \text{erf} \left\{ \frac{1}{2} + \sum_{m \neq k, l}^A \left(\frac{\langle q_k q_m | q_m q_k \rangle}{\langle q_k q_m | q_k q_m \rangle} + \frac{\langle q_l q_m | q_m q_l \rangle}{\langle q_l q_m | q_l q_m \rangle} \right) \right\} .$$

γ_{kl} ist ein Maß für die Dichte in der Umgebung der Wellenpakete k und l . Sind k und l Protonen, und nur diese Matrixelemente tragen zur Coulombwechselwirkung bei, zählt γ_{kl} die Protonen, die mit k und l überlappen.

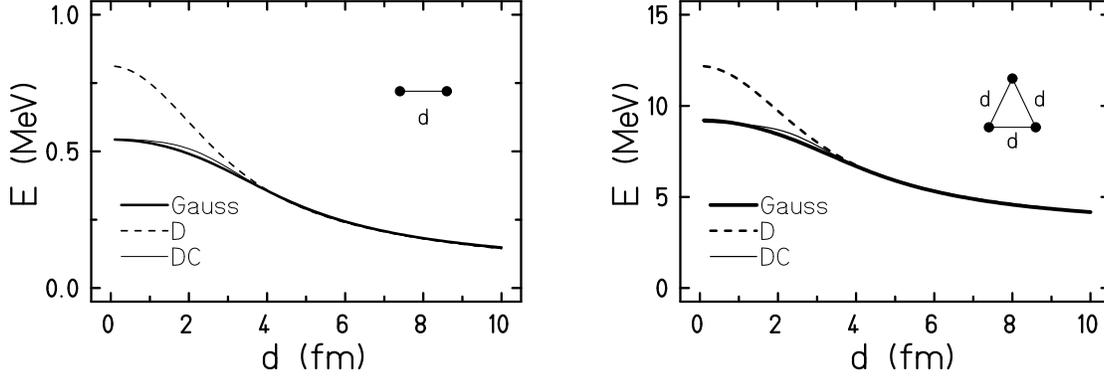


Abbildung C.2: Näherung zur Coulombenergie. Links: Coulombenergie zweier Protonen als Funktion des Abstandes der Zentren der Wellenpakete. Rechts: Coulombenergie eines ^{12}C -Kerns als Funktion des Abstandes der Alphacluster. Die fette durchgezogene Kurve kennzeichnet die Rechnung mit dem durch 12 Gaußfunktionen genäherten Coulombpotential, die gestrichene Linie das Ergebnis, wenn nur die direkten Terme verwendet werden und die dünne durchgezogene Linie das Resultat der dichteabhängigen Näherung nach Gleichung (C.9).

Die Grenzwerte großer Abstände $|\vec{r}_k - \vec{r}_l|$ liefern für die Coulombwechselwirkung:

$$\frac{\langle q_k q_l | \tilde{v} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \rightarrow \frac{V_0}{r_{kl}} P_{kk}^p P_{ll}^p \quad (\text{C.10})$$

Ableitungen der Näherung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \mathcal{V}(Q) &= \sum_l^A{}', \left[\frac{\partial}{\partial q_\mu} \frac{\langle q_m q_l | \tilde{v} | q_m q_l \rangle}{\langle q_m q_l | q_m q_l \rangle} \right] \left((1 - \gamma_{ml}) + \gamma_{ml} \exp \left\{ - \frac{\langle q_m q_l | q_l q_m \rangle}{\langle q_m q_l | q_m q_l \rangle} \right\} \right) \\ &+ \sum_l^A{}', \frac{\langle q_m q_l | \tilde{v} | q_m q_l \rangle}{\langle q_m q_l | q_m q_l \rangle} \left[\frac{\partial}{\partial q_\mu} \gamma_{ml} \right] \left(-1 + \exp \left\{ - \frac{\langle q_m q_l | q_l q_m \rangle}{\langle q_m q_l | q_m q_l \rangle} \right\} \right) \\ &+ \sum_l^A{}', \frac{\langle q_m q_l | \tilde{v} | q_m q_l \rangle}{\langle q_m q_l | q_m q_l \rangle} \gamma_{ml} \left[\frac{\partial}{\partial q_\mu} \exp \left\{ - \frac{\langle q_m q_l | q_l q_m \rangle}{\langle q_m q_l | q_m q_l \rangle} \right\} \right] \\ &+ \sum_{k < l}^A{}'', \frac{\langle q_k q_l | \tilde{v} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \left[\frac{\partial}{\partial q_\mu} \gamma_{kl} \right] \left(-1 + \exp \left\{ - \frac{\langle q_k q_l | q_l q_k \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \right\} \right) \end{aligned}$$

$\sum_l^A{}'$ bedeutet, daß $l \neq m$, $\sum_{k < l}^A{}''$ bedeutet, daß $k \neq m$ und $l \neq m$.

