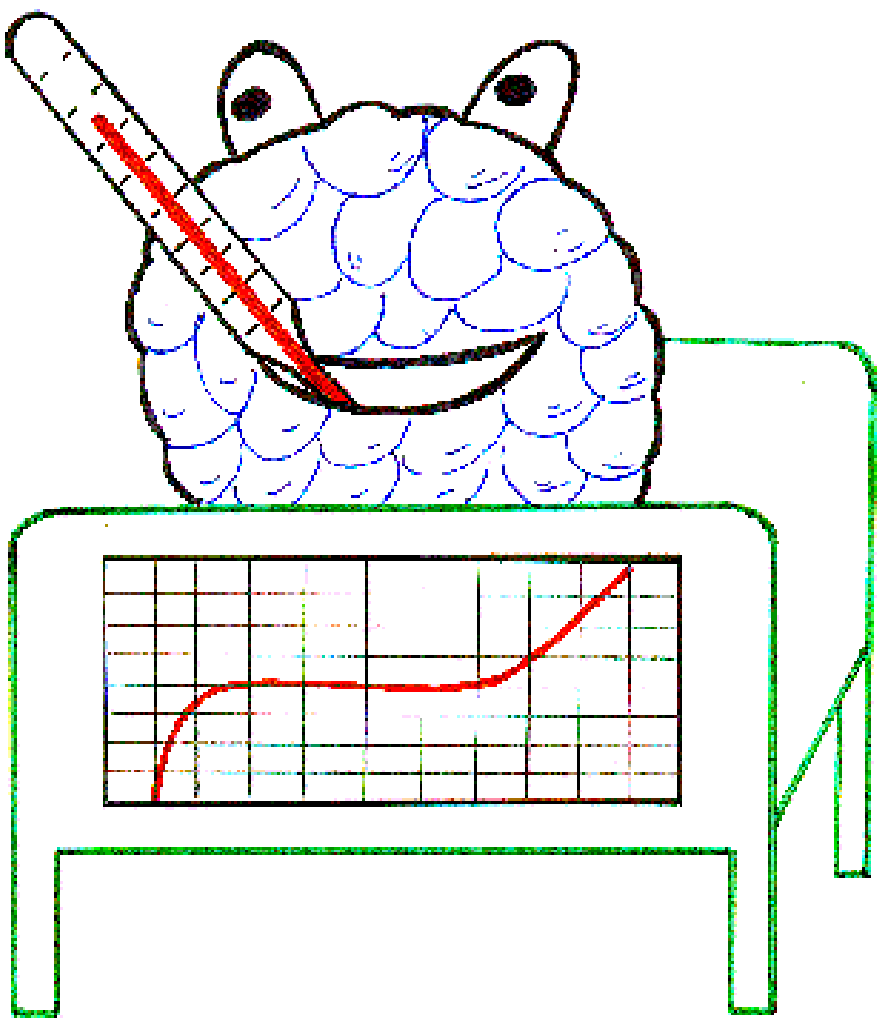
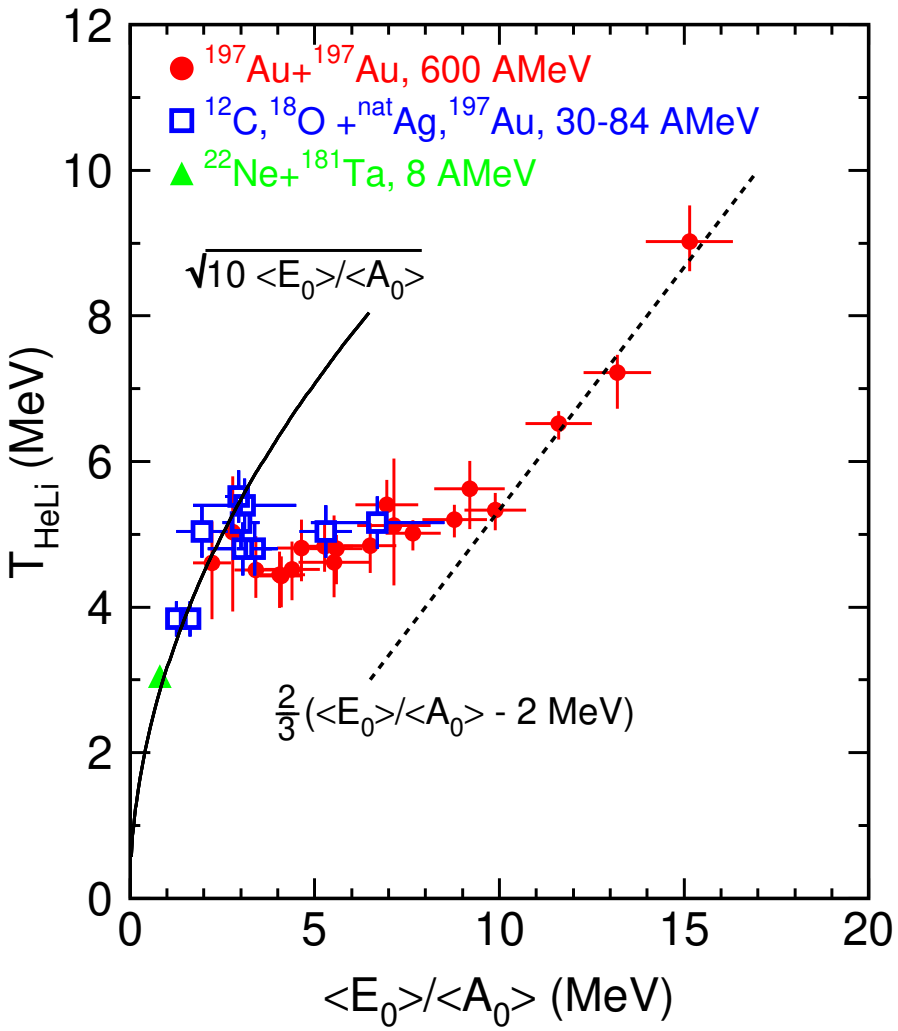
Der nukleare Flüssigkeit-Gas Phasenübergang

