

Behandlung von Transportphänomenen
in wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen
mit lokal harmonischen Näherungen

Dissertation
von
Christian Rummel

April 2004

Physik-Department der Technischen Universität München
Institut für theoretische Physik T39

Behandlung von Transportphänomenen
in wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen
mit lokal harmonischen Näherungen

Christian Rummel

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Physik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. Reiner Krücken
Prüfer der Dissertation: 1. apl.-Prof. Dr. Helmut Hofmann
2. Univ.-Prof. Dr. Peter Ring

Die Dissertation wurde am 8. April 2004 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 10. Mai 2004 angenommen.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Kollektive Kernbewegung und Transport | 5 |
| 2.1 | Der kollektive Hamilton-Operator | 5 |
| 2.2 | Die Theorie des linearen Response | 7 |
| 2.2.1 | Die nukleonische Response-Funktion und Einteilchen-Green-Funktionen | 8 |
| 2.2.2 | Die Berücksichtigung der Restwechselwirkung | 9 |
| 2.2.3 | Die Säkulargleichung und die kollektive Response-Funktion | 10 |
| 2.3 | Transportgleichungen | 11 |
| 2.3.1 | Die Kramers-Gleichung | 12 |
| 2.3.2 | Die lokal harmonische Näherung | 13 |
| 2.3.3 | Die Verwendung dimensionsloser Koordinaten | 15 |
| 2.4 | Kollektive Bewegung großer Amplitude | 15 |
| 2.4.1 | “Fusion-fission”-Reaktionen | 15 |
| 2.4.2 | Kernfusion | 16 |
| 2.4.3 | Kernspaltung | 17 |
| 2.5 | Ratenformeln | 17 |
| 2.6 | Eine Kritik des Caldeira-Leggett-Modells | 19 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.7 | Nukleare Thermodynamik | 22 |
| 3 | Temperaturabhängige Koeffizienten | 25 |
| 3.1 | Das mikroskopische und das makroskopische Modell | 25 |
| 3.2 | Die Transportkoeffizienten | 26 |
| 3.3 | Die Diffusionskoeffizienten | 29 |
| 4 | Die Compoundkern-Bildung | 37 |
| 4.1 | Die Überwindung einer Barriere | 38 |
| 4.2 | Die Anfangsbedingungen | 39 |
| 4.3 | Die Bildungswahrscheinlichkeit | 42 |
| 5 | Wechselwirkende Vielteilchen-Systeme | 49 |
| 5.1 | Die Zustandssumme | 50 |
| 5.2 | Die Entwicklungskoeffizienten | 53 |
| 5.3 | SPA und PSPA | 55 |
| 5.4 | Der “Crossover”-Bereich | 58 |
| 5.5 | Sehr tiefe Temperaturen | 60 |
| 5.6 | Ein Variationsverfahren | 61 |
| 5.7 | Ausblick: Dynamik großer Amplitude | 65 |
| 6 | Ein Test der Näherungsverfahren | 69 |
| 6.1 | Anwendung auf den Doppeltopf | 69 |
| 6.2 | Anwendung auf das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell | 72 |
| 6.2.1 | Die freie Energie | 76 |
| 6.2.2 | Die innere Energie und die spezifische Wärme | 79 |
| 6.2.3 | Die Temperatur-Fluktuationen | 81 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 6.2.4 | Die Niveaudichte | 83 |
| 7 | Die Ableitung von Transportkoeffizienten | 87 |
| 7.1 | Das allgemeine Vorgehen | 87 |
| 7.2 | Dissipative Prozesse: Modifikation der Näherungen | 90 |
| 7.2.1 | Die PSPA und ihre Erweiterungen | 90 |
| 7.2.2 | Das Variationsverfahren | 92 |
| 8 | Metastabile Zustände | 95 |
| 8.1 | Die Ableitung der Ratenformel aus der SPA | 95 |
| 8.2 | Der Einfluss koordinatenabhängiger Trägheit | 99 |
| 8.3 | Ein Test an einem eindimensionalen Modell | 100 |
| 9 | Die thermische Kernspaltung | 107 |
| 9.1 | Der “onset of dissipation” | 108 |
| 9.2 | Ein Vergleich mit dem statistischen Modell | 110 |
| 10 | Zusammenfassung und Ausblick | 113 |
| A | Die Kramers-Gleichung | 121 |
| A.1 | Die Mittlere Bewegung | 121 |
| A.2 | Die Fluktuationen | 122 |
| A.2.1 | Die zeitabhängigen Fluktuationen | 122 |
| A.2.2 | Die stationären Fluktuationen | 123 |
| A.3 | Die Gauß-Lösungen | 124 |
| A.4 | Die Stationären Lösungen | 124 |
| B | Die Koeffizienten der Euklidischen Wirkung | 127 |

| | | |
|----------|--|------------|
| B.1 | Die Zweite Ordnung | 127 |
| B.2 | Die Dritte Ordnung | 128 |
| B.3 | Die Vierte Ordnung | 128 |
| C | Das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell | 131 |
| D | Mathematischer Anhang | 133 |
| D.1 | Die Beiträge zum Variationsverfahren | 133 |
| D.1.1 | Die Zweite Ordnung | 133 |
| D.1.2 | Die Vierte Ordnung | 134 |
| D.2 | Zur Fehlerfunktion | 134 |
| D.3 | Zur Konvergenz unendlicher Produkte | 135 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Die lokal harmonische Näherung. | 14 |
| 2.2 | Der Kramers-Korrekturfaktor und der Smoluchowski-Grenzfall. | 18 |
| 3.1 | Die Temperaturabhängigkeit von Verhältnissen der Transportkoeffizienten für die mittlere Bewegung am Minimum von ^{224}Th | 27 |
| 3.2 | Die Temperaturabhängigkeit von Verhältnissen der Transportkoeffizienten für die mittlere Bewegung an der Barriere von ^{224}Th | 28 |
| 3.3 | Die Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichts-Fluktuationen für das Minimum von ^{224}Th | 31 |
| 3.4 | Die Temperaturabhängigkeit der stationären Fluktuationen für die Barriere von ^{224}Th | 32 |
| 3.5 | Die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten d_{pp} für das Minimum und die Barriere von ^{224}Th | 34 |
| 3.6 | Die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten d_{qp} für das Minimum und die Barriere von ^{224}Th | 35 |
| 4.1 | Das Szenario für die Beschreibung der Bildungswahrscheinlichkeit von Compoundkernen. | 37 |
| 4.2 | Die Abhängigkeit der Temperatur von der Einschussenergie. | 40 |
| 4.3 | Die Temperaturabhängigkeit von σ_{qq}^{∞} | 42 |
| 4.4 | Die Zeitentwicklung der Bildungswahrscheinlichkeit im mikroskopischen Modell. | 43 |

| | | |
|-----|---|-----|
| 4.5 | Die Wahrscheinlichkeit für die Compoundkern-Bildung als Funktion des Verhältnisses der anfänglichen kinetischen Energie zur effektiven Barrierenhöhe. | 45 |
| 4.6 | Die Wahrscheinlichkeit für die Bildung eines Compoundkerns als Funktion der Einschussenergie. | 46 |
| 5.1 | Die Deformation der Integrationskontur. | 55 |
| 6.1 | Das Doppeltopf-Potential und seine niedrigsten Energieniveaus. | 70 |
| 6.2 | Die freie Energie des Doppeltopf-Potentials. | 71 |
| 6.3 | Die freie Energie des nukleonischen Systems für das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell als Funktion von q_0 bei verschiedenen Temperaturen. | 74 |
| 6.4 | Die freie Energie des Gesamtsystems im Lipkin-Meshkov-Glick-Modell. . . | 77 |
| 6.5 | Ein Vergleich der RPA-Frequenz und des Variationsparameters des Lipkin-Meshkov-Glick-Modells. | 78 |
| 6.6 | Ein Vergleich der Genauigkeit der PSPA und des Variationsverfahrens als Funktion der inversen Temperatur. | 79 |
| 6.7 | Die innere Energie und die spezifische Wärme des Gesamtsystems im Lipkin-Meshkov-Glick-Modell. | 80 |
| 6.8 | Die spezifische Wärme je Teilchen in SPA für das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell. | 82 |
| 6.9 | Die Niveaudichte des Lipkin-Meshkov-Glick-Modells. | 84 |
| 7.1 | Die Anpassung von Lorentz-Funktionen an die Peaks des Imaginärteils der kollektiven Response-Funktion. | 88 |
| 8.1 | Die Szenarios für die Berechnung der Zerfallsrate. | 96 |
| 8.2 | Die metastabilen Potentiale in einer Dimension. | 102 |
| 8.3 | Der Logarithmus der Zerfallsrate als Funktion der inversen Temperatur. . . | 103 |
| 9.1 | Die normierte Rate als Funktion der Temperatur. | 109 |

| | | |
|-----|---|-----|
| 9.2 | Das Verhältnis der Rate zu der des statistischen Modells und der Einfluss der Steifheiten. | 110 |
| 9.3 | Ein Vergleich der Rate für die zwei verschiedenen Thorium-Isotope ${}_{90}^{216}\text{Th}_{126}$ und ${}_{90}^{224}\text{Th}_{134}$ | 111 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|---|----|
| 4.1 | Die Energieverhältnisse bei der Compoundkern-Bildung. | 42 |
| 5.1 | Die Anwendbarkeitsbereiche und Quanteneffekte der verwendeten Näherungen. | 66 |
| 6.1 | Die Parameter und Energien des Lipkin-Meshkov-Glick-Modells. | 75 |
| 6.2 | Die Temperatur-Fluktuationen beim Lipkin-Meshkov-Glick-Modell. | 82 |

Symbolverzeichnis

| | | | |
|--------------------------|---------------------------------|----------------|--|
| \hat{a} | Vernichtungsoperator | Γ | Zerfallsbreite |
| \hat{a}^\dagger | Erzeugungsoperator | γ | Reibungskoeffizient |
| A | Teilchenzahl | Γ_k | Imaginärteil der Selbstenergie |
| $\beta = 1/T$ | inverse Temperatur | $g_{kk'}$ | Einteilchen-Green-Funktion |
| B | Barrierehöhe | J | Gesamtdrehimpuls |
| B_{eff} | effektive Barrierehöhe | j | Wahrscheinlichkeitsstrom |
| \mathcal{C} | spezifische Wärme | K | Propagator |
| C | Steifheit | k | Kopplungskonstante |
| d | Phasenraumdichte | λ_{rs} | Entwicklungskoeffizient zweiter Ordnung der Euklidischen Wirkung |
| $D_{\mu\nu}, d_{\mu\nu}$ | Diffusionskoeffizient | μ | chemisches Potential |
| \mathcal{E} | innere Energie | M | Trägheit |
| ϵ_k | Einteilchen-Energie | $\bar{\nu}_r$ | Matsubara-Frequenzen für Bosonen |
| η | effektiver Dämpfungskoeffizient | ν_r | Matsubara-Frequenzen für Fermionen |
| E | Energie | N | integrierte Wahrscheinlichkeit |
| E^{kin} | kinetische Energie | n | Fermi-Besetzungszahl |
| E^* | Anregungsenergie | n | Ortsraumdichte |
| E_0 | Grundzustandsenergie | Π | Wahrscheinlichkeit für die Compoundkern-Bildung |
| E_{cm} | Schwerpunktsenergie | P, p | kollektiver Impuls |
| \mathcal{F} | freie Energie | Q, q | kollektive Koordinate |
| \hat{F} | Generator der Kollektivbewegung | | |
| f | Phasenraumdichte | | |
| f_{qm} | Quantenkorrekturfaktor zur Rate | | |

| | | | |
|------------------------------------|---|------------------------------|--|
| ρ_{rst} | Entwicklungskoeffizient dritter Ordnung der Euklidischen Wirkung | T_c | Grenztemperatur im Realzeit-Formalismus |
| ϱ | statistisches Gewicht | \hat{U}, \hat{u} | Imaginärzeit-Propagator |
| $\varrho_{kk'}$ | spektrale Dichte | $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ | Zweiteilchen-Restwechselwirkung |
| R | Zerfallsrate | V | Potential |
| r | Verzweigungsverhältnis, zwischen kinetischer Energie und Anregungsenergie | Ω | Niveaudichte |
| $\Sigma_{\mu\nu}, \sigma_{\mu\nu}$ | Fluktuationen | Ω_μ | Variationsparameter |
| Σ_k | Selbstenergie | ω_{kl} | nukleonische Anregungs-Frequenz |
| σ_{rstu} | Entwicklungskoeffizient vierter Ordnung der Euklidischen Wirkung | ϖ | kollektive Oszillatorfrequenz |
| $s_\Omega^{q_0}$ | Referenz-Wirkung des Variationsverfahrens | ϖ_μ | RPA-Frequenzen |
| S_E, s_E | Euklidische Wirkung | W | Parameter zur Festlegung der Koordinaten-Fluktuationen |
| \hat{T} | Ordnungsoperator in reeller oder imaginärer Zeit | W | Potential |
| τ | (imaginäre) Zeit | w | Energieverteilung |
| τ_{coll} | Zeitskala der kollektiven Bewegung | w | Parameter zur Festlegung der Impuls-Fluktuationen |
| τ_{kin} | Relaxationszeit der Impulsverteilung | w | nukleonische Oszillatorfrequenz |
| τ_{nucl} | Zeitskala der nukleonischen Bewegung | χ | Response-Funktion |
| τ_{rec} | Wiederkehrzeit | χ' | reaktive Response-Funktion |
| Θ | Stufenfunktion | χ'' | dissipative Response-Funktion |
| T | Temperatur | \mathcal{Z} | Zustandssumme des Gesamtsystems |
| t | (reelle) Zeit | ζ | Quantenkorrekturfaktor zur Zustandssumme |
| T_0 | Grenztemperatur im Imaginärzeit-Formalismus, "Crossover"-Temperatur | z | Zustandssumme des nukleonischen Systems |
| T_{crit} | kritische Temperatur eines Phasenübergangs | $\langle \dots \rangle$ | Mittelwert |