Die Ableitungen von γ_{kl} lauten für $k = m$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \gamma_{ml} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ - \left(\frac{1}{2} + \sum_n^A \left(\frac{\langle q_m q_n | q_n q_m \rangle}{\langle q_m q_n | q_m q_n \rangle} + \frac{\langle q_l q_n | q_n q_l \rangle}{\langle q_l q_n | q_l q_n \rangle} \right)^2 \right) \right\} \quad (C.11) \\ &\times \sum_n^A \frac{\partial}{\partial q_\mu} \frac{\langle q_m q_n | q_n q_m \rangle}{\langle q_m q_n | q_m q_n \rangle} \end{aligned}$$

\sum_n^A bedeutet, daß $n \neq m$ und $n \neq l$.

Die Ableitungen von γ_{kl} lauten für $m \neq k, l$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \gamma_{kl} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ - \left(\frac{1}{2} + \sum_n^A \left(\frac{\langle q_k q_n | q_n q_k \rangle}{\langle q_k q_n | q_k q_n \rangle} + \frac{\langle q_l q_n | q_n q_l \rangle}{\langle q_l q_n | q_l q_n \rangle} \right)^2 \right) \right\} \quad (C.12) \\ &\times \frac{\partial}{\partial q_\mu} \left(\frac{\langle q_k q_m | q_m q_k \rangle}{\langle q_k q_m | q_k q_m \rangle} + \frac{\langle q_l q_m | q_m q_l \rangle}{\langle q_l q_m | q_l q_m \rangle} \right) \end{aligned}$$

Die Ableitungen des Produktterms der Coulombwechselwirkung lauten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a_{kR}} \frac{\langle q_k q_l | \tilde{v} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} &= V_0 \left[\sqrt{\frac{2 \lambda_{klkl}}{\pi}} \exp \left\{ - \frac{\lambda_{klkl}}{2} r_{kl}^2 \right\} - \frac{1}{r_{kl}} \operatorname{erf} \left\{ \sqrt{\frac{\lambda_{klkl}}{2}} r_{kl} \right\} \right] \\ &\times \frac{\vec{r}_{kl}}{r_{kl}^2} \cdot \frac{\partial \vec{r}_k}{\partial a_{kR}} \quad (C.13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{V_0}{\sqrt{2 \pi \lambda_{klkl}}} \exp \left\{ - \frac{\lambda_{klkl}}{2} r_{kl}^2 \right\} \frac{\partial \lambda_{klkl}}{\partial a_{kR}} \\ \frac{\partial}{\partial a_{kI}} \frac{\langle q_k q_l | \tilde{v} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} &= V_0 \left[\sqrt{\frac{2 \lambda_{klkl}}{\pi}} \exp \left\{ - \frac{\lambda_{klkl}}{2} r_{kl}^2 \right\} - \frac{1}{r_{kl}} \operatorname{erf} \left\{ \sqrt{\frac{\lambda_{klkl}}{2}} r_{kl} \right\} \right] \\ &\times \frac{\vec{r}_{kl}}{r_{kl}^2} \cdot \frac{\partial \vec{r}_k}{\partial a_{kI}} \quad (C.14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{V_0}{\sqrt{2 \pi \lambda_{klkl}}} \exp \left\{ - \frac{\lambda_{klkl}}{2} r_{kl}^2 \right\} \frac{\partial \lambda_{klkl}}{\partial a_{kI}} \\ \frac{\partial}{\partial \vec{b}_{kR}} \frac{\langle q_k q_l | \tilde{v} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} &= V_0 \left[\sqrt{\frac{2 \lambda_{klkl}}{\pi}} \exp \left\{ - \frac{\lambda_{klkl}}{2} r_{kl}^2 \right\} - \frac{1}{r_{kl}} \operatorname{erf} \left\{ \sqrt{\frac{\lambda_{klkl}}{2}} r_{kl} \right\} \right] \\ &\times \frac{\vec{r}_{kl}}{r_{kl}^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{b}_{kR}} \otimes \vec{r}_k \quad (C.15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{b}_{kI}} \frac{\langle q_k q_l | \tilde{v} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} &= V_0 \left[\sqrt{\frac{2 \lambda_{klkl}}{\pi}} \exp \left\{ - \frac{\lambda_{klkl}}{2} r_{kl}^2 \right\} - \frac{1}{r_{kl}} \operatorname{erf} \left\{ \sqrt{\frac{\lambda_{klkl}}{2}} r_{kl} \right\} \right] \\ &\times \frac{\vec{r}_{kl}}{r_{kl}^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{b}_{kI}} \otimes \vec{r}_k \quad (C.16) \end{aligned}$$