Jürgen Schnack
GSI Darmstadt



Problem: Thermodynamik mesoskopischer Systeme, z.B. wechselwirkender Fermisysteme (Atomkerne) oder atomarer Cluster, ...

Die kalorische Kurve für Kerne



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

Motivation

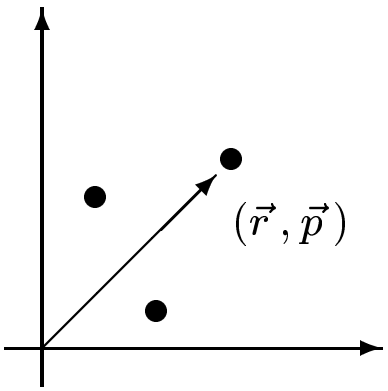
Ziel: Ein Modell zur Beschreibung wechselwirkender Fermisysteme, d.h. zur Beschreibung von

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

Gliederung:

1. klassische Molekulardynamik
2. Fermionische Molekulardynamik (FMD)
   - Ansatz des Versuchszustandes
   - Grundzustände
   - Dynamik
   - Thermodynamik

Klassische Molekulardynamik



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

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

Grundzustand:

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

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

Dynamik:

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

Klassische Molekulardynamik

Thermodynamik:

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

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

Temperaturbestimmung (Ergodenhypothese)

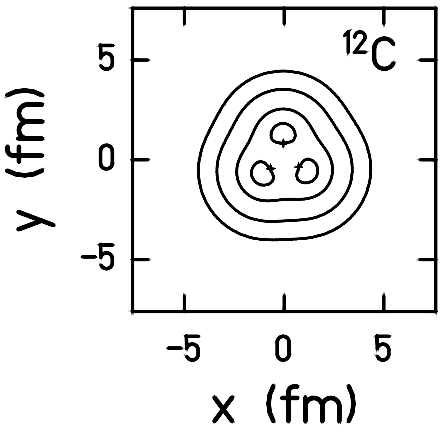
$$\left\langle\!\left\langle \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} \right\rangle\!\right\rangle = \lim_{t_2 \to \infty} \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \quad \frac{\vec{p}_i^{\,2}(t)}{2m_i}$$

$$= \frac{3}{2} k_B T$$

Temperaturregelung

- Impulsskalierung
- Berendsen–Methode
- Andersen–Methode
- Hoover–Nosé–Methode

Fermionische Molekulardynamik



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

Probleme ⇒ Ansatz:

- ununterscheidbare Fermionen ⇔ Pauliprinzip
  ⇒ antisymmetrisierter Vielteilchenzustand

- Quantenobjekte ⇔ Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation
  ⇒ Einteilchenwellenpakete

- kurzreichweitiger abstoßender Anteil der „van der Waals–artigen“ Wechselwirkung ⇔ kurzreichweitige Korrelationen
  ⇒ korrelierter Versuchszustand

FMD: Modellzustände

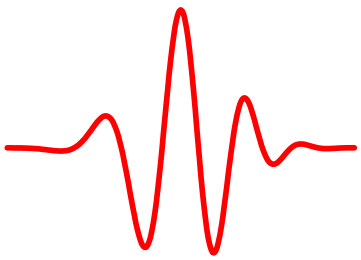
Vielteilchenzustand (Slaterdeterminante):

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

$$|\,\widehat{Q}(t)\,\rangle \;=\; \frac{1}{A!}\sum_{\pi}\mathrm{sgn}(\pi)\;\; |\,q_{\pi(1)}(t)\,\rangle\otimes\cdots\otimes\;|\,q_{\pi(A)}(t)\,\rangle$$

Einteilchenzustände (Gaußsche Wellenpakete):

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



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

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

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

$a(t)$: komplexe Breite

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

m_t : Isospin–3–Komponente

Für Gaußsche Wellenpakete gilt:

$$\langle\,\underset{\sim}{\vec{x}}\,\rangle \;=\; \vec{r}(t)$$

$$\langle\,\underset{\sim}{\vec{k}}\,\rangle \;=\; \vec{p}(t)$$

$$\Delta x\,\Delta k \;=\; \frac{3}{2}\sqrt{1-\frac{a_I^2}{a_R^2}}$$

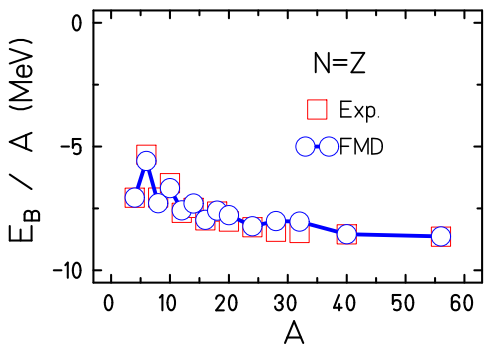
FMD: Grundzustände

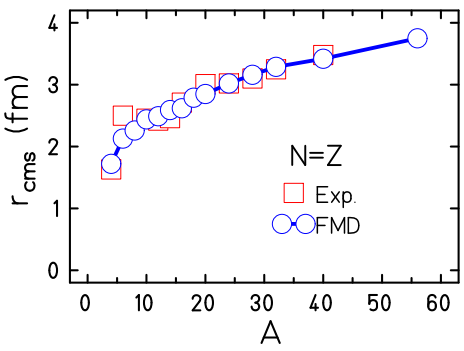
Grundzustand ist der Zustand minimaler Energie (Ritz):

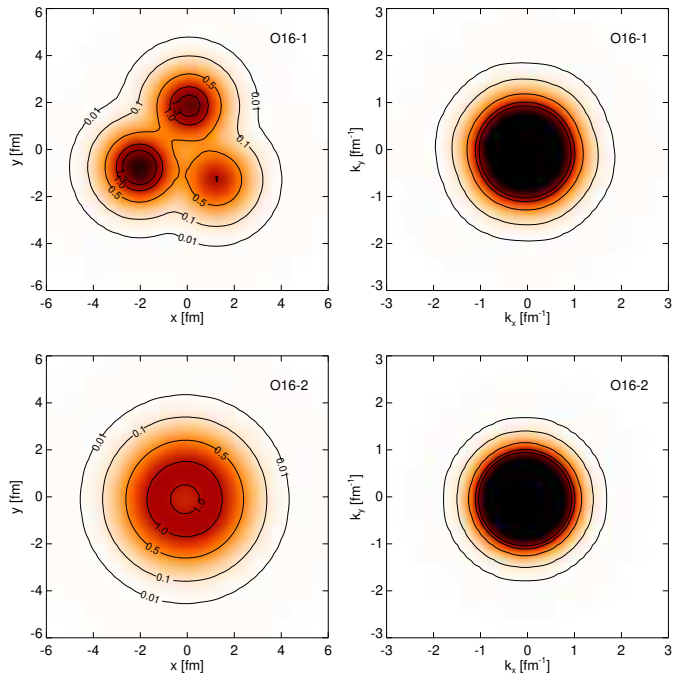
$$\mathcal{H} := \langle\, Q(t) \,|\, \underset{\sim}{H} \,|\, Q(t) \,\rangle \qquad \text{minimal}$$