Kapitel 1

Einleitung

Atomkerne sind aus einer Anzahl von $A = 1 \dots \sim 290$ miteinander über die Kernkraft wechselwirkender Nukleonen (Protonen und Neutronen) aufgebaut. Die meisten ihrer Eigenschaften können gut durch die Gesetze der nichtrelativistischen Quantentheorie beschrieben werden. Eine Ausnahme stellt z.B. die mikroskopische Erklärung der Spin-Bahn-Kraft dar. Ein Hamilton-Operator, der einen Atomkern mikroskopisch beschreibt, hängt im Prinzip von den Freiheitsgraden der Nukleonen (Koordinaten \hat{x}_i , Impulse \hat{p}_i , Spin $\hat{\sigma}_i$ und Isospin $\hat{\tau}_i \dots, i = 1 \dots A$) ab. Die Bewegung der einzelnen Nukleonen in ihren wechselseitigen Kraftfeldern kann auf den gesamten Kern übertragen werden: Es tritt eine sogenannte kollektive Dynamik auf, an der eine große Anzahl von Nukleonen gemeinsam beteiligt ist. Einfache Beispiele hierfür sind Rotationen, Vibrationen oder Kernspaltung.

Zur Beschreibung der *kollektiven Dynamik* eines Kerns versucht man, anstelle der $\sim A$ nukleonischen Freiheitsgrade eine wesentlich kleinere Anzahl kollektiver Freiheitsgrade zu verwenden. So kann die Form eines Kerns durch relativ wenige Koordinaten, wie z.B. bei kleinen Deformationen die niedrigsten Entwicklungskoeffizienten der Massendichte nach Kugelflächenfunktionen, parametrisiert werden. Eine mögliche theoretische Behandlung der Kollektivbewegung besteht darin, von Transportgleichungen für diese kollektiven Koordinaten ausgehend die Zeitentwicklung der mittleren Bewegung und der thermischen und quantenmechanischen Fluktuationen zu beschreiben. Bei der kollektiven Kernbewegung großer Amplitude, wie sie z.B. bei Kernspaltung oder Kernfusion auftritt, erfolgt die Dynamik im kollektiven Phasenraum über eine oder mehrere Barrieren hinweg. Es gibt – beispielsweise aus Fusionsexperimenten – experimentelle Hinweise, dass dabei Reibungskräfte, die durch *Dissipation* von kollektiver Energie in die Freiheitsgrade der Nukleonen zustande kommen, eine wichtige Rolle spielen können.

Seit etwa 20 Jahren existiert mit dem Caldeira-Leggett-Modell (CLM) [CL83] ein Ansatz, der zur Klärung des grundlegenden physikalischen Problems *dissipativer Quantensysteme* beigetragen hat. Im Rahmen des CLM ist es möglich, den Zerfall eines metastabilen Zu-

standes durch thermisch aktiviertes Überqueren bzw. quantenmechanisches Durchtunneln einer Potentialbarriere in Gegenwart eines Wärmebades zu beschreiben. Erfolgreiche Anwendungen konnten z.B. in der Festkörperphysik gemacht werden. In *Atomkernen* treten im Gegensatz dazu entscheidende theoretische Probleme auf, die eine direkte Anwendung des CLM verunmöglichen. Beispielsweise muss hier *Selbstkonsistenz* zwischen dem durch die nukleonischen Freiheitsgrade gegebenen Wärmebad und den kollektiven Freiheitsgraden gefordert werden. Außerdem ist es wichtig, die *Transportkoeffizienten* wie die Trägheit, die Reibungskraft und die Steifheit der Kollektivbewegung aus einer *mikroskopischen* Theorie zu bestimmen. Mit dieser Arbeit werden Schritte zur Klärung des Phänomens des “dissipativen Tunnelns” bei Atomkernen unternommen, ohne auf das CLM zurückzugreifen.

Dazu wird im Kapitel 2 eine Einführung in das Gebiet der Transportphänomene bei der Behandlung der kollektiven Kernbewegung gegeben. Das Temperaturverhalten der dabei auftretenden Transport- und Diffusionskoeffizienten wird im Kapitel 3 in einem quantenmechanischen und einem klassischen Modell untersucht. Eine Anwendung dieser Transportkoeffizienten auf die *Bildung von Compoundkernen* bei der Produktion superschwerer Elemente erfolgt im Kapitel 4. Dabei wird für die innere Barriere das vereinfachte Modell eines instabilen Oszillators verwendet. Neben der Wichtigkeit von Quantenfluktuationen wird der Einfluss von Unsicherheiten untersucht, die aus der unzureichenden Kenntnis der in der Anfangsphase der Schwerionen-Reaktion ablaufenden Prozesse resultieren.

Im Kapitel 5 werden Funktionalintegrale in imaginärer Zeit benutzt, um von der Zweiteilchen-Wechselwirkung startend kollektive Koordinaten selbstkonsistent einzuführen und die *Zustandssumme* eines endlichen, wechselwirkenden Systems von Fermionen zu berechnen. Bei bisherigen Ansätzen dieser Art wurden dynamische Effekte ausschließlich auf dem Niveau der lokalen “Random Phase Approximation” (RPA) berücksichtigt [PBB91, AA97, RC97, RR98]. Im Fall von Instabilitäten bricht diese Näherung zusammen, wenn unterhalb einer Grenztemperatur *Quantenfluktuationen großer Amplitude* dominant werden. In dieser Arbeit werden durch Berücksichtigung von *Anharmonizitäten* weiterreichende Näherungen vorgeschlagen, die diese Grenztemperatur absenken und die Resultate im zugänglichen Bereich verbessern [RA02, RH04b]. Es besteht die Möglichkeit, dass diese Neuentwicklungen auch im Gebiet der kürzlich experimentell zugänglich gewordenen supraleitenden Metallcluster [RBT95, BRT96, RBT97] mit Erfolg angewendet werden können.

Nach einem Vergleich der Güte der Näherungen an exakt lösbaren Modellen im Kapitel 6 wird die Theorie im Kapitel 7 so modifiziert, dass die im Modell unabhängiger Teilchen vernachlässigte *Restwechselwirkung* effektiv berücksichtigt werden kann. Diese führt letztlich zu *Relaxationsphänomenen und Dissipation*. Zudem können im Zuge der Berücksichtigung der Restwechselwirkung *Transportkoeffizienten* für die Trägheit, die Reibung und die Steifheit der Kollektivbewegung aus der mikroskopischen Theorie extrahiert werden.

Bei metastabilen Zuständen, die durch eine Potentialbarriere vom Kontinuum getrennt sind, erhält die freie Energie des Systems einen endlichen Imaginärteil, aus dem die *Zerfallsrate* bestimmt werden kann. Im Kapitel 8 wird untersucht, welche Ratenformeln sich

für wechselwirkende Vielteilchen-Systeme aus den in dieser Arbeit entwickelten semiklassischen Näherungen ergeben. Hinsichtlich des Einflusses der *dissipativen Kräfte* wird dabei in Übereinstimmung mit dem von Kramers [Kra40] für eindimensionale Systeme unter der Annahme nicht zu schwacher Reibungskräfte abgeleiteten Resultat gefunden, dass Dämpfung die Rate durch Limitierung des Stromes über die Barriere absenkt. Im Gegensatz dazu erhöhen bei tiefen Temperaturen *Quanteneffekte* wie beim CLM die klassische Zerfallsrate. Im Abschnitt 8.2 wird besonderes Augenmerk auf den Einfluss der *koordinatenabhängigen Trägheit* gelegt. In diesem Fall tritt in der Ratenformel ein Korrekturfaktor auf, der dafür sorgt, dass Trägheit und kinetische Energie die Rate im Grenzfall sehr starker Dämpfung (Smoluchowski-Limes) nicht mehr beeinflussen. Es wird darauf eingegangen, wie dieses Verhalten unter gewissen Annahmen auch mit Transportgleichungen vom Kramers'schen Typ reproduziert werden kann.

Im Kapitel 9 erfolgt die Anwendung der Ratenformeln auf die *thermische Kernspaltung*, aus der experimentell Aufschluss über die Stärke und die Temperaturabhängigkeit der Dämpfung der Spaltmode erlangt werden kann. Die experimentell beobachtete Verringerung der Spaltrate gegenüber der Vorhersage des "statistischen Modells" oberhalb einer Schwellentemperatur kann durch Verwendung des quantenmechanischen Modells der Transportkoeffizienten aus Kapitel 3 qualitativ erklärt werden.

Im Kapitel 10 werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst. Es wird ein Ausblick auf offene Fragen und mögliche Ansätze zu deren Klärung gegeben.

In der vorliegenden Arbeit werden *drei Näherungsschemata* verwendet, die alle in gewisser Hinsicht als "lokal harmonisch" bezeichnet werden können. Dennoch existieren wesentliche Unterschiede.

- Bei einer von H. Hofmann und Mitarbeitern (siehe z.B. [Hof97]) zur Untersuchung von kollektiver Kernbewegung entwickelten Näherung wird die Dynamik an jedem Punkt des kollektiven Phasenraumes für kurze Zeiten in linearisierter Form behandelt. Die Untersuchung von kollektiver Bewegung großer Amplitude ist dabei durch Aneinanderreihen von Kurzzeitentwicklungen möglich (siehe Abschnitt 2.3.2). Die Begrifflichkeit "*lokal harmonische Näherung*" ("Locally Harmonic Approximation" (LHA)) wird hier ausschließlich für diesen Ansatz verwendet.
- Im Rahmen des Funktionalintegral-Formalismus können die real- oder imaginärzeitabhängigen Pfade nach Störungen um ihre statische Komponente entwickelt werden. Für die Näherung, die eine solche Entwicklung im Sinne der lokalen RPA nach der zweiten Ordnung abbricht, wird hier der Name "*Perturbed Static Path Approximation*" (PSPA) [AA97] benutzt (siehe Abschnitt 5.3).
- Schließlich ist es noch möglich, die in der PSPA auftretenden Frequenzen einem Variationsprinzip zu unterwerfen, das die freie Energie minimiert. Dieses Näherungsschema wird hier als "*Variationsverfahren*" [RH04b] bezeichnet (siehe Abschnitt 5.6).

Kapitel 2

Kollektive Kernbewegung und Transport

In Spektren von Atomkernen findet man Strukturen, die als kollektive Anregungen interpretiert werden können, an denen viele Nukleonen gemeinsam teilhaben. Dabei unterscheidet man grundsätzlich zwischen isoskalaren und isovektoriellen Anregungen. Bei *isoskalaren* Moden bewegen sich Protonen und Neutronen in Phase, bei *isovektoriellen* gegenphasig. In dieser Arbeit wird ausschließlich die erste Kategorie behandelt.

Ein wichtiges Beispiel für kollektive Kernbewegung, auf das in dieser Arbeit jedoch nicht eingegangen wird, sind die *Rotationsanregungen* deformierter Kerne. In Spektren sind diese an den typischen $J(J + 1)$ -Banden des Drehimpulses zu erkennen. Darüber hinaus gibt es in Spektren oft Strukturen mit nahezu äquidistanten Niveauabständen. Diese können als *Vibrationsanregungen* kleiner Amplitude von quantenmechanischen, annähernd harmonischen Oszillatoren interpretiert werden, die um eine stabile Gleichgewichtslage schwingen. Vibrations- und Rotationsanregungen können verkoppelt sein.

In dieser Arbeit wird das Hauptaugenmerk auf kollektive Kernbewegung *großer Amplitude* gelegt. Prominente Beispiele hierfür sind die Kernfusion und die Kernspaltung.

2.1 Von der mikroskopischen Theorie zum Hamilton-Operator für die Kollektivbewegung

Eine mikroskopische Beschreibung von endlichen Vielteilchen-Systemen wie Atomkernen startet oft von der Zweiteilchen-Wechselwirkung. In zweiter Quantisierung lautet ein dazu

geeigneter Hamilton-Operator im Allgemeinen

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} T_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{V}_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k . \quad (2.1)$$

Hier sind $\bar{V}_{ijkl} = V_{ijkl} - V_{ijlk}$ die unter Teilchenvertauschung antisymmetrisierten Matrixelemente der Zweiteilchen-Wechselwirkung. Zum späteren Gebrauch kann (2.1) in eine Summe von separablen Wechselwirkungen zerlegt werden (siehe z.B. [AA97]):

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} H_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^m k_\mu \sum_{ijkl} F_{il}^\mu \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l F_{jk}^\mu \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k = \hat{H} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^m k_\mu \hat{F}^\mu \hat{F}^\mu \quad (2.2)$$

Dabei ist die Zahl m der notwendigen Terme höchstens gleich dem Quadrat der Zahl der Einteilchen-Zustände.