Ableitungen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \vec{b}_{kR}} \otimes \vec{r}_k &= 1 & (C.17) \\
\frac{\partial}{\partial \vec{b}_{kI}} \otimes \vec{r}_k &= \frac{a_{kI}}{a_{kR}} \\
\frac{\partial \vec{r}_k}{\partial a_{kR}} &= -\frac{a_{kI}}{a_{kR}^2} \vec{b}_{kI} \\
\frac{\partial \vec{r}_k}{\partial a_{kI}} &= \frac{1}{a_{kR}} \vec{b}_{kI} \\
\frac{\partial \lambda_{klkl}}{\partial a_{kR}} &= \lambda_{klkl} \left(\frac{1}{a_{kR}} - \frac{|a_l|^2 + 2 a_{kR} a_{lR}}{a_{kR} |a_l|^2 + a_{lR} |a_k|^2} \right) \\
\frac{\partial \lambda_{klkl}}{\partial a_{kI}} &= \lambda_{klkl} \left(-\frac{2 a_{kI} a_{lR}}{a_{kR} |a_l|^2 + a_{lR} |a_k|^2} \right) = -\lambda_{klkl}^2 \frac{a_{kI}}{a_{kR}}
\end{aligned}$$

C.3.2 Gaußförmige Potentiale

Radialintegral:

$$\begin{aligned}
R_{klmn}(r^2) &= \int d^3 x_1 d^3 x_2 \langle q_k q_l | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \exp \left\{ -\frac{(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2}{r^2} \right\} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | q_m q_n \rangle \\
&= (2\pi)^3 \left(\frac{r^2 z_{klmn}}{n_{klmn}} \right)^{3/2} \exp \{ -\epsilon_{klmn} \} & (C.18) \\
&\quad \exp \left\{ \frac{z_{klmn}}{n_{klmn}} (\vec{\beta}_{km} + \vec{\beta}_{ln})^2 \right\} \\
&\quad \exp \left\{ \frac{1}{2} \frac{r^2}{n_{klmn}} (h_{klmn} \vec{\beta}_{km}^2 + h_{lknm} \vec{\beta}_{ln}^2) \right\}
\end{aligned}$$

Abkürzungen:

$$\begin{aligned}
z_{klmn} &:= a_k^* a_l^* a_m a_n & (C.19) \\
h_{klmn} &:= a_k^* a_m (a_l^* + a_n) \\
n_{klmn} &:= r^2 (a_k^* + a_m) (a_l^* + a_n) + 2 a_k^* a_m (a_l^* + a_n) + 2 a_l^* a_n (a_k^* + a_m) \\
\epsilon_{klmn} &:= \frac{\vec{b}_k^{*2}}{2 a_k^*} + \frac{\vec{b}_l^{*2}}{2 a_l^*} + \frac{\vec{b}_m^2}{2 a_m} + \frac{\vec{b}_n^2}{2 a_n} \\
\vec{\beta}_{km} &:= \frac{\vec{b}_k^*}{a_k^*} + \frac{\vec{b}_m}{a_m}
\end{aligned}$$