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

Grundzustandseigenschaften mit phänomenologischer NN–Wechselwirkung:







FMD: Dynamik

Zeitabhängiges Variationsprinzip:

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

Bewegungsgleichungen:

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

$$\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q(t)) = \frac{\partial^2 \langle \, Q(t) \, | \, i\frac{d}{dt} \; | \, Q(t) \, \rangle}{\partial \dot{q}_{\mu} \partial q_{\nu}} - \frac{\partial^2 \langle \, Q(t) \, | \, i\frac{d}{dt} \; | \, Q(t) \, \rangle}{\partial \dot{q}_{\nu} \partial q_{\mu}}$$

- $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q(t))$ Metrik des Problems,
- BGL i.A. nicht linear, Zeitentwicklung nicht unitär,
- Pauliprinzip sowohl in $\mathcal{A}_{\mu\nu}(Q(t))$ als auch in $\langle \, Q(t) \, | \, \underset{\sim}{H} \, | \, Q(t) \, \rangle$

Verallgemeinerte Poissonklammern:

$$\mathcal{B}(t) \quad = \quad \langle \, Q(t) \, | \, \underset{\sim}{B} \, | \, Q(t) \, \rangle$$

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

FMD: Exakte Lösungen der SGL

Freie Bewegung:

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

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

Äusserer harmonischer Oszillator:

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

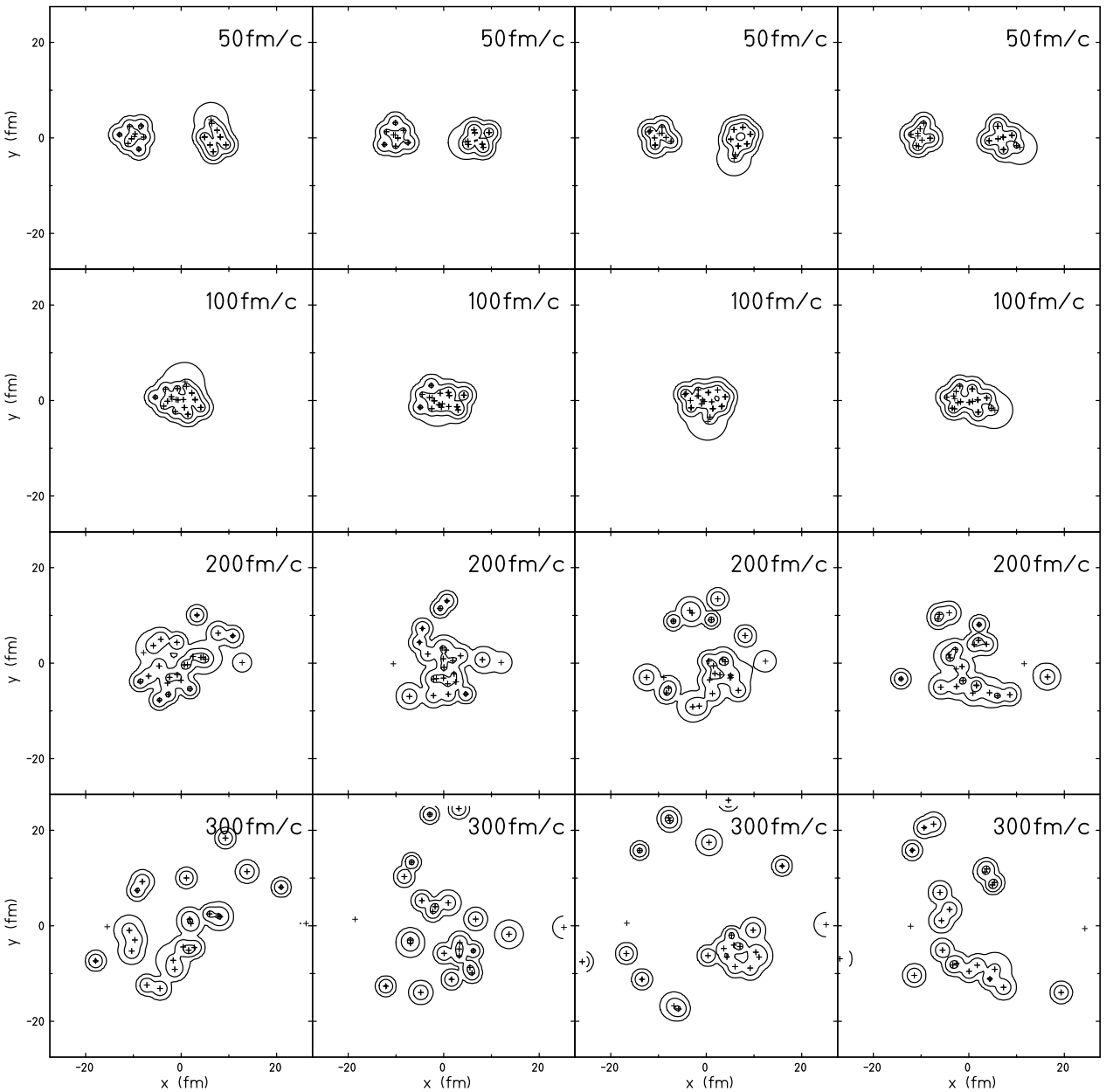
$$\frac{d}{dt}\,a_l = -im\omega^2 a_l^2 + \frac{i}{m}$$