Im Rahmen der Näherung, dass die Vielteilchen-Zustände zu allen Zeiten durch Slater-Determinanten gegeben sind, kann die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für den Hamilton-Operator (2.1) mithilfe der *TDHF-Methode* (“time dependent Hartree-Fock”) [Dir30] gelöst werden. Dabei wird Selbstkonsistenz zwischen dem zeitabhängigen mittleren Feld, das von den Nukleonen wechselseitig erzeugt wird und in dem sie sich zugleich bewegen, und der Nukleonendichte garantiert. Mithilfe der “adiabatischen Näherung”, d.h. der Annahme, dass die Zeitskala τ_{coll} für die Variation der Dichteverteilung sehr viel größer ist als diejenige der Bewegung der Nukleonen im mittleren Feld τ_{nucl} , können aus den TDHF-Gleichungen kollektive Koordinaten und für diese eine klassische Hamilton-Funktion abgeleitet werden (“Adiabatic TDHF” (ATDHF)) [BK68, BGV76, BV78]. Nach einer Requantisierung der Hamilton-Funktion können so auch Quanteneffekte der kollektiven Dynamik behandelt werden. Eine andere Möglichkeit, aus dem Hamilton-Operator (2.1) kollektive Koordinaten abzuleiten, mit deren Hilfe Quanteneffekte beschrieben werden können, besteht in der Methode der *Generatorkoordinaten* [HW53, GW57, Gri57]. Eine ausführliche Darstellung dieser mikroskopischen Theorien findet man in [RS80b]. In [Hol73] wurde anhand des Lipkin-Meshkov-Glick-Modells [LMG65], einem exakt lösbaeren Vielteilchen-Modell, ein Vergleich der genannten Verfahren angestellt.

Mit Hilfe der “*cranking*”-Methode wurde in [RB74] die Lösung der TDHF-Gleichungen großer Amplitude zu einem beliebigen Zeitpunkt t_0 auf ein *statisches* Problem abgebildet. Der Hamilton-Operator wird dabei so konstruiert, dass seine Eigenzustände für $t = t_0$ mit den Lösungen der TDHF-Gleichungen zusammenfallen. Für adiabatische und nicht-adiabatische Prozesse kann so eine Energiefunktion berechnet werden, bei der Selbstkonsistenz bezüglich der eingeführten kollektiven Koordinaten und Geschwindigkeiten berücksichtigt ist.

Ein anderer Weg zur Einführung kollektiver Koordinaten wurde von D. Bohm und D. Pines verfolgt. In ihrer grundlegenden Arbeit [BP53] wurde zur Untersuchung kollektiver Anregungen von Elektronengasen die “*Random Phase Approximation*” (RPA) entwickelt.

Diese beschreibt Vibrationen um einen stabilen Punkt der Energiefunktion und ist in der TDHF-Theorie als Grenzfall kleiner Amplitude enthalten. Eine Anwendung der Bohm-Pines-Methode auf kollektive Kernbewegung, die auch die Beschreibung von Fluktuationen ermöglicht, wird in [HS88] beschrieben.

Eine weitere Möglichkeit, aus dem Hamilton-Operator (2.1) kollektive Koordinaten abzuleiten, beruht auf dem Funktionalintegral-Formalismus (siehe z.B. [NO88]). Für imaginäre Zeiten wurde dies zum ersten Mal in [Str57, Hub59] gemacht. Eine ausführliche Darstellung dieser Theorie sowie von neu entwickelten Erweiterungen wird im Kapitel 5 dieser Arbeit gegeben.

Zur praktischen Behandlung der Kollektivbewegung in Atomkernen wird häufig das “Kopenhagener Bild” der Kernphysik benutzt [BM75a, BM75b]. Dabei wird ein *phänomenologischer* Hamilton-Operator benutzt, dessen Potential von zeitabhängigen Parametern $Q(t) \in \mathbb{R}$ abhängt und in dem sich die Nukleonen bewegen. Aus der Forderung nach Selbstkonsistenz zwischen dem phänomenologischen Potential und der Dichte der Nukleonen erhält man eine Säkulargleichung für die Frequenzen der Kollektivbewegung.

2.2 Die Anwendung der Theorie des linearen Response

Aus einem vereinfachten Hamilton-Operator der Form (2.2) mit nur einem separablen Wechselwirkungsterm

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}(Q_0) + \frac{k(Q_0)}{2} \hat{F}(Q_0) \hat{F}(Q_0) , \quad (2.3)$$

wo \hat{H} , k und \hat{F} von Q_0 abhängen können, erhält man durch Anwenden der “mean field”-Näherung mit der Definition

$$Q(t) - Q_0 = k \langle \hat{F} \rangle_t \quad (2.4)$$

einen von der kollektiven Koordinate $Q(t) \in \mathbb{R}$ abhängigen Hamilton-Operator

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{RMF}}(Q) = \hat{H}(Q_0) + (Q - Q_0) \hat{F} - \frac{1}{2k} (Q - Q_0)^2 . \quad (2.5)$$

Der letzte Term subtrahiert hier die Doppelzählung der potentiellen Energie der separablen Zweiteilchen-Wechselwirkung und garantiert somit, dass der Erwartungswert dieses RMF-Hamilton-Operators (“renormalized mean field”) mit der totalen Energie zusammenfällt. Eine Verallgemeinerung auf mehrere kollektive Freiheitsgrade ist möglich (siehe z.B. [Hof97]).

In dieser Arbeit wird häufig zwischen dem Gesamtsystem und dem nukleonischen System unterschieden. Mit *Gesamtsystem* ist das System der Nukleonen des Atomkerns gemeint,

wie es durch den Hamilton-Operator (2.1) oder (2.2) gegeben ist. Das *nukleonische* oder *intrinsische System* ist das System der Nukleonen, das durch einen von einer kollektiven Koordinate Q abhängigen Hamilton-Operator wie z.B. (2.5) beschrieben wird.

2.2.1 Die nukleonische Response-Funktion und Einteilchen-Green-Funktionen

Der Hamilton-Operator (2.5) hat die Struktur, die üblicherweise als Ausgangspunkt für die Entwicklung der Theorie des *linearen Response* genommen wird (siehe z.B. Abschnitt A.2 von [Hof97]). Die zeitabhängige Änderung des Erwartungswerts des Operators \hat{F} aufgrund einer kleinen Änderung des Feldes $Q(t) - Q_0$ lautet:

$$\delta\langle\hat{F}\rangle_t = - \int_{-\infty}^{\infty} ds \chi(t-s) (Q(s) - Q_0) \quad (2.6)$$

Man beachte, dass das ‘‘äußere Feld’’ $Q(t)$ dabei tatsächlich die Form des Potentials beschreibt, in dem sich die Nukleonen bewegen. Die retardierte *Response-Funktion* $\chi(t)$, die hier kausales Verhalten garantiert, ist mit der Stufenfunktion $\Theta(t)$ und

$$\chi''(t-s) = \frac{1}{2\hbar} \sum_{k,l,k',l'} F_{lk} F_{k'l'} \left\langle \left[\hat{a}_l^\dagger(t) \hat{a}_k(t), \hat{a}_{k'}^\dagger(s) \hat{a}_{l'}(s) \right] \right\rangle_{Q_0} \quad (2.7)$$

durch

$$\chi(t-s) = 2i\Theta(t-s)\chi''(t-s) \quad (2.8)$$

gegeben. Durch Fourier-Transformation kann in die Frequenz-Darstellung übergegangen werden. Auf der reellen ω -Achse gilt $\chi''(\omega) = \text{Im } \chi(\omega) = -\chi''(-\omega)$. Aufgrund der Tatsache, dass χ'' benutzt werden kann, um den *irreversiblen* Energieübertrag der Störung ($Q(t) - Q_0$) \hat{F} auf das durch $\hat{H}(Q_0)$ alleine beschriebene System auszudrücken, wird diese Größe *dissipative Response-Funktion* genannt. Für die *reaktive Response-Funktion* gilt auf der reellen ω -Achse $\chi'(\omega) = \text{Re } \chi(\omega) = \chi'(-\omega)$. Die Abhängigkeit der Response-Funktionen von der Temperatur T und der kollektiven Koordinate Q_0 wird im Folgenden nicht immer explizit angegeben.

Unter Verwendung des *Produktansatzes*

$$\begin{aligned} & \left\langle \hat{a}_l^\dagger(t) \hat{a}_k(t) \hat{a}_{k'}^\dagger(s) \hat{a}_{l'}(s) \right\rangle_{Q_0} \\ & \approx \left\langle \hat{a}_l^\dagger(t) \hat{a}_k(t) \right\rangle_{Q_0} \left\langle \hat{a}_{k'}^\dagger(s) \hat{a}_{l'}(s) \right\rangle_{Q_0} + \left\langle \hat{a}_l^\dagger(t) \hat{a}_{l'}(s) \right\rangle_{Q_0} \left\langle \hat{a}_k(t) \hat{a}_{k'}^\dagger(s) \right\rangle_{Q_0}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

erhält man für den Erwartungswert von (2.7) näherungsweise

$$\left\langle \hat{a}_l^\dagger(t) \hat{a}_{l'}(s) \right\rangle_{Q_0} \left\langle \hat{a}_k(t) \hat{a}_{k'}^\dagger(s) \right\rangle_{Q_0} - \left\langle \hat{a}_{k'}^\dagger(s) \hat{a}_k(t) \right\rangle_{Q_0} \left\langle \hat{a}_{l'}(s) \hat{a}_l^\dagger(t) \right\rangle_{Q_0}. \quad (2.10)$$

Die Relation (2.9) ist immer dann eine exakte Identität, wenn Teilchen und Löcher als *statistisch unkorreliert* angesehen werden können [Hov55]. Mithilfe der Einteilchen-Green-Funktionen

$$g_{kk'}(t-s) = -\frac{i}{\hbar} \left\langle \hat{T} \hat{a}_k(t) \hat{a}_{k'}^\dagger(s) \right\rangle_{Q_0}, \quad (2.11)$$

wo \hat{T} der Zeitordnungsoperator ist, bzw. deren Darstellung $g_{kk'}(z)$ in der komplexen Frequenz-Ebene lässt sich die Response-Funktion mit der spektralen Dichte $\varrho_{kk'}(\omega)$ folgendermaßen darstellen (siehe z.B. Abschnitt A.3.3 von [Hof97]):

$$\chi(z) = -\hbar \sum_{l,k} F_{lk} F_{kl} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} n(\hbar\Omega + \mu) [g_k(z + \Omega) \varrho_l(\Omega) + \varrho_k(\Omega) g_l(\Omega - z)] \quad (2.12)$$

Hier wurden die Näherungen $\varrho_{kk'}(\omega) = \delta_{kk'} \varrho_k(\omega)$ und $g_{kk'}(z) = \delta_{kk'} g_k(z)$ gemacht. Die Fermi-Besetzungszahlen sind hier mit dem chemischen Potential μ und der Temperatur T durch

$$n(\epsilon) = \frac{1}{1 + \exp[(\epsilon - \mu)/T]} \quad (2.13)$$

definiert.

2.2.2 Die Berücksichtigung der Restwechselwirkung

Im *Modell unabhängiger Teilchen* (“Independent Particle Model” (IPM)) identifiziert man zur Beschreibung von kollektiver Kernbewegung den ungestörten Hamilton-Operator $\hat{H}(Q_0)$ aus (2.5) mit demjenigen des deformierten Schalenmodells, so dass die Relation (2.9) exakt gilt. Anstelle der Einteilchen-Energien $\epsilon_k(Q_0)$ von $\hat{H}(Q_0) \equiv \hat{H}_{\text{IPM}}(Q_0)$ ist es sinnvoll, fortan die *nukleonischen Frequenzen*

$$\hbar\omega_k = \epsilon_k - \mu \quad \text{und} \quad \hbar\omega_{kl} = \epsilon_k - \epsilon_l \quad (2.14)$$

zu verwenden. Die Einteilchen-Green-Funktionen lauten im IPM

$$g_k^{(0)}(z) = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{z - \omega_k} \quad (2.15)$$

und die Response-Funktion (2.12) kann explizit in der Form

$$\chi^{\text{IPM}}(z) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{l,k} F_{lk} F_{kl} \frac{n(\epsilon_k) - n(\epsilon_l)}{\omega_{kl} - z} \quad (2.16)$$

geschrieben werden.