Aus Symmetriegründen werden nur die Ableitungen im ersten Index benötigt:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{b}_k^*} R_{klmn} = \frac{1}{a_k^*} \left\{ -\vec{b}_k^* + 2(\vec{\beta}_{km} + \vec{\beta}_{ln}) \frac{z_{klmn}}{n_{klmn}} + r^2 \frac{h_{klmn}}{n_{klmn}} \vec{\beta}_{km} \right\} R_{klmn} \quad (\text{C.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a_k^*} R_{klmn} &= \left\{ \frac{3}{2} \left[\frac{1}{z_{klmn}} \left(\frac{\partial z_{klmn}}{\partial a_k^*} \right) - \frac{1}{n_{klmn}} \left(\frac{\partial n_{klmn}}{\partial a_k^*} \right) \right] \right. \\ &\quad - 2 \frac{z_{klmn}}{n_{klmn}} (\vec{\beta}_{km} + \vec{\beta}_{ln}) \cdot \frac{\vec{b}_k^*}{a_k^{*2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{b}_k^*}{a_k^*} \right)^2 \\ &\quad + \left[\frac{1}{n_{klmn}} \left(\frac{\partial z_{klmn}}{\partial a_k^*} \right) - \frac{z_{klmn}}{n_{klmn}^2} \left(\frac{\partial n_{klmn}}{\partial a_k^*} \right) \right] (\vec{\beta}_{km} + \vec{\beta}_{ln})^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{r^2}{n_{klmn}} \left[\frac{\partial h_{klmn}}{\partial a_k^*} \vec{\beta}_{km}^2 + \frac{\partial h_{lknm}}{\partial a_k^*} \vec{\beta}_{ln}^2 - 2h_{klmn} \vec{\beta}_{km} \cdot \frac{\vec{b}_k^*}{a_k^{*2}} \right] \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \frac{r^2}{n_{klmn}^2} \left(\frac{\partial n_{klmn}}{\partial a_k^*} \right) (h_{klmn} \vec{\beta}_{km}^2 + h_{lknm} \vec{\beta}_{ln}^2) \right\} R_{klmn} \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_{klmn}}{\partial a_k^*} &= a_m(a_l^* + a_n) \\ \frac{\partial h_{lknm}}{\partial a_k^*} &= a_l^* a_n \\ \frac{\partial z_{klmn}}{\partial a_k^*} &= a_l^* a_m a_n \\ \frac{\partial n_{klmn}}{\partial a_k^*} &= r^2(a_l^* + a_n) + 2a_l^* a_n + 2a_m(a_l^* + a_n) \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

C.4 Alternative Parametrisierung

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(Q) &= \langle Q | \mathcal{C}^\dagger H \mathcal{C} | Q \rangle \\ &= \mathcal{T}(Q) + \mathcal{V}(Q) + \mathcal{T}_{\text{HC}}(Q) + \mathcal{V}_{\text{Coul}}(Q) . \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

$$\mathcal{T}(Q) = \sum_{k,l} \langle q_k | \mathcal{T} | q_l \rangle \mathcal{O}_{lk} . \quad (\text{C.24})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(Q) &= \sum_{k < l} \frac{\langle q_k q_l | \mathcal{V}_{\text{sum}} | q_k q_l \rangle_a}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \exp \left\{ -\frac{1}{4} c_{kl} \right\} \\ c_{kl} &= \sum_{m \neq k,l}^A \left(\frac{\langle q_k q_m | q_m q_k \rangle}{\langle q_k q_m | q_k q_m \rangle} + \frac{\langle q_l q_m | q_m q_l \rangle}{\langle q_l q_m | q_l q_m \rangle} \right) . \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

$$V_{\text{sum}}(x_{12}) = V_{01} \exp \left\{ -\frac{x_{12}^2}{r_{01}^2} \right\} \left(w_1 + m_1 \underline{P}^{\vec{r}} + b_1 \underline{P}^{\vec{\sigma}} + h_1 \underline{P}^{\vec{r}} \right) \quad (\text{C.26})$$

$$+ V_{02} \exp \left\{ -\frac{x_{12}^2}{r_{02}^2} \right\} \left(w_2 + m_2 \underline{P}^{\vec{r}} + b_2 \underline{P}^{\vec{\sigma}} + h_2 \underline{P}^{\vec{r}} \right)$$

$$V_{01} = -7.10 \text{MeV} ; \quad r_{01} = 1.16 \text{fm}$$

$$w_1 = 8.700, \quad m_1 = 5.610, \quad b_1 = 7.860, \quad h_1 = -21.170$$

$$V_{02} = -31.90 \text{MeV} ; \quad r_{02} = 2.22 \text{fm}$$

$$w_2 = 0.133, \quad m_2 = 0.514, \quad b_2 = 0.085, \quad h_2 = 0.268$$

$$\mathcal{T}_{\text{HC}}(Q) = V_0 \sum_{k < l}^A \frac{c}{(2\sigma_{klkl} + \frac{3}{2}c^2)^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{r_{kl}^2}{2\sigma_{klkl} + \frac{3}{2}c^2} \right\}$$

$$\times \left((1 - \gamma_{kl}) + \gamma_{kl} \exp \left\{ -\frac{\langle q_k q_l | q_l q_k \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \right\} \right) \quad (\text{C.27})$$

$$\gamma_{kl} = \text{erf} \left\{ \frac{1}{2} + \sum_{m \neq k, l}^A \left(\frac{\langle q_k q_m | q_m q_k \rangle}{\langle q_k q_m | q_k q_m \rangle} + \frac{\langle q_l q_m | q_m q_l \rangle}{\langle q_l q_m | q_l q_m \rangle} \right) \right\}$$