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

Für das Vielteilchensystem gelten die gleichen Bewegungsgleichungen!

FMD: Multifragmentation

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



Thermodynamische Eigenschaften
Zeitmittelung

Statistischer Operator:

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

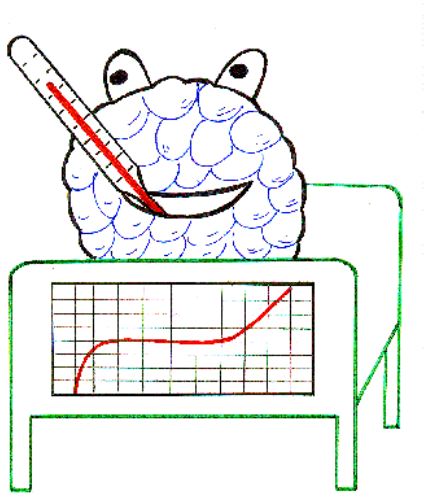
Zeitmittel des Erwartungswertes von $\underset{\sim}{B}$:

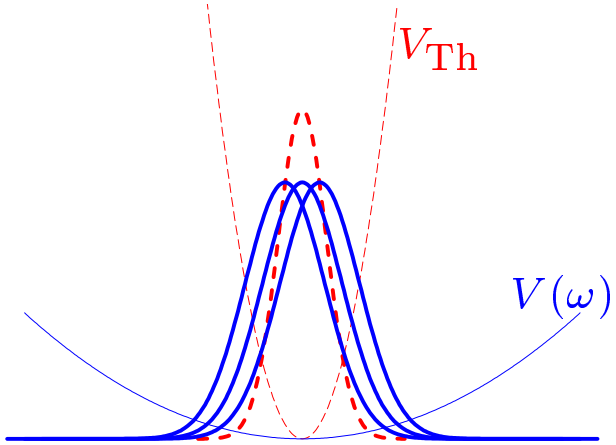
$$\overline{\langle \, \underset{\sim}{B} \, \rangle}\Big|_{\langle \, \underset{\sim}{H} \, \rangle} \quad := \quad \mathrm{Tr} \, (\underset{\sim}{R}_{\text{erg}} \; \underset{\sim}{B})$$