Im IPM wird allerdings die *Zweiteilchen-Restwechselwirkung* $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ zwischen den Nukleonen nicht berücksichtigt, die die 1p1h-Anregungen (“ein Teilchen - ein Loch”) von

$\hat{H}_{\text{IPM}}(Q_0)$ an kompliziertere Anregungen ($n\text{pnh}$ -Anregungen und tatsächliche Compoundkern-Zustände) koppelt. $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ beschreibt die inkohärenten Streuprozesse zwischen den Teilchen und führt zu *Relaxationsprozessen*. Für eine realistischere Behandlung der Kollektivbewegung sollte daher verwendet werden:

$$\hat{H}(Q_0) = \hat{H}_{\text{IPM}}(Q_0) + \hat{V}_{\text{res}}^{(2)} \quad (2.17)$$

Im Folgenden wird angenommen, dass $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ *nicht* von Q abhängt. Andernfalls würde in (2.5) der lineare Term durch die Restwechselwirkung eine Modifikation erfahren.

Die Restwechselwirkung wird hier nicht explizit behandelt. Vielmehr wird ihre Wirkung bei der Berechnung der Response-Funktionen durch *“Anziehen”* (*“dressing”*) der Einteilchen-Green-Funktionen berücksichtigt. Teilchen und Löcher werden dabei als unabhängig behandelt. Man bekommt für die Einteilchen-Green-Funktionen anstelle von (2.15) das allgemeine Resultat

$$g_k^{(\Gamma)}(z) = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{z - \omega_k - \Sigma_k(z)/\hbar}. \quad (2.18)$$

Es wäre selbst bei einer vollständig bekannten Restwechselwirkung ein äußerst schwieriges Unterfangen, die *Selbstenergie*

$$\Sigma_k(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{\Gamma_k(\Omega)}{z - \Omega} \quad (2.19)$$

von $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ startend zu berechnen. Stattdessen kann die Wirkung von $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ mit dem *phänomenologischen Ansatz* [SJH84]

$$\Gamma_k(\omega) = \frac{1}{\Gamma_0} \frac{(\hbar\omega - \mu)^2 + \pi^2 T^2}{1 + \frac{1}{c^2} [(\hbar\omega - \mu)^2 + \pi^2 T^2]} \quad (2.20)$$

für den Imaginärteil der Selbstenergie parametrisiert werden. Die Breite der Quasiteilchen hängt dabei nicht vom Zustand $|k\rangle$, sondern nur von der Energie und der Temperatur ab. In [Hof05] wird ein Vergleich der Breite aus (2.20) mit den Abb. 7.19 bis 7.21 von [MS91] angestellt. Das Abweichen vom rein quadratischen Anwachsen mit dem Abstand von der Fermi-Energie ist in guter Übereinstimmung mit empirischen Werten. Als gute Wahl für die Parameter haben sich $\Gamma_0 \approx 33$ MeV und $c \approx 20$ MeV herausgestellt.

2.2.3 Die Säkulargleichung und die kollektive Response-Funktion

Aus der Forderung nach Energieerhaltung kann bei gegebener thermischer Anregung aus (2.5) eine Bewegungsgleichung für die Kollektivbewegung abgeleitet werden. Die Säkulargleichung für die zulässigen Frequenzen ϖ_μ von $Q(t)$ lautet:

$$1 + k \chi(\varpi_\mu) = 0 \quad (2.21)$$

Koppelt man an (2.5) zusätzlich additiv ein tatsächlich äußeres Feld $f_{\text{ext}}(t) \hat{F}$ an und fordert *Selbstkonsistenz* (2.4) zwischen dem zeitabhängigen Erwartungswert von \hat{F} und der kollektiven Koordinate $Q(t)$, so ergibt sich für die über $\delta\langle\hat{F}\rangle_\omega = -\chi_{\text{coll}}(\omega) f_{\text{ext}}(\omega)$ definierte *kollektive Response-Funktion* bei festgehaltener thermischer Anregung der Zusammenhang

$$\chi_{\text{coll}}(\omega) = \frac{\chi(\omega)}{1 + k \chi(\omega)} \quad \text{für} \quad \omega \neq 0 . \quad (2.22)$$

Im IPM hat $\chi_{\text{coll}}(\omega)$ die Form der RPA-Response-Funktion $\chi_{\text{coll}}^{\text{IPM}}(\omega) \equiv \chi_{\text{RPA}}(\omega)$ und der Imaginärteil $(\chi_{\text{coll}}^{\text{IPM}})''(\omega)$ hat auf der reellen ω -Achse die Struktur einer *diskreten* Summe von Delta-Funktionen, die an den Lösungen ϖ_μ von (2.21) sitzen:

$$(\chi_{\text{coll}}^{\text{IPM}})''(\omega) = \sum_{\mu} f_{\mu} \delta(\omega - \varpi_{\mu}) \quad (2.23)$$

Die Stärken f_{μ} ergeben sich dabei aus den Matrixelementen F_{lk} und den nukleonischen Frequenzen ω_{lk} . Mit der Ersetzung der ungestörten Einteilchen-Green-Funktionen (2.15) durch (2.18)

$$g_k^{(0)}(z) \longrightarrow g_k^{(\Gamma)}(z) \quad (2.24)$$

ergibt sich mit (2.12) und (2.22) eine kollektive Response-Funktion $\chi_{\text{coll}}^{\Gamma}(\omega)$, deren Imaginärteil auf der reellen ω -Achse eine *kontinuierliche* Funktion von ω ist. An diese kann die Response-Funktion eines *gedämpften harmonischen Oszillators*

$$\chi_{\text{osc}}(\omega) = \frac{-1}{M\omega^2 + i\gamma\omega - C} \quad (2.25)$$

mit Trägheit M , Reibung γ und Steifheit C angepasst werden:

$$\chi_{\text{coll}}^{\text{IPM}}(z) \longrightarrow \chi_{\text{coll}}^{\Gamma}(z) \longrightarrow \chi_{\text{osc}}(z) \quad (2.26)$$

Somit können *Transportkoeffizienten für die dissipative Kollektivbewegung* aus einer mikroskopischen Theorie extrahiert werden (siehe z.B. [Hof97]). Eine ausführliche Diskussion dieser Methode findet sich im Kapitel 7 der vorliegenden Arbeit. Wie die Response-Funktion selbst hängen die Transportkoeffizienten von der Temperatur und der kollektiven Koordinate ab: $M = M(T, Q_0)$, $\gamma = \gamma(T, Q_0)$ und $C = C(T, Q_0)$. Quanteneffekte der nukleonischen Bewegung schlagen sich in diesen Abhängigkeiten nieder. Die Implikationen dieser Eigenschaft auf die Diffusionskoeffizienten und die Fluktuationen werden im Kapitel 3 behandelt.

2.3 Transportgleichungen

In der Kernphysik werden zur Beschreibung gedämpfter kollektiver Dynamik, wie sie beispielsweise bei Kernspaltung oder der Formation superschwerer Elemente auftritt, häufig

Transportgleichungen für die kollektive Phasen- bzw. Ortsraumdichte benutzt. In [Kra40, HN76, NH77, GW80, SH83, HN83] wurden zu diesem Zweck Fokker-Planck-Gleichungen und in [WAT⁺97, AWOA99] Smoluchowski-Gleichungen (SG) verwendet. Zur Beschreibung der thermischen Diffusionsprozesse können auch Langevin-Gleichungen (LG) herangezogen werden (siehe z.B. [ABGW00, Abe02, AO03]). Es gibt ebenfalls die Möglichkeit zur Beschreibung kollektiver Kernbewegung mit molekulardynamischen Rechnungen [HPA⁺98, WLW02, WWL03].

2.3.1 Die Kramers-Gleichung

Eine im klassischen Grenzfall in der Kernphysik häufig benutzte Form der Fokker-Planck-Gleichung ist die *Kramers-Gleichung* (KG) [Kra40]. Eine Verallgemeinerung auf temperatur- und koordinatenabhängige Koeffizienten lautet in einer Dimension:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(Q, P, t) = & \left[-\frac{P}{M(Q)} \frac{\partial}{\partial Q} + \left(\left(\frac{\partial}{\partial Q} \frac{P^2}{2M(Q)} \right) + \frac{\partial V(Q)}{\partial Q} \right) \frac{\partial}{\partial P} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial P} \frac{P}{M(Q)} \gamma(Q) + D_{PP}(Q) \frac{\partial^2}{\partial P^2} \right] f(Q, P, t) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Der Ausdruck *Transportkoeffizient* wird in dieser Arbeit für die Transportkoeffizienten der *mittleren Bewegung* verwendet, wie die Trägheit M , die Reibung γ und die Steifheit $C = V''(Q)$ des zugrunde liegenden Potentials $V(Q)$ oder Verhältnisse dieser Größen. Die Transportkoeffizienten werden begrifflich unterschieden von den *Diffusionskoeffizienten*, die wie D_{PP} die Zeitentwicklung der *Fluktuationen* bestimmen. Da eine mögliche Temperaturabhängigkeit aller Koeffizienten in die Struktur der Gleichung (2.27) nicht eingeht, wurde sie auch nicht explizit angeschrieben. Die erste Zeile von (2.27) entspricht der Liouville-Gleichung $\partial f / \partial t = \{\mathcal{H}, f\}$ eines konservativen Systems, das durch die klassische Hamilton-Funktion

$$\mathcal{H}(Q, P) = \frac{P^2}{2M(Q)} + V(Q) \quad (2.28)$$

beschrieben werden kann. Die zweite Zeile beschreibt den Einfluss von dissipativen und fluktuierenden Kräften. Der Diffusionskoeffizient ist dabei durch die klassische Einstein-Relation gegeben:

$$D_{PP}(Q) = \gamma(Q)T \quad (2.29)$$

Für gebundene Systeme ist $f_{\text{glob}}(Q, P) = \exp(-\mathcal{H}(Q, P)/T)$ eine globale Lösung der KG (2.27).

Für $M = \text{const}$ tritt im Grenzfall starker Reibung in der SG für die Ortsraumdichte $n(Q, t)$ die Trägheit nicht mehr auf. Man erwartet intuitiv, dass Trägheit und kinetische Energie in diesem Grenzfall auch für $M = M(Q)$ keinen Einfluss auf die Dynamik mehr haben. Eine Version, die diese Forderung befriedigt und deren Gleichgewichtslösung

$n_{\text{glob}}(Q) = \exp(-V(Q)/T)$ nicht von der Reibung abhängt, ist durch

$$\frac{\partial}{\partial t} n(Q, t) = \frac{\partial}{\partial Q} \left(\frac{1}{\gamma(Q)} \frac{\partial V(Q)}{\partial Q} + \frac{T}{\gamma(Q)} \frac{\partial}{\partial Q} \right) n(Q, t) \quad (2.30)$$

gegeben. Man beachte die Stellung der Differentialoperatoren zum Term $D_{QQ}^{\text{Smol}} = T/\gamma(Q)$. Andere Möglichkeiten, die von einer unterschiedlichen Behandlung stochastischer Integrale herrühren, werden in [Bun04] im Zusammenhang mit kollektiver Kernbewegung ausführlich diskutiert. Derzeit ist zudem nicht vollständig geklärt, ob (2.30) für koordinatenabhängige Trägheit $M = M(Q)$ tatsächlich die richtige Gleichung für den überdämpften Grenzfall darstellt. Eine detaillierte Untersuchung dieser Fragestellung erfolgt in [Bun04].

2.3.2 Die lokal harmonische Näherung

Die KG (2.27) kann um einen Phasenraumpunkt $(Q_0, P_0 = 0)$ linearisiert werden. Dazu werden in einer Entwicklung nach Abweichungen $Q - Q_0$ und $P - P_0 \equiv P$ nur Terme von höchstens linearer Ordnung berücksichtigt. Nach Transformation auf die Koordinate $\mathcal{Q} = Q - Q_m$, wo Q_m das Extremum des Näherungsszillators an $V(Q)$ bei Q_0 ist, ergibt sich die linearisierte klassische Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathcal{Q}, P, t) = & \left[-\frac{P}{M} \frac{\partial}{\partial \mathcal{Q}} + \text{sgn}C |C| \mathcal{Q} \frac{\partial}{\partial P} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial P} \frac{P}{M} \gamma + D_{PP} \frac{\partial^2}{\partial P^2} \right] f(\mathcal{Q}, P, t). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Alle Koeffizienten müssen in der linearisierten Version an der Stelle Q_0 genommen werden: $M = M(Q_0)$, $\gamma = \gamma(Q_0)$, $C = C(Q_0) = V''(Q_0)$ und $D_{PP} = D_{PP}(Q_0)$. Mithilfe der Bewegungsgleichungen für die ersten und zweiten Momente kann (2.31) so erweitert werden, dass in harmonischer Näherung auch *Quanteneffekte* beschrieben werden können [HSO89, HI91] (siehe auch [Hof97]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathcal{Q}, P, t) = & \left[-\frac{P}{M} \frac{\partial}{\partial \mathcal{Q}} + \text{sgn}C |C| \mathcal{Q} \frac{\partial}{\partial P} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial P} \frac{P}{M} \gamma + D_{QP} \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{Q} \partial P} + D_{PP} \frac{\partial^2}{\partial P^2} \right] f(\mathcal{Q}, P, t) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Dabei tritt ein neuer Diffusionskoeffizient $D_{QP} \neq 0$ auf und D_{PP} erfüllt nicht länger die Einstein-Relation (2.29). Im Kapitel 3 werden die Transport- und Diffusionskoeffizienten ausführlich behandelt.