Parameter:

$$V_0 = 100 \text{ MeV fm}^2 \quad \text{Stärke} \quad (\text{C.28})$$

$$c = 0.6 \text{ fm} \quad \text{Reichweite}$$

Abkürzungen:

$$r_{kl} = |\vec{r}_k - \vec{r}_l| \quad (\text{C.29})$$

$$\sigma_{klkl} = \frac{a_{kR}|a_l|^2 + a_{lR}|a_k|^2}{2 a_{kR} a_{lR}}$$

$$\mathcal{V}_{\text{Coul}}(Q) = \sum_{k < l}^A \frac{\langle q_k q_l | \underline{V}_{\text{Coul}} | q_k q_l \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \left((1 - \gamma_{kl}) + \gamma_{kl} \exp \left\{ -\frac{\langle q_k q_l | q_l q_k \rangle}{\langle q_k q_l | q_k q_l \rangle} \right\} \right) \quad (\text{C.9'})$$

$$\gamma_{kl} = \text{erf} \left\{ \frac{1}{2} + \sum_{m \neq k, l}^A \left(\frac{\langle q_k q_m | q_m q_k \rangle}{\langle q_k q_m | q_k q_m \rangle} + \frac{\langle q_l q_m | q_m q_l \rangle}{\langle q_l q_m | q_l q_m \rangle} \right) \right\}, \quad (\text{C.30})$$

Mit der alternativen Parametrisierung ergeben sich die folgenden Grundzustandsdaten:

Isotop	E_B (MeV)	E_B/A (MeV)	$\langle \tilde{H} \rangle$ (MeV)	$\langle \tilde{H} \rangle / A$ (MeV)	r_{cms} (fm)	r_{cms} (fm)
${}^4\text{He}$	-28.296	-7.07	-28.32	-7.08	1.63	1.63
${}^{12}\text{C}$	-92.163	-7.68	-91.36	-7.61	2.42	2.79
${}^{16}\text{O}$	-127.62	-7.98	-127.7	-7.98	2.73	2.84
${}^{19}\text{F}$	-147.80	-7.78	-143.3	-7.54		2.87
${}^{24}\text{Mg}$	-198.256	-8.26	-196.7	-8.19	2.95	3.17
${}^{27}\text{Al}$	-224.952	-8.33	-216.9	-8.03	2.95	3.13
${}^{28}\text{Si}$	-236.537	-8.44	-238.3	-8.51	3.04	3.24
${}^{32}\text{S}$	-271.783	-8.49	-273.4	-8.54	3.20	3.35
${}^{40}\text{Ca}$	-342.056	-8.55	-349.0	-8.72	3.50	3.44

Literaturverzeichnis

- Grundlagen der Fermionischen Molekulardynamik

- [1] P. Kramer, M. Saraceno, Lecture Notes in Physics **140**, Springer, Berlin (1981)
- [2] H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A515** (1990) 147
- [3] H. Feldmeier, K. Bieler, Proc. 1. Europ. Biennial Workshop on Nucl. Phys., Megève, France, World Scientific (1991) S. 125;
K. Bieler, Diplomarbeit, TH Darmstadt (1991), unveröffentlicht
- [4] H. Feldmeier, J. Schnack, Proc. Int. Workshop on Dyn. Features of Nuclei, Sitges, Spain (1993) World Scientific
- [5] J. Schnack, Diplomarbeit, GSI report GSI-93-21 (1993)
- [6] H. Feldmeier, J. Schnack, in “Multifragmentation“, Proc. Int. Workshop XXII, Hirschegg, Austria (1994), herausgegeben von H. Feldmeier, W. Nörenberg
- [7] H. Feldmeier, J. Schnack, Nucl. Phys. **A583** (1995) 347c–352c
- [8] H. Feldmeier, K. Bieler, J. Schnack, Nucl. Phys. **A586** (1995) 493–532
- [9] J.J.Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley (1985)

- Die Molekulardynamikmodelle AMD und QMD

- [10] A. Ono, H. Horiuchi, Toshiki Maruyama, A. Ohnishi, Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 2898; Prog. Theor. Phys. **87** (1992) 1185; Phys. Rev. **C47** (1993) 2652
- [11] A. Ono, H. Horiuchi, Toshiki Maruyama, Phys. Rev. **C48** (1993) 2946; A. Ono, H. Horiuchi, Phys. Rev. **C51** (1995) 299; E.I. Tanaka, A. Ono, H. Horiuchi, Tomoyuki Maruyama, A. Engel, Phys. Rev. **C52** (1995) 316
- [12] A. Ono, H. Horiuchi, Vorabdruck, RIKEN-AF-NP-218, nucl-th/9601008
- [13] J. Aichelin, H. Stöcker, Phys. Lett. **B176** (1986) 14
- [14] J. Aichelin, Phys. Rep. **202** (1991) 233