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

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

Ankopplung eines Thermometers





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

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

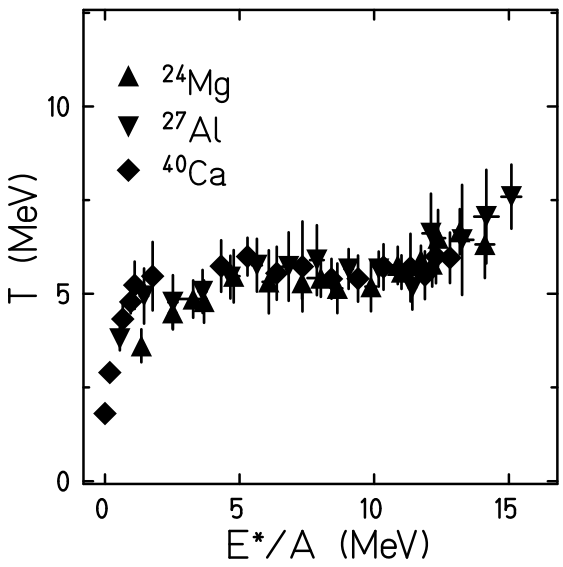
- **Ankopplung** der Nukleonen an das Thermometer:
  $\underset{\sim}{V}_{\rm N-Th}$, $\underset{\sim}{H} = \underset{\sim}{H}_{\rm N} + \underset{\sim}{H}_{\rm Th} + \underset{\sim}{V}_{\rm N-Th}$,
  $|\, Q(t) \,\rangle = |\, Kern \,\rangle \otimes |\, Thermometer \,\rangle$,

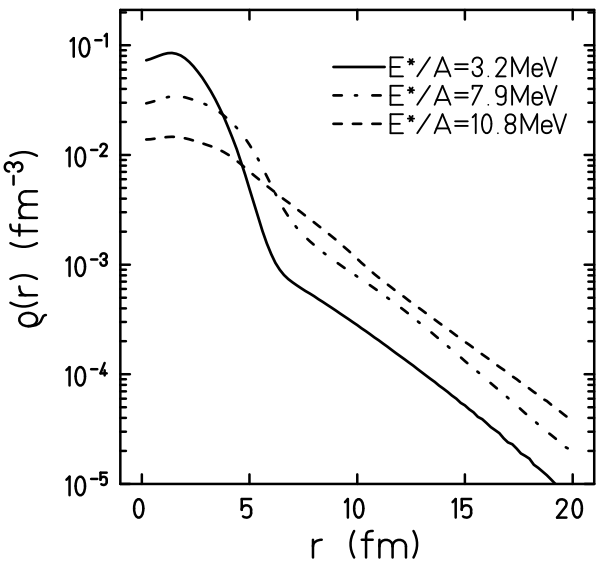
- **Zeitmittel:**
  $E_{\rm Th} = \overline{\langle\, \underset{\sim}{H}_{\rm Th} \,\rangle}\Big|_{\langle\, \underset{\sim}{H} \,\rangle}$, $E^* = \overline{\langle\, \underset{\sim}{H}_{\rm N} - E_0 \,\rangle}\Big|_{\langle\, \underset{\sim}{H} \,\rangle}$,

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

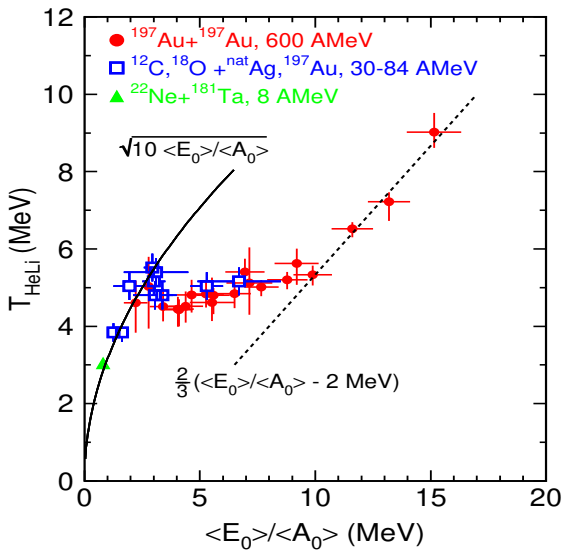
$$T = \omega_{Th} \left[\ln \left(\frac{E_{\rm Th} + \frac{3}{2}\omega_{Th}}{E_{\rm Th} - \frac{3}{2}\omega_{Th}} \right) \right]^{-1}$$