Die lokale Verwendung der quantenmechanischen KG (2.32), wo die Transport- und Diffusionskoeffizienten aus der im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Linear-Response-Theorie entnommen werden, wird in dieser Arbeit *lokal harmonische Näherung* (“Locally

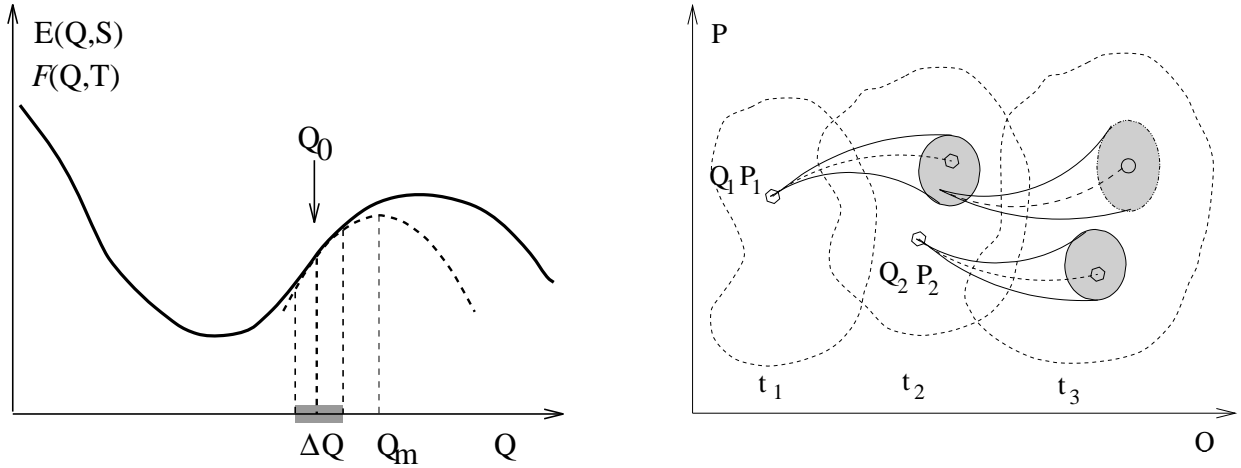


Abbildung 2.1: Links: Harmonische Näherung an ein Potential, wie es typischerweise bei Kernspaltung und Schwerionen-Reaktionen auftritt. Für eine zeitliche Entwicklung, die $Q(t)$ nicht aus dem Bereich ΔQ um den Entwicklungspunkt Q_0 herausführt, sind mit dieser Näherung vernünftige Ergebnisse zu erwarten. Rechts: Konstruktion von kollektiver Bewegung großer Amplitude mit der LHA durch Aneinanderreihen von harmonischen Näherungen. Die Kegel symbolisieren die Lösungen der KG (2.32).

Harmonic Approximation” (LHA)) genannt (vgl. [Hof97]). In Abb. 2.1 ist links die Bedeutung der harmonischen Näherung an das Potential $V(Q)$ am Punkt Q_0 illustriert. Die Konstruktion einer kollektiven Bewegung der Phasenraumdichte $d(Q, P, t)$ mit *großer* Amplitude ist durch Aneinanderreihen von kurzen Zeitschritten $\delta t_i = t_i - t_{i-1}$ möglich, in denen die Propagation durch (2.32) bestimmt ist:

$$d(Q_i, P_i, t_i) = \int dQ_{i-1} \int \frac{dP_{i-1}}{2\pi\hbar} K(Q_i, P_i, t_i | Q_{i-1}, P_{i-1}, t_{i-1}) d(Q_{i-1}, P_{i-1}, t_{i-1}) \quad (2.33)$$

Der “Propagator” $K(Q_i, P_i, t_i | Q_{i-1}, P_{i-1}, t_{i-1})$ erfüllt dabei die KG (2.32). Mit den Zeitskalen τ_{nucl} der nukleonischen Bewegung im mittleren Feld und der Kollektivbewegung τ_{coll} muss dabei die Ungleichung

$$\tau_{\text{nucl}} \leq \delta t_i \ll \tau_{\text{coll}} \quad (2.34)$$

erfüllt sein. Alle in (2.32) auftretenden Koeffizienten müssen nach jedem Zeitschritt an der neuen Koordinate genommen werden [SH83]. Die LHA erlaubt auch die Berücksichtigung der Umwandlung von kollektiver Energie in innere Anregungsenergie und den damit verbundenen Temperaturzuwachs. Dazu wird bei jedem Schritt Energieerhaltung im Mittel gefordert und die verlorengangene kinetische Energie der thermischen Anregung zugeschlagen: $\Delta E_i^{\text{kin}} = -\Delta E_i^*$. Für mit der lokal harmonischen Näherung verträgliche Zeitschritte (2.34) sollten Dynamik und Thermodynamik nicht stark von der Größe der gewählten δt_i abhängen. Das Funktionsprinzip der LHA ist in Abb. 2.1 rechts illustriert. Eine ausführliche Diskussion dieser Theorie, die es ermöglicht, *Quanteneffekte der Kollektivbewegung großer Amplitude* zu berücksichtigen, findet man in [Hof97].

2.3.3 Die Verwendung dimensionsloser Koordinaten

Für einen stabilen ($C > 0$) oder instabilen Oszillator ($C < 0$) kann die KG (2.32) unter Verwendung der kanonischen Transformation

$$Q \longrightarrow q = \sqrt{\frac{|C|}{\hbar\varpi}} Q \quad \text{und} \quad P \longrightarrow p = \sqrt{\frac{\hbar}{M\varpi}} P \quad (2.35)$$

auf dimensionslose Koordinaten und Impulse der Dimension \hbar folgendermaßen geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(q, p, t) = & \left[-\frac{\varpi p}{\hbar} \frac{\partial}{\partial q} + \text{sgn}C \hbar\varpi q \frac{\partial}{\partial p} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial p} \frac{p}{\tau_{\text{kin}}} + d_{qp} \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} + d_{pp} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] f(q, p, t) \end{aligned} \quad (2.36)$$

Im Anhang A sind Lösungen dieser Gleichung zusammengestellt. Der Vorteil dieser Form besteht darin, dass hier als Transportkoeffizienten nur noch die Verhältnisse

$$\frac{1}{\tau_{\text{kin}}} = \frac{\Gamma_{\text{kin}}}{\hbar} = \frac{\gamma}{M} \quad (2.37)$$

$$\tau_{\text{coll}} = \frac{\gamma}{|C|} \quad (2.38)$$

$$\varpi^2 = \frac{|C|}{M} = \frac{1}{\tau_{\text{coll}}\tau_{\text{kin}}} \quad (2.39)$$

$$\text{und} \quad \eta = \frac{\gamma}{2M\varpi} = \frac{\gamma}{2\sqrt{M|C|}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\tau_{\text{coll}}}{\tau_{\text{kin}}}} \quad (2.40)$$

auftreten. Diese sind *unabhängig* von der zugrundeliegenden Wahl der kollektiven Koordinate Q und ihres konjugierten Impulses P , da geometrische Faktoren, die bei der Transformation von einer Wahl in eine andere auftreten, aus den Verhältnissen (2.37) bis (2.40) herausfallen. Die Zeitskalen τ_{kin} und τ_{coll} sind die Relaxationszeiten der Impulsverteilung in das thermische Gleichgewicht sowie für $C > 0$ diejenige der Koordinate Q im harmonischen Oszillator mit Steifheit C und Reibung γ . Die Frequenz des stabilen oder instabilen Oszillators ist durch ϖ gegeben und der effektive Dämpfungskoeffizient η gibt an, ob das System unterdämpft ($\eta < 1$) oder überdämpft ist ($\eta > 1$).

2.4 Kollektive Kernbewegung großer Amplitude

2.4.1 “Fusion-fission”-Reaktionen

Zur Produktion von superschweren Elementen am Ende des Periodensystems (siehe z.B. [Oga99, HM00, Oga01]) werden Schwerionen-Kollisionen herbeigeführt, bei denen versucht

wird, zwei Atomkerne zu fusionieren. Wenn sich Projektil und Target nahe kommen, beginnt das Gesamtsystem aufgrund der Drehimpulserhaltung zu rotieren und es können eine Vielzahl verschiedener Prozesse ablaufen.

Beim “*quasi-fission*” genannten Prozess bleibt die Elongation stets groß und das stark deformierte System spaltet, *bevor* vollständige Fusion stattgefunden hat. Beim eigentlichen *Fusionsprozess* überquert das System mehrere Barrieren in einer mehrdimensionalen Potentiallandschaft, als deren Koordinaten beispielsweise Größen wie die Elongation, Massenasymmetrie und Deformation von Projektil und Target sowie deren relative Orientierung benutzt werden können. Das System entwickelt sich schließlich zu einem sphärischen oder schwach deformierten, thermisch angeregten *Compoundkern*. Für massensymmetrische Systeme aus Projektil und Target dominiert der “quasi-fission”-Prozess stark. Bei asymmetrischen Konfigurationen besteht jedoch die (sehr kleine) Wahrscheinlichkeit zur Produktion von Compoundkernen durch vollständige Fusion.

Durch Emission leichter Teilchen (Neutronen, γ 's, ...) gibt der Compoundkern einen Teil seiner Anregungsenergie und seines Drehimpulses ab. Damit tatsächlich ein superschweres Element produziert worden ist, das meist durch seine α -Zerfallskette nachgewiesen wird, muss der Compoundkern noch gegen seinen Zerfall durch *Kernspaltung* stabil sein.

2.4.2 Kernfusion

Zur theoretischen Behandlung des Fusionsprozesses wird dieser oft in drei Schritte zerlegt [ACN⁺95, AASV98, DH00, Abe02, SKA02, KSA02, AO03]. Die Wahrscheinlichkeit, tatsächlich ein superschweres Element zu produzieren, ergibt sich dann aus dem Produkt der Wahrscheinlichkeiten für die Einzelprozesse für das Bilden des stark deformierten Verbandes (“sticking”), die Entwicklung zum Compoundkern (“formation”) und die Stabilität gegen Spaltung (“survival”). Der Wirkungsquerschnitt für die Bildung eines superschweren Elements lautet mit der reduzierten Wellenlänge $\lambda = \lambda/2\pi$ für einen Prozess mit der Energie E_{cm} im Schwerpunktsystem, Drehimpuls J und der Anregungsenergie E^* des Compoundkerns:

$$\sigma_{\text{res}}(E_{cm}) = \pi \lambda^2 \sum_J (2J + 1) \cdot \Pi_{\text{stick}}^J(E_{cm}) \cdot \Pi_{\text{form}}^J(E_{cm}) \cdot \Pi_{\text{surv}}^J(E^*) \quad (2.41)$$

Zur Erhöhung der (extrem kleinen) Ausbeute in diesem komplizierten Prozess ist eine günstige Wahl der Einschussenergie äußerst wichtig, da im Allgemeinen die Bildungswahrscheinlichkeit mit der Schwerpunktsenergie E_{cm} zu- und die Überlebenswahrscheinlichkeit mit der Anregungsenergie E^* abnimmt. Ein Problem besteht darin, dass insbesondere für die Reibungskraft im Eingangskanal keine mikroskopische Theorie existiert, die auch Quantenfluktuationen berücksichtigt. Dort ist die kollektive Relativgeschwindigkeit so hoch, dass die Trennung der Zeitskalen $\tau_{\text{nucl}} \ll \tau_{\text{coll}}$, wo τ_{coll} die Zeitskala der Energiedissipation ist, nicht erfüllt ist. Folglich gilt die Markov-Näherung in diesem Bereich nicht. Im Kapitel 4,

wo die Compoundkern-Bildung ausführlicher diskutiert wird, werden daher verschiedene Annahmen über die Dämpfungsstärke im Eingangskanal miteinander verglichen.

2.4.3 Kernspaltung

Manche der schweren Kerne am Ende der Nuklidkarte $A \gtrsim 235$ haben eine endliche Lebensdauer durch spontane Spaltung in zwei (meist asymmetrische) mittelschwere Tochterkerne. Auch bei der Mehrzahl der Ereignisse in Experimenten mit Schwerionen steht am Ende einer Kette von Prozessen die Spaltung.

Kernfusion und Kernspaltung sind in gewisser Hinsicht zueinander inverse Prozesse. In beiden Fällen müssen eine oder mehrere Barrieren überwunden werden. Im Rahmen von Transporttheorien erfolgt die Beschreibung in beiden Fällen mit Transportgleichungen für die Orts- oder Phasenraumdichte, in die neben der mehrdimensionalen Potentiallandschaft auch die zugehörigen Trägheits- und Reibungskoeffizienten sowie Diffusionskoeffizienten eingehen. Ein entscheidender Unterschied liegt jedoch in den *Anfangsbedingungen*: Bei der Fusion haben Projektil und Target im Eingangskanal einen endlichen Relativimpuls. Bei der dynamischen Beschreibung der Spaltung wird hingegen die Bohr'sche Hypothese [Boh36] benutzt, wonach der Zerfall eines Compoundkerns unabhängig von seiner Bildung ist. Als Startkonfiguration für Rechnungen zur Kernspaltung dient das thermische Gleichgewicht. Im Gegensatz zum vorher beschriebenen Fall existiert für die equilibrierte Anfangsverteilung eines spaltenden Kerns eine mikroskopische Theorie für die Stärke der Reibungskraft (siehe z.B. [Hof97]).