- [15] G. Peilert, J. Konopka, H. Stöcker, W. Greiner, M. Blann, M.G. Mustafa, Phys. Rev. **C46** (1992) 1457–1473
- [16] S.A. Bass, C. Hartnack, H. Stöcker, W. Greiner, Phys. Rev. **C51** (1995) 3343–3356
- [17] J. Konopka, *Fragmentproduktion und Teilchenfluß in Schwerionenstößen und ihre Bedeutung für die thermodynamischen Eigenschaften von Kernmaterie*, Dissertation, Johann Wolfgang Goethe–Universität, Frankfurt am Main (1996)
- [18] T. Maruyama, K. Niita, A. Iwamoto, Vorabdruck, nucl-th/9509003
- [19] Dietrich Klakow, *Molekulardynamik von Wellenpaketen in Coulomb–Systemen*, Dissertation, Universität Erlangen–Nürnberg (1994)

- Statistische Eigenschaften

- [20] J.R. Klauder, B.-S. Skagerstam, *Coherent States*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (1985)
- [21] A. Ohnishi, J. Randrup, Nucl. Phys. **A565** (1993) 474–494
- [22] A. Ohnishi, J. Randrup, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 596
- [23] J.Schnack, H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A601** (1996) 181–194
- [24] J. Pochodzalla, T. Möhlenkamp, T. Rubehn, A. Schüttauf, A. Wörner, E. Zude, M. Begemann–Blaich, Th. Blaich, C. Gross, H. Emling, A. Ferrero, G. Imme, I. Iori, G.J. Kunde, W.D. Kunze, V. Lindenstruth, U. Lynen, A. Morini, W.F.J. Müller, B. Ocker, G. Raciti, H. Sann, C. Schwarz, W. Seidel, V. Serfling, J. Stroth, A. Trzcinski, W. Trautmann, A. Tucholski, G. Verde, B. Zwieglinski, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 1040
- [25] P. Bronche, S. Levit, D. Vautherin, Nucl. Phys. **A427** (1984) 278–296
- [26] P. Bronche, S. Levit, D. Vautherin, Nucl. Phys. **A436** (1985) 265–293
- [27] S. Levit, P. Bonche, Nucl. Phys. **A437** (1985) 426–442
- [28] D.H.E. Gross, Rep. Prog. Phys. **53** (1990) 605–658
- [29] R.J. Charity, M.A. McMahan, G.J. Wozniak, R.J. McDonald, L.G. Moretto, D.G. Sarantites, L.G. Sobotka, G. Guarino, A. Pantaleo, L. Fiore, A. Gobbi, K.D. Hildenbrand, Nucl. Phys. **A483** (1988) 371

- Kurzreichweitige Korrelationen und N–N–Wechselwirkungen

- [30] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem*, Springer, Berlin (1980)

- [31] A.N. Antonov, P.E. Hodgson, I.Zh. Petkov, *Nucleon Correlations in Nuclei*, Springer Series in Nuclear and Particle Physics, Springer-Verlag, Berlin (1993)
- [32] R. Jastrow, Phys. Rev. **98** (1955) 1479
- [33] S.E. Massen, Nucl. Part. Phys. **16** (1990) 1713–1725
- [34] S. Stringari, M. Traini, O. Bohigas, Nucl. Phys. **A516** (1990) 33–40
- [35] O. Benhar, V.R. Pandharipande, S.C. Pieper, Rev. of Mod. Phys. **65** (1993) 817
- [36] J. da Providencia, C.M. Shakin, Annals of Physics **30** (1964) 95–118
- [37] K. Suzuki, R. Okamoto, H. Kumagai, Phys. Rep. **242** (1994) 181–190
- [38] O. Benhar, A. Fabrocini, S. Fantoni, I. Sick, Nucl. Phys. **A579** (1994) 493–517;
I. Sick, Experimentelle Daten zu Einteilchendichten im Impulsraum, Private Korrespondenz (1995)
- [39] L.Lapikás, Nucl. Phys. **A553** (1993) 297c;
P.K.A. de Witt Huberts, J. Phys. G **16** (1990) 507;
G. van der Steenhoven, Nucl. Phys. **A527** (1991) 17c
- [40] K.A. Brueckner, R.J. Eden, N.C. Francis, Phys. Rev. **98** (1955) 1445
- [41] D.L. Hill, J.A. Wheeler, Phys. Rev. **89** (1953) 1102;
J.J. Griffin, J.A. Wheeler, Phys. Rev. **108** (1957) 311
- [42] K. Varga, Y. Suzuki, Phys. Rev. **C52** (1995) 2885;
K. Varga, Y. Suzuki, K. Arai, Y. Ogawa, in “Extremes of Nuclear Structure“, Proc. Int. Workshop XXIV, Hirschegg, Austria (1996), herausgegeben von H. Feldmeier, J. Knoll, W. Nörenberg
- [43] M. Jaminon, C. Mahaux, H. Ngô, Phys. Lett. **158B** (1985) 103
- [44] O. Bohigas, S. Stringari, Phys. Lett. **95B** (1980) 9
- [45] K. Niita, T.S. Biro, W. Cassing, A.L. De Paoli, U. Mosel, M. Schäfer, Nucl. Phys. **A495** (1989) 91c
- [46] A. Faessler, Nucl. Phys. **A495** (1989) 103c
- [47] R. Machleidt, Adv. Nucl. Phys. **19** (1989) 189
- [48] R.V. Reid, Annals of Physics **50** (1968) 411–448
- [49] A.B.Volkov, Nucl.Phys. **74** (1965) 33
- [50] Thomas Neff und Robert Roth, Diplomarbeiten, Betreuer Prof. Hans Feldmeier, TH Darmstadt, voraussichtliches Erscheinen 1996/97