Phasenübergang
Kalorische Kurve





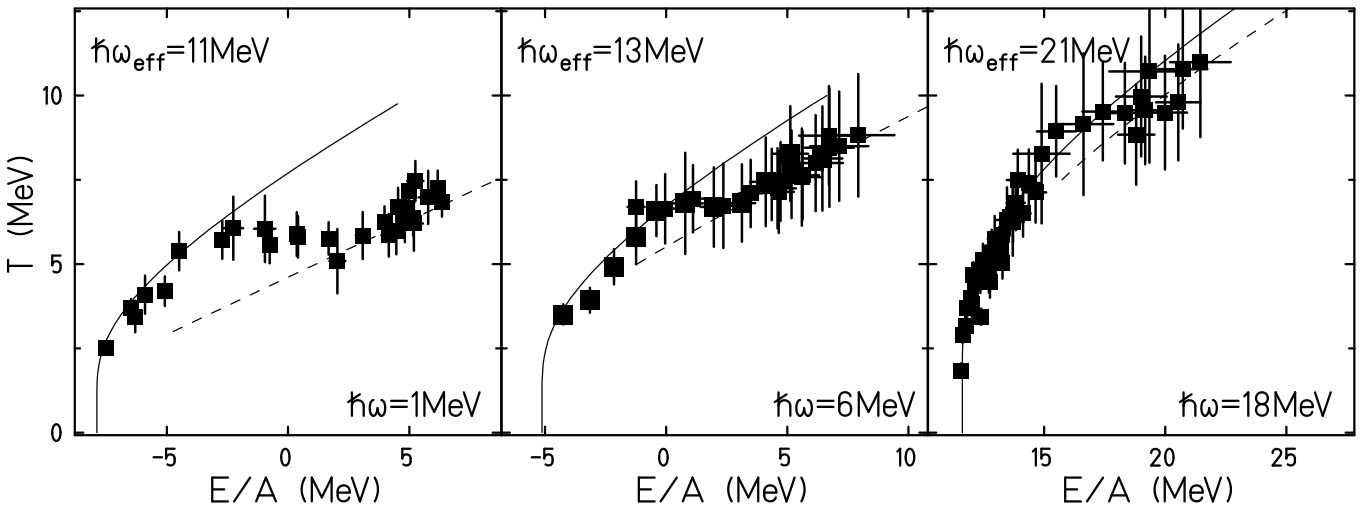
J. Pochodzalla et al., Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 1040:



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

Phasenübergang
Kritische Temperatur

Kritische Temperatur von ^{16}O:



- Kritischer Punkt: Verschwinden der latenten Wärme,
- kritisches Verhalten an einem endlichen geladenen System bestimmbar, $T_c = T_c(N, Z)$

Zusammenfassung

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

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

---

- Aufwand:
  klassische Molekulardynamik — $\propto A^2$,
  Fermionische Molekulardynamik — $\propto A^4$

Literatur

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

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

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

[4] H. Feldmeier, J. Schnack, für Prog. Part. Nucl. Phys. **39** (1997) angenommen

[5] J. Schnack, H. Feldmeier, GSI–Preprint–97–18

[6] H. Feldmeier, J. Schnack, Proc. Int. Workshop on Dyn. Features of Nuclei, Sitges, Spain (1993) World Scientific

[7] H. Feldmeier, J. Schnack, in *Multifragmentation*, Proceedings of the International Workshop XXII on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations, Editoren H. Feldmeier & W. Nörenberg, Hirschegg, Östereich (1994) 207

[8] H. Feldmeier, J. Schnack, Nucl. Phys. **A583** (1995) 347c

[9] H. Feldmeier, J. Schnack, erscheint in Nuclear Dynamics 3, Proceedings of 13th Winter Workshop on Nuclear Dynamics, Editoren W. Bauer und A. Mignerey, Plenum Press (1997)

[10] J. Schnack, Diplomarbeit, GSI report GSI-93-21 (1993)

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