2.5 Ratenformeln

Die Zerfallsbreite eines isolierten Systems wie eines Atomkerns kann im mikrokanonischen Ensemble mit Energie E durch die Bohr-Wheeler-Formel beschrieben werden [BW39]:

$$\Gamma^{\text{BW}}(E) = \frac{1}{2\pi\Omega_{CN}(E)} \int_0^{E-B} dE_f \Omega_b(E - B - E_f) \quad (2.42)$$

Hier ist E_f die kinetische Energie der Fragmente und B die Barrierenhöhe. Ω_{CN} und Ω_b sind die Niveaudichten des Gesamtsystems (z.B. des spaltenden Compoundkerns) und des Systems an der Barriere. Aus der Zerfallsbreite ergibt sich mit $R = \Gamma/\hbar$ die *Zerfallsrate*, d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass das System in einer Zeiteinheit zerfällt. In der Näherung, dass das mikrokanonische Ensemble durch ein kanonisches mit gleicher Temperatur am Grundzustands-Minimum und an der Barriere ersetzt werden kann, erhält man die Ratenformel des *„statistischen Modells“* (siehe z.B. [SJ87, FG98])

$$R_{\text{stat}} = \frac{T}{2\pi\hbar} \exp(-B/T) . \quad (2.43)$$

Diese Formeln berücksichtigen jedoch den Einfluss der *Dämpfung* der Kollektivbewegung auf die Spaltrate nicht. H.A. Kramers hat daher in Erwiderung auf [BW39] für konstante Transportkoeffizienten zwei von der effektiven Dämpfungsstärke (2.40) abhängige Ratenformeln vorgeschlagen [Kra40]. Für sehr schwache Dämpfung $\eta \ll 1$ erhielt er aus (2.27) mit $M = \text{const}$, $\gamma = \text{const}$ und $D_{PP} = \gamma T = \text{const}$ den “*low viscosity limit*”

$$R_K^{\text{low}} = \eta \frac{2B}{T} \exp(-B/T) . \quad (2.44)$$

Die Rate ist bei sehr kleinen Dämpfungsstärken klein, da hier am Potentialminimum kein thermisches Gleichgewicht herrscht. Die hochenergetischen Anteile der Phasenraumdicke überqueren die Barriere schnell und werden nicht nachgeliefert (“*depletion*”). Für moderate und starke Dämpfung $\eta \gtrsim 0.2$ ist der “*high viscosity limit*” zu benutzen:

$$R_K^{\text{high}} = \frac{\varpi}{2\pi} \left(\sqrt{1 + \eta^2} - \eta \right) \exp(-B/T) \quad (2.45)$$

ϖ ist hier die “*Versuchsfrequenz*”, mit der das System gegen die Barriere anläuft. In diesem Fall ist die Rate gegenüber dem Resultat (siehe z.B. [HTB90, Wei93])

$$R_{\text{TST}} = \frac{\varpi}{2\pi} \exp(-B/T) \quad (2.46)$$

der “*Transition State Theory*” (TST) abgesenkt, da aufgrund der dissipativen Kräfte der Strom vermindert ist. Zudem führen die fluktuierenden Kräfte dazu, dass Wahrscheinlichkeitsdichte, die die Barriere bereits überquert hat, zurückgestreut wird (“*recrossing*”). Man

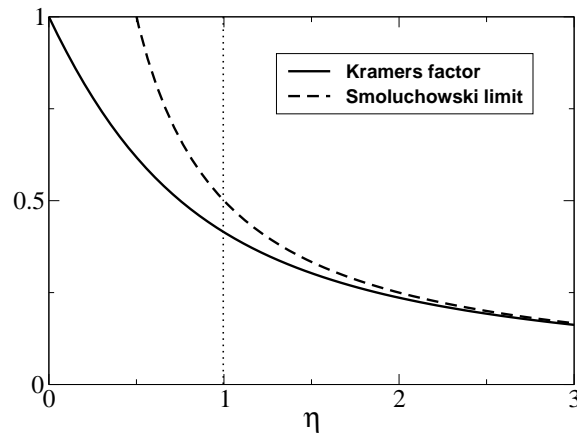


Abbildung 2.2: Vergleich des Kramers-Korrekturfaktors (2.48) mit dem Smoluchowski-Grenzfall. Die Trennung des unterdämpften ($\eta < 1$) vom überdämpften Bereich ($\eta > 1$) ist durch eine gepunktete Linie angedeutet.

beachte, dass (2.45) auch schon im unterdämpften Fall $\eta < 1$ benutzt werden kann. Der “high viscosity limit” darf nicht mit dem stark überdämpften Grenzfall $\eta \gg 1$ (“Smoluchowski-Grenzfall”) verwechselt werden, in dem sich (2.45) auf

$$R_S = \frac{\varpi}{2\pi} \frac{1}{2\eta} \exp(-B/T) = \frac{1}{2\pi} \frac{|C|}{\gamma} \exp(-B/T) \quad (2.47)$$

reduziert. In Abb. 2.2 ist das Verhalten des Kramers-Korrekturfaktors

$$\sqrt{1 + \eta^2} - \eta \longrightarrow \frac{1}{2\eta} \quad \text{für} \quad \eta \gg 1 \quad (2.48)$$

mit der Dämpfung illustriert. Der Smoluchowski-Grenzfall ist bereits bei $\eta \gtrsim 1.5$ sehr gut erreicht.

2.6 Eine Kritik des Caldeira-Leggett-Modells vom Standpunkt der Kernphysik

In [Kra40] wurde die Zerfallsrate eines *klassischen* Systems unter Berücksichtigung von Dissipation studiert. Unter anderem zur Beschreibung von Ratenprozessen bei dissipativen *Quantensystemen* wird in vielen Gebieten der Physik das Caldeira-Leggett-Modell (CLM) [CL83] herangezogen. Eine ausführliche Darstellung findet man in den Büchern [Wei93, DHI⁺98, BP02]. Der zugrunde liegende Hamilton-Operator hat die Struktur

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_{SB} . \quad (2.49)$$

Dabei ist das *System* in einer Dimension beschrieben durch

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{Q}) . \quad (2.50)$$

Das *Wärmebad* besteht aus einer Anzahl N harmonischer Oszillatoren verschiedener Masse m_i und Frequenz ω_i

$$\hat{H}_B = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{m_i}{2} \omega_i^2 \hat{x}_i^2 \quad (2.51)$$

und die *Kopplung* zwischen beiden Subsystemen

$$\hat{H}_{SB} = - \sum_{i=1}^N f(\hat{Q}) \hat{x}_i + \Delta \hat{H}_{\text{ren}} \quad (2.52)$$

ist *linear in den Badkoordinaten* \hat{x}_i . Der Term $\Delta \hat{H}_{\text{ren}}$ in (2.52) kompensiert bei $M = \text{const}$ eine Renormierung des Potentials durch die Kopplung. Aufgrund der Linearität in den Badkoordinaten können diese exakt ausintegriert werden. Unter Verwendung des Pfadintegral-Formalismus (siehe z.B. [FH65, Sch81, Kle90]) ergibt sich eine *effektive Wirkung*, die den

Einfluss der Kopplung an das Wärmebad auf die Dynamik und Thermodynamik des Systems in Form eines Influenz-Funktional [FV63, FH65] beschreibt, das nur noch von der Systemkoordinate \hat{Q} abhängt. Führt man in dieser effektiven Wirkung bezüglich der Badoszillatoren den Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ durch und geht dabei zugleich von den diskreten Frequenzen ω_i zu einem *kontinuierlichen Spektrum* über, so erhält das System *dissipative Züge*. Die Wiederkehrzeit $\tau_{\text{rec}} \sim 1/\Delta\omega$, nach der Energie, die vom System an das Bad abgegeben wird zurückkehrt, divergiert: $\tau_{\text{rec}} \rightarrow \infty$.

Mit dem CLM konnten große Erfolge erzielt werden. So konnte bei $T = 0$ die Zerfallsrate eines metastabilen Zustands in Wechselwirkung mit einem Wärmebad berechnet werden [CL83]. Erste Versuche, die Theorie für starke Dämpfung auf beliebige Temperatur auszuweiten, wurden in [LO83, LO84] unternommen. Für tiefe Temperaturen und beliebige Dämpfung wurden in [GWH84] Korrekturen zum Fall $T = 0$ angegeben. Die allgemeine Formel für die Zerfallsrate lautet im Anwendbarkeitsbereich des Kramers'schen "high viscosity limit"

$$R_{\text{qm}}^{\text{high}} = R_{\text{K}}^{\text{high}} \cdot f_{\text{qm}} . \quad (2.53)$$

Auch die Regularisierung einer unphysikalischen Divergenz des *Quantenkorrekturfaktors* f_{qm} an der "Crossover-Temperatur" T_0 konnte mit dem CLM theoretisch beschrieben werden [LO83, LO84, GW84, GOW87]. Bei T_0 geht der bei hohen Temperaturen durch reine thermische Aktivierung dominierte Zerfall (d.h. $R_{\text{qm}}^{\text{high}} \rightarrow R_{\text{K}}^{\text{high}}$) in den Tieftemperaturbereich über, wo dissipatives Quantentunneln dominant ist. Die auf der Basis des CLM berechneten [GW84, GOW85, GOW87] Quantenkorrekturen zur Tunnelrate in Josephson-Kontakten konnten im Rahmen der Messgenauigkeit im gesamten Temperaturbereich experimentell bestätigt werden [CMC88]. Auch bezüglich der Dämpfungsstärke konnte mit dem CLM der "Turnover" der Zerfallsrate vom Grenzfall schwacher Dämpfung (2.44) zum Fall starker Dämpfung (2.45) einheitlich beschrieben werden [Gra88]. Die bisher genannten Arbeiten basieren auf dem Formalismus der Imaginärzeit-Pfadintegrale. Es ist aber im Rahmen des CLM auch möglich, Realzeit-Pfadintegrale zu verwenden. Brown'sche Bewegung wurde in [GSI88] ausführlich studiert. In [AGI95, AG95, AG97, AG00] wurde das Tunneln durch eine Barriere in reeller Zeit untersucht.

Leider ist das in vielen Gebieten der Physik erfolgreiche CLM in der Kernphysik nicht direkt anwendbar. Im Folgenden werden die wichtigsten Gründe aufgelistet, die eine Anwendung des CLM auf Prozesse wie Kernspaltung und die Produktion superschwerer Elemente eigentlich verbieten:

- In der Kernphysik dürfen die kollektiven und die nukleonischen Freiheitsgrade nicht als unabhängig voneinander behandelt werden. Die ersten werden gerade eingeführt, um beispielsweise die Form des gesamten Atomkerns zu beschreiben. Bereits die einfachst mögliche Forderung nach *Selbstkonsistenz* zwischen den kollektiven Freiheitsgraden und dem nukleonischen Wärmebad beinhaltet eine hochgradig *nichtlineare* Abhängigkeit des mittleren Feldes, in dem sich die Nukleonen bewegen, von den kollektiven Koordinaten. Mit (2.49) können solche Effekte nicht berücksichtigt werden.

- Für kollektive Kernbewegung kleiner Amplitude sind die erlaubten Frequenzen durch Säkulargleichungen (2.21) und Response-Funktionen (2.22) vom Typ der RPA bestimmt. Die kollektive Response-Funktion des CLM hat jedoch eine völlig andere Struktur [Hof97]:

$$\chi_{\text{coll}}^{\text{CLM}}(\omega) = \frac{1}{M\omega^2 - V''(Q) + \chi(\omega)} \quad (2.54)$$

Man sieht also, dass Selbstkonsistenz im CLM anders als mit (2.22) nicht einmal für kleine Amplituden berücksichtigt werden kann.

- Im CLM erhält man für die Systemvariable in Realzeitentwicklung die effektive Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$M \frac{d^2 \hat{Q}}{dt^2} + \int_0^t ds \gamma(t-s) \frac{d\hat{Q}}{ds} + \frac{dV(Q)}{dQ} = \xi(t) \quad (2.55)$$

mit einem ‘‘Dämpfungs-Integralkern’’ $\gamma(t)$ und einer fluktuierenden Kraft $\xi(t)$. Der dissipative und der konservative Term sind hier *unabhängig* voneinander. In der Kernphysik führt die Selbstkonsistenz zu einer Verknüpfung der beiden Kraftbeiträge. Im Kapitel 7 wird dieser Umstand ausführlich diskutiert.

- Im Rahmen des CLM wird keine Aussage darüber gemacht, *wie* die Transportkoeffizienten für die kollektive Bewegung, also z.B. die Trägheit M und das Potential V in (2.50) bzw. dessen Steifheit $C = V''$ gewählt werden müssen. Zur ‘‘mikroskopischen’’ Berechnung des Reibungskoeffizienten γ besteht im CLM völlige Freiheit bei der Wahl der spektralen Dichte des Wärmebades. In der Kernphysik ist hinlänglich bekannt (siehe z.B. [BDJ⁺72]), dass alle diese Transportkoeffizienten sensitiv von der kollektiven Koordinate Q und der Temperatur T abhängen. Diese wichtige Eigenschaft kann mit dem CLM nicht erfasst werden.