- Experimentelle Daten

- [51] K. Yoshihara, H. Kudo, T. Sekine, *Periodic Table with Nuclides and Reference Data*, Springer-Verlag, Berlin (1985)
- [52] P. Møller, J.R. Nix, W.D. Myers, W.J. Swiatecki, *Atomic Data Nucl. Data Tables* **59**, (1995) 185–381
- [53] Landolt-Börnstein, *Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik*, Gruppe I, Band 2: Kernradien, Springer-Verlag, Berlin (1967)
- [54] T. Angeli, *Acta Physica Hungarica* **69** (1991) 233–247;
K.-H. Schmidt, private Korrespondenz
- [55] B. Fernandez, C. Gaarde, J.S. Larsen, S. Pontoppidan, F. Videbaek, *Nucl. Phys.* **A306** (1987) 259
- [56] F. Saint-Laurent, M. Conjeaud, S. Harar, J.M. Loiseaux, J. Menet, J.B. Viano, *Nucl. Phys.* **A327** (1979) 517
- [57] M. Petrovici, A. Adronic, I. Berceanu, A. Buță, M. Duma, D. Moisă, A. Pop, V. Simion, A. Bonasera, G. Immé, G. Lanzanò, A. Pagano, G. Raciti, N. Colonna, G. d’Erasmus, A. Pantaleo, *Z. Phys.* **A354** (1996) 11;
A. Pop et al. Proc. of the INPC, Beijing 1995, S. 5.2-2
- [58] G. Wolschin, W. Nörenberg, *Z. Phys.* **A284** (1979) 209
- [59] A. Bonasera et al., *Phys. Rep.* **243** (1994) 1
- [60] H. Feldmeier, *Rep. Prog. Phys.*, Vol. 50, No. 8 (1987) 915
- [61] J. Czudek, L. Jarczyk, B. Kamys, A. Magiera, R. Siudak, A. Strzałkowski, B. Styczeń, J. Hebenstreit, W. Oelert, P. von Rossen, H. Seyfarth, A. Budzanski, A. Szczurek, *Phys. Rev.* **C43** (1991) 1248–1254
- [62] K. Hagel, M. Gonin, R. Wada, J.B. Natowitz, F. Haddad, Y. Lou, M. Gui, D. Utley, B. Xiaó, J. Li, G. Nebbia, D. Fabris, G. Prete, J. Ruiz, D. Drain, B. Chombon, B. Cheynis, D. Guinet, X.C. Hu, A. Demeyer, C. Pastor, A. Giorni, A. Lleres, P. Stassi, J.B. Viano, P. Gonthier, *Phys. Rev.* **C50** (1994) 2017;
K. Hagel, M. Gonin, R. Wada, J.B. Natowitz, B.H. Sa, Y. Lou, M. Gui, D. Utley, G. Nebbia, D. Fabris, G. Prete, J. Ruiz, D. Drain, B. Chombon, B. Cheynis, D. Guinet, X.C. Hu, A. Demeyer, C. Pastor, A. Giorni, A. Lleres, P. Stassi, J.B. Viano, P. Gonthier, in “Multifragmentation“, Proc. Int. Workshop XXII, Hirschegg, Austria (1994), herausgegeben von H. Feldmeier, W. Nörenberg

Dank

Diese Dissertation ist das Ergebnis einer dreijährigen Arbeit mit ihren Höhen und Tiefen. Sie wäre wohl kaum möglich gewesen, hätte ich nicht die Unterstützung meiner Freunde, Verwandten und Mitarbeiter erfahren. Ihnen allen möchte ich an dieser Stelle herzlich danken.