Dieser Kritikpunkt bedeutet nicht, dass das CLM nicht in Ausnahmefällen in speziellen Situationen dennoch zur Beschreibung kernphysikalischer Prozesse herangezogen wird. Beispielsweise können in der Anfangsphase von Schwerionen-Reaktionen bei großem Abstand von Projektil und Target die reduzierte Masse und das Coulomb-Potential als gute Näherungen für die Trägheit und das Potential der kollektiven Koordinate benutzt werden [HS75, BT98].

- Während in der Physik der Kondensierten Materie und der Chemie das System mit einem makroskopischen Wärmebad in Kontakt steht, ist eine solche Annahme in der Kernphysik fragwürdig. Atomkerne sind unter Vernachlässigung von Prozessen wie der Abdampfung leichter Teilchen (γ , Neutronen, ...) thermisch isolierte Systeme. Als Wärmebad für die kollektiven Variablen bieten sich daher nur die nukleonischen Freiheitsgrade der $A \lesssim 290$ Kernbausteine an.

2.7 Nukleare Thermodynamik

Aufgrund der Tatsache, dass Atomkerne *kleine, thermisch isolierte Systeme* sind, muss geklärt werden, inwieweit zur Beschreibung ihrer thermischen Anregung Größen wie die Entropie \mathcal{S} oder die Temperatur T brauchbar sind. Als Ausgangspunkt der dazu notwendigen Überlegungen eignet sich die Energieverteilung

$$w(E) = \Omega(E) \varrho(E) , \quad (2.56)$$

aus der die mittlere Energie gemäß $\langle E \rangle = \int dE w(E) E$ berechnet werden kann. Die Niveaudichte Ω nimmt im Allgemeinen stark mit E zu. Für das statistische Gewicht ϱ kann man unterschiedliche Wahlen treffen. Im *mikrokanonischen Ensemble* ist es im Intervall $E' - \Delta \leq E \leq E'$ mit $\Delta \ll E, E'$ durch $\varrho_{\text{micro}}(E) = 1/G(E) = \text{const}$ gegeben. Außerhalb dieses Energieintervalls gilt: $\varrho_{\text{micro}}(E) = 0$. Die Anzahl der Zustände $G(E)$ soll dabei sehr groß sein. Im *kanonischen Ensemble* lautet das statistische Gewicht $\varrho_{\text{can}}(E) = \exp(-E/T_{\text{can}})/\mathcal{Z}$. Die hier eingeführte Temperatur T_{can} ist ein fester Parameter ohne Fluktuationen und die Normierungskonstante \mathcal{Z} ist die Zustandssumme. Im thermodynamischen Limes $A \rightarrow \infty$ sind das mikrokanonische und das kanonische Ensemble äquivalent.

Für konkrete Rechnungen ist meist das kanonische Ensemble praktischer, obwohl das mikrokanonische Ensemble besser auf die in Atomkernen gegebenen Verhältnisse passt, bei denen E eine konstante Größe ist. Durch

$$\beta = \frac{1}{T} = \left. \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial E} \right|_{(E)} \quad (2.57)$$

kann man auch im mikrokanonischen Ensemble die Temperatur definieren und mit einem effektiven kanonischen Ensemble arbeiten, für dessen Energie-Fluktuationen gilt: $\Delta E \gg \Delta$. In [Fes88] wird die Relation

$$(\Delta E)^2 (\Delta \beta)^2 = 1 \quad (2.58)$$

zwischen den *Fluktuationen* der Energie und der inversen Temperatur angegeben (zur Ableitung siehe z.B. [Hof05]). Mit dem Zusammenhang $(\Delta E)^2 = \mathcal{C}/\beta^2$, der im kanonischen Ensemble gilt, kann man somit die Temperatur-Fluktuationen [LL79, Lin86, Fes88]

$$\left| \frac{\Delta \beta}{\beta} \right|^2 = \left(\frac{\Delta T}{T} \right)^2 = \frac{1}{\mathcal{C}} \quad (2.59)$$

aus der spezifischen Wärme \mathcal{C} berechnen. Über die Relation (2.58) hinausgehend wird sogar die Existenz einer “thermodynamischen Unschärferelation” diskutiert, nach der gilt: $(\Delta E)^2 (\Delta \beta)^2 \geq 1$ [Man89, Lav91].

Wegen der kleinen Nukleonenzahl $A \lesssim 290$ und $\mathcal{C} \sim A$ können die Fluktuationen (2.59) bei Atomkernen nicht ohne Weiteres vernachlässigt werden. Ihre typische Größenordnung beträgt für mittelschwere Kerne 20%. Der Temperaturbegriff kann daher für Atomkerne

nur dann sinnvoll zur Beschreibung der thermischen Anregung verwendet werden, wenn die interessierende Observable auf der durch $\Delta T/T$ gegebenen Skala nur schwach variiert. Im Abschnitt 6.2.3 wird auf derartige Probleme anhand eines exakt lösbaren Vielteilchen-Systems näher eingegangen.

Bei *dynamischen* Prozessen in Atomkernen ändern sich mit der kollektiven Koordinate auch die thermodynamischen Größen \mathcal{S} bzw. T . Das Wechselspiel zwischen kollektiver und innerer Anregung kann in einer zeitlich veränderlichen Temperatur $T = T(t)$ ihren Ausdruck finden. Im Rahmen einer konsistenten Behandlung von Dynamik und Thermodynamik müssen daher die Änderungen ΔQ und $\Delta \mathcal{S}$ bzw. ΔT in gleicher Ordnung berücksichtigt werden. Dies ist mithilfe der Theorie des linearen Response möglich [KHI92]. Durch Anwenden der im Abschnitt 2.3.2 vorgestellten lokal harmonischen Näherung kann auch Dynamik großer Amplitude unter Berücksichtigung der zeitabhängigen Änderung der thermischen Anregung behandelt werden (vgl. Abb. 2.1). In dieser Arbeit werden die hier angerissenen Aspekte jedoch vernachlässigt.

Kapitel 3

Temperatur- und koordinatenabhängige Koeffizienten

3.1 Das mikroskopische und das makroskopische Modell

Im Abschnitt 2.2 wurde angedeutet, wie mithilfe der Theorie des linearen Response aus einer mikroskopischen Quantentheorie Transportkoeffizienten für die Kollektivbewegung abgeleitet werden können. Sie variieren mit der Temperatur und der kollektiven Koordinate und werden im Folgenden als *mikroskopisches Modell* für die Transportkoeffizienten bezeichnet.

In Anwendungen zur Untersuchung von kollektiver Kernbewegung großer Amplitude mittels Fokker-Planck- oder Langevin-Gleichungen wurden bisher die Transportkoeffizienten jedoch vorwiegend aus verschiedenen makroskopischen Modellen zusammengestellt (siehe z.B. [AARS96, FG98]). Aus dem Tröpfchenmodell (“liquid drop model”, LDM, siehe z.B. [BM75a, RS80b]) werden dabei die Temperatur- und Koordinatenabhängigkeit von Trägheit $M_{\text{LDM}}(T, Q)$ und Steifheit $C_{\text{LDM}}(T, Q)$ entnommen. Für die Reibung wird für kompakte Systeme die makroskopische “wall formula” [RS80a] oder die “wall and window formula” [BBN⁺78] herangezogen, die den irreversiblen Energieübertrag eines sich bewegenden “Containers” auf ein *klassisches* Gas von Nukleonen beschreibt, die diesen füllen. Als *makroskopisches Modell* wird in der vorliegenden Arbeit ein Satz von Transportkoeffizienten benutzt, in dem wie in [HIRY01, RH03] für die Trägheit $M(T, Q) = M_{\text{LDM}}(T, Q)$ und die Steifheit $C(T, Q) = C_{\text{LDM}}(T, Q)$ verwendet werden. Für die Reibung wird die reduzierte “wall formula” $\gamma(T, Q) = \gamma_{\text{wall}}(T, Q)/2$ benutzt [HIRY01].

Das makroskopische Modell hat im Gegensatz zum mikroskopischen folgende Schwachpunkte:

- Die Transportkoeffizienten M , γ und C werden nicht einheitlich behandelt. Vielmehr müssen sie aus *verschiedenen* Modellen zusammengesucht werden.
- Der Kern wird in diesen Modellen als *klassisches* Gas bzw. klassische Flüssigkeit von Nukleonen behandelt.
- Insbesondere das annähernd konstante Temperaturverhalten der Reibung der “wall formula” ist kritikabel. Es gibt experimentelle Hinweise auf eine Zunahme der Reibung bei $T \approx 0.5 \dots 1$ MeV. Diese kann mit dem makroskopischen Modell nicht erklärt werden (siehe Kapitel 9).

3.2 Die Transportkoeffizienten für die mittlere Bewegung

In dieser Arbeit werden statt der Transportkoeffizienten M , γ und C selbst bevorzugt die Verhältnisse (2.37) bis (2.40) benutzt, die nicht von der Wahl der kollektiven Koordinaten abhängen. Basierend auf mikroskopischen Rechnungen im Rahmen der Theorie des linearen Response wurden für den Kern ^{224}Th in [HIRY01] folgende analytischen Näherungen für die Temperaturabhängigkeit der Zeitskalen (2.37) und (2.38) vorgeschlagen:

$$\tau_{\text{kin}} = \frac{1 + T^2/40}{0.6T^2} \frac{\hbar}{\text{MeV}} \quad (3.1)$$

$$\tau_{\text{coll}} = \frac{0.6T^2}{1 + \pi^2 T^2 / c_{\text{macro}}^2} \frac{\hbar}{\text{MeV}} \quad (3.2)$$

Die Temperatur ist hier in MeV einzusetzen. In (3.2) wurde der Cut-off-Parameter $c_{\text{macro}}^2 \approx 8.2 \gamma_{\text{wall}} / |C_{\text{LDM}}(T)| \text{ MeV}^3 / \hbar$ eingeführt, um als Hochtemperatur-Limes der Reibung das Resultat der reduzierten “wall formula” $\gamma_{\text{wall}}/2$ zu erhalten. Die Oszillatorfrequenz ϖ und die effektive Dämpfung η können mit (2.39) und (2.40) aus (3.1) und (3.2) berechnet werden.

Es ist möglich, in den Näherungsformeln (3.1) und (3.2) auch die Reduktion der Reibung durch *Paarungskorrelationen* bei tiefen Temperaturen $T \lesssim 0.5$ MeV zu berücksichtigen [IH99, HIRY01]. Dazu müssen beide Zeitskalen mit dem Faktor

$$f_{\text{pair}} = \frac{1}{1 + \exp[-a(T - T_p)]} \quad (3.3)$$

multipliziert werden. Die beste Übereinstimmung mit den tatsächlich mikroskopischen Resultaten wird für die Parameterwahl $a = 12 \text{ MeV}^{-1}$ und $T_p = 0.48 \text{ MeV}$ für das Grundzustands-Minimum und $a = 10 \text{ MeV}^{-1}$ und $T_p = 0.55 \text{ MeV}$ für die Barriere von ^{224}Th erreicht.