Das Thema dieser Arbeit verdanke ich Prof. Hans Feldmeier, mit dem ich seit über vier Jahren sehr gern zusammenarbeite. Für seine ausgezeichnete Betreuung und ständige Bereitschaft, über physikalische aber auch private Probleme zu diskutieren, danke ich ihm oftmals. Sein Bestreben, physikalischen Phänomenen auf den Grund zu gehen, sie zu verstehen und anschaulich zu machen, wird mir ein Ziel für meine Arbeit bleiben.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Wolfgang Nörenberg, in dessen Arbeitsgruppe an der Gesellschaft für Schwerionenforschung ich ausgezeichnete Arbeitsbedingungen vorfand und der mich und meine Vorhaben großzügig unterstützte. So war es mir möglich, an einem Programm des INT in Seattle/USA teilzunehmen, das die Arbeit über statistische Eigenschaften stark beflügelte.

Ich bedanke mich bei der Theoriegruppe der GSI für die angenehme Arbeitsatmosphäre. Für den Langmut, meine Probleme anzuhören und mit mir darüber zu debattieren, danke ich ganz besonders meinen langjährigen Mitstreitern Christine Sauerermann und Jörg Lindner und den Diplomanden und Doktoranden Christoph Appel, Thomas Neff, Robert Roth und Wolfgang Weinhold.

Es war für mich eine großartige Erfahrung, mit George Bertsch, Jørgen Randrup, William Friedman und Pawel Danielewicz während der Programms INT-94-3 am Institut für Kerntheorie in Seattle/USA über die Beschreibung wechselwirkender Fermionensysteme und ihre thermodynamischen Eigenschaften ungezwungen diskutieren zu können. Ich danke ihnen dafür und auch dem Institut für die großzügige Unterstützung.

Bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung bedanke ich mich für die zur Verfügung gestellte Rechenzeit. Mein herzlicher Dank gebührt Eva Hocks, die mich im Dschungel der Bits und Bytes nie im Stich ließ.

Ich danke Dr. Andrzej Magiera, Dr. Mihai Petrovici, Dr. Josef Pochodzalla, Dr. Karl-Heinz Schmidt und Prof. Ingo Sick für das freundliche Zurverfügungstellen von experimentellen Daten.

Während der letzten fünf Jahre wurde ich von der Bischöflichen Studienförderung CUSANUSWERK materiell und ideell auf großzügige Weise gefördert. Dafür bedanke ich mich bei allen Mitarbeitern des CUSANUSWERKES ganz herzlich.

Diese Arbeit wäre unmöglich gewesen ohne das Verständnis und die Unterstützung meines Vaters Horst Schnack und meiner Frau Vera Linn. Ihnen und auch meiner Schwester Christine danke ich dafür in besonderer Weise.

Lebenslauf

Zur Person

- Geburt: Ich wurde am 20. Juli 1966 als erstes Kind von Agnes und Horst Schnack in Berlin-Pankow geboren.
- Familienstand: Seit dem 10. Februar 1994 bin ich mit meiner Frau Vera Linn verheiratet.

Bildungsgang

- 1973–1981 Von der ersten bis zur achten Klasse besuchte ich die 12. Polytechnische Oberschule in Berlin-Lichtenberg.
- 1981–1985 Mit dem Beginn der neunten Klasse wechselte ich an die Erweiterte Oberschule „Heinrich Hertz“, Spezialschule mathematischer Richtung, in Berlin.
- 1987–1991 Im Jahre 1987 begann ich mein Physikstudium an der Technischen Universität Dresden. 1991 schloß ich mein Hauptstudium in Dresden ab.
- 1991–1993 Ich wechselte 1991 an die Technische Hochschule Darmstadt und begann meine Diplomarbeit bei Herrn Prof. W. Nörenberg und Herrn Prof. H. Feldmeier. 1993 schloß ich mein Studium mit dem Prädikat sehr gut ab.
- 1993–1996 Ebenfalls im Jahre 1993 begann ich mein Promotionsstudium an der TH Darmstadt.
- 1990–1996 In den Jahren 1990 bis 1996 war ich Stipendiat der Bischöflichen Studienförderung CUSANUSWERK.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, daß ich die vorliegende Dissertation selbständig verfaßt, keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet und noch keinen Promotionsversuch unternommen habe.

Darmstadt, den 21. April 1996