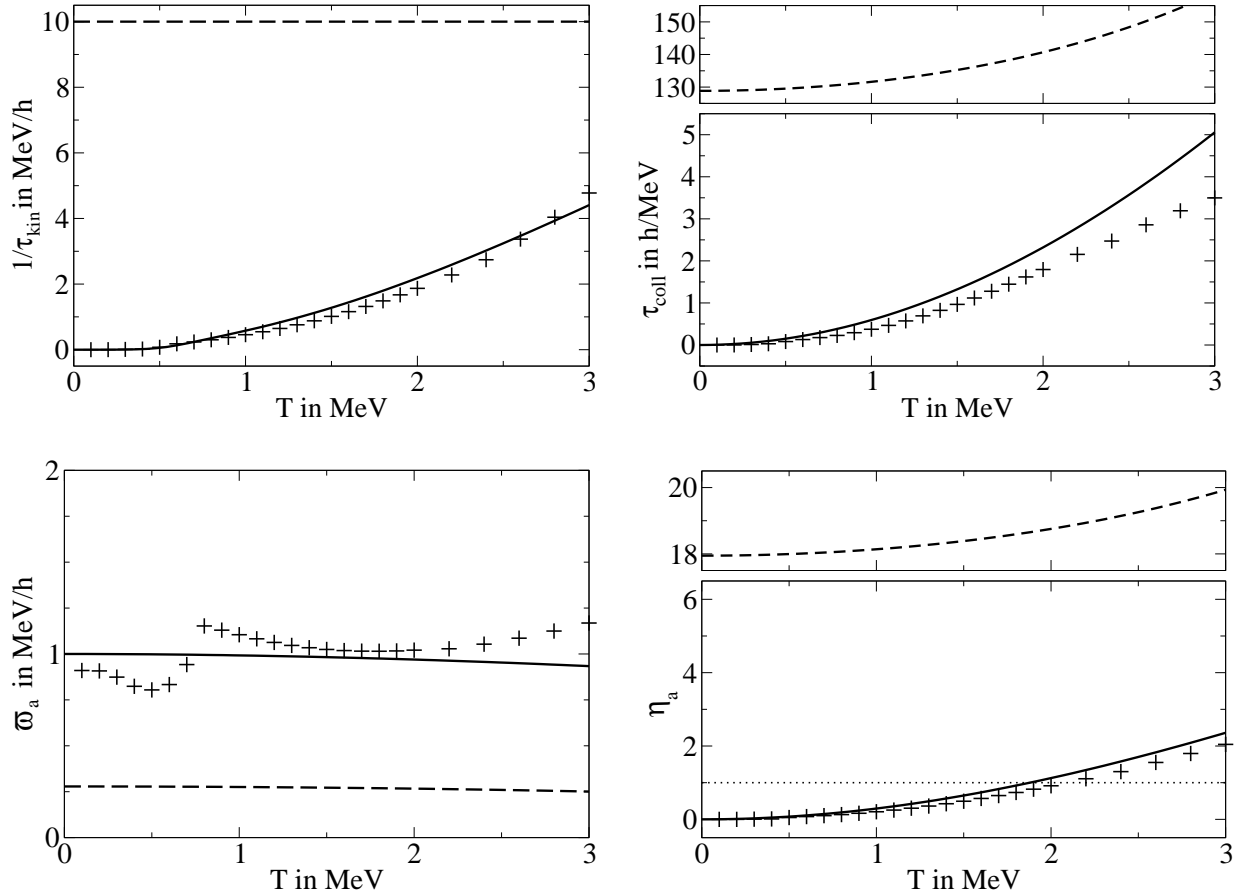


Abbildung 3.1: Die Temperaturabhängigkeit der Verhältnisse (2.37) bis (2.40) für das Minimum von ^{224}Th . Die durchgezogenen Linien markieren die analytischen Näherungen (3.1) und (3.2) an das Ergebnis einer mikroskopischen Rechnung (Symbole). Die unterbrochene Linie repräsentiert das makroskopische Modell (siehe Text). Im Bild rechts unten ist die Trennung des unterdämpften ($\eta < 1$) vom überdämpften Bereich ($\eta > 1$) durch eine gepunktete Linie markiert.

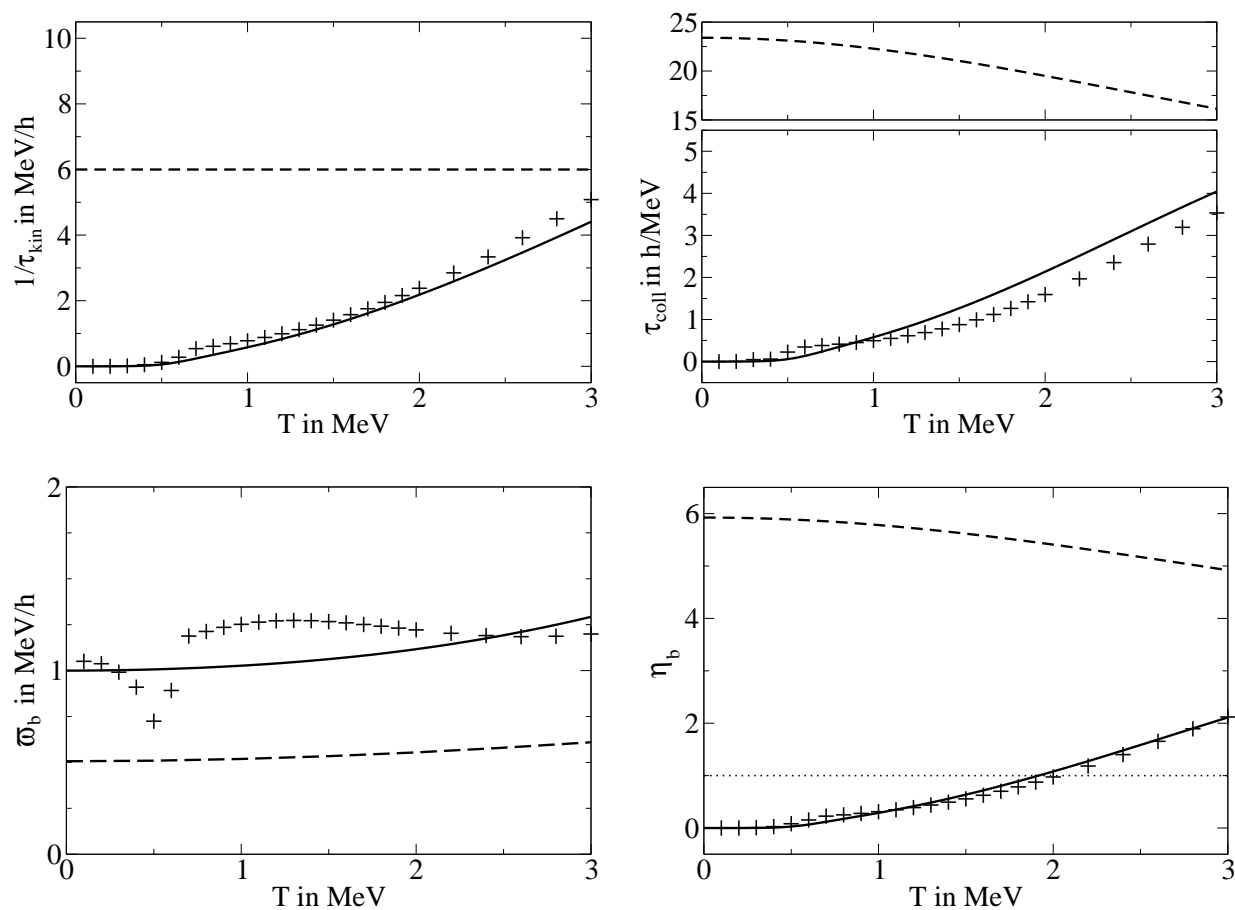


Abbildung 3.2: Die Temperaturabhängigkeit der Verhältnisse (2.37) bis (2.40) für die Barriere von ^{224}Th . Vgl. Abb. 3.1.

In Abb. 3.1 und 3.2 sind zum Vergleich das Temperaturverhalten der Verhältnisse (2.37) bis (2.40) im makroskopischen und mikroskopischen Modell für das Minimum (Index a) und die Barriere (Index b) von ^{224}Th dargestellt. Für die Frequenz stellt sich heraus, dass $\varpi_a \approx \varpi_b \approx 1 \text{ MeV}/\hbar$ eine relativ gute Abschätzung für die mikroskopischen Werte liefert (vgl. Abb. 3.1 und 3.2 jeweils links unten). Für die folgenden Überlegungen äußerst wichtig ist die Tatsache, dass die effektive Dämpfung der nukleonischen Bewegung aufgrund von Quanteneffekten im mikroskopischen Modell gegenüber dem makroskopischen *wesentlich reduziert* ist. Während im mikroskopischen Modell bei $T \approx 2 \text{ MeV}$ ein Übergang von unterdämpfter ($\eta < 1$) zu überdämpfter Bewegung ($\eta > 1$) erfolgt, ist sie im makroskopischen immer stark überdämpft (vgl. Abb. 3.1 und 3.2 jeweils rechts unten). Für Werte $\eta \gtrsim 1.5$, d.h. für $T \gtrsim 2.5 \text{ MeV}$ ist der Smoluchowski-Limes bereits in guter Näherung erreicht, bei dem weder Trägheit noch kinetische Energie eine Rolle für die Dynamik spielen (vgl. Abb. 2.2).

3.3 Diffusionskoeffizienten und stationäre Fluktuationen

Die Diffusionskoeffizienten treten als Inhomogenitäten in den Bewegungsgleichungen für die Fluktuationen

$$\sigma_{pp}(t) = \langle (p - p_c(t))^2 \rangle_t \quad (3.4)$$

und analoge Definitionen für $\sigma_{qp}(t)$ und $\sigma_{qq}(t)$ auf, die aus den im Abschnitt 2.3 behandelten Transportgleichungen abgeleitet werden können und in (A.6) bis (A.8) zusammengestellt sind. Hier ist der mittlere Impuls folgendermaßen definiert:

$$p_c(t) = \langle p \rangle_t = \int dq \int \frac{dp}{2\pi\hbar} p f(q, p, t) \quad (3.5)$$

Eine analoge Definition gilt für die mittlere Trajektorie $q_c(t)$. Die Diffusionskoeffizienten hängen mit den stationären Fluktuationen in den durch (2.35) definierten dynamischen Variablen (q, p) gemäß

$$d_{pp} = \frac{1}{\tau_{\text{kin}}} \sigma_{pp}^{st} \quad (3.6)$$

$$d_{qp} = \hbar\varpi \left(\text{sgn}C \sigma_{qq}^{st} - \frac{\sigma_{pp}^{st}}{\hbar^2} \right) \quad (3.7)$$

zusammen. Bei Verwendung des Fluktuations-Dissipations-Theorems (FDT)

$$\sigma_{\mu\nu}^{st} = \hbar \int \frac{d\omega}{2\pi} \coth \frac{\hbar\omega}{2T} \chi''_{\mu\nu}(\omega) \quad (3.8)$$

zur Berechnung der stationären Fluktuationen gilt aus Symmetriegründen:

$$d_{qq} = \sigma_{qp}^{st} \equiv 0 \quad (3.9)$$

Die $\sigma_{\mu\nu}^{st}$ mit $\mu, \nu = p, q$ sind dabei im Fall des stabilen Oszillators, wie er z.B. zur Approximation des Potentials in der Nähe eines Minimums verwendet wird, identisch mit den Gleichgewichts-Fluktuationen $\sigma_{\mu\nu}^{eq}$. Bei der Anwendung der LHA kommt die Situation vor, dass die harmonische Näherung an das Potential $V(Q)$ auf einen instabilen Oszillator führt (vgl. Abb. 2.1). In solchen Fällen existieren keine Gleichgewichts-Fluktuationen. Allerdings kann die Formel (3.8) mit der analytischen Fortsetzung $C = |C| \rightarrow C = -|C|$ auch auf diesen Fall angewendet werden [HI91, Hof97, HK98]. Zur Berechnung der Impuls-Fluktuationen σ_{pp}^{st} ist in (3.8) eine Regularisierung des Frequenz-Integrals nötig. Diese kann entweder durch Benutzung eines frequenzabhängigen Reibungskoeffizienten

$$\gamma(\omega) = \frac{\gamma}{1 - i\omega/\varpi_D} \quad (3.10)$$

mit einer Drude-Cut-off-Frequenz ϖ_D oder durch Verwendung einer festen Cut-off-Frequenz erreicht werden. Qualitativ liefern beide Methoden die gleichen Resultate [HK98]. Formeln zur Berechnung der quantenmechanischen Resultate für die stationären Fluktuationen mit (3.10) sind im Anhang A.2.2 zusammengestellt.

Es gibt zwei wichtige Spezialfälle der stationären Fluktuationen und der Diffusionskoeffizienten. Im *Hochtemperatur-Limes* $T \gg \hbar\omega$ reduzieren sich die stationären Fluktuationen (A.14) bis (A.16) auf das Äquipartitionstheorem der Statistischen Mechanik:

$$\left. \frac{\sigma_{pp}^{st}}{\hbar^2} \right|_{h.T.} = \text{sgn}C \left. \sigma_{qq}^{st} \right|_{h.T.} = \frac{T}{\hbar\varpi} \quad \text{und} \quad \left. \sigma_{qp}^{st} \right|_{h.T.} \equiv 0 \quad (3.11)$$

Daraus ergeben sich mit (3.6), (3.7) und (3.9) für die Diffusionskoeffizienten die klassischen *Einstein-Relationen*

$$d_{pp}^{h.T.} = \frac{1}{\tau_{\text{kin}}} \frac{\hbar T}{\varpi} = 2\hbar\eta T \quad \text{und} \quad d_{qq}^{h.T.} = d_{qp}^{h.T.} = 0. \quad (3.12)$$

Geläufiger als $d_{pp}^{h.T.}$ ist die klassische Einstein-Relation in der Form (2.29), die man durch Anwendung der Transformation (2.35) auf die Fluktuationen erhält. Im *Grenzfall sehr kleiner Dämpfung* $\eta \ll 1$ ("zero damping limit") kann man ebenfalls die Gleichungen (3.11) und (3.12) benutzen, wenn man anstelle von T die *effektive Temperatur*

$$T_a^* = \frac{\hbar\varpi_a}{2} \coth\left(\frac{\hbar\varpi_a}{2T}\right) \quad \text{stabiler Fall} \quad (3.13)$$

$$\text{und} \quad T_b^* = \frac{\hbar\varpi_b}{2} \cot\left(\frac{\hbar\varpi_b}{2T}\right) \quad \text{instabiler Fall} \quad (3.14)$$

verwendet [SH83, HI91, HK98, Hof97]. Aus der Forderung $\text{sgn}C \sigma_{qq}^{st} \geq 0$ ergibt sich eine *untere Grenztemperatur* T_c der Anwendbarkeit der Theorie im instabilen Fall. Für $\eta \rightarrow 0$ folgt aus (3.14) die Beschränkung $T \geq T_c = \hbar\varpi_b/\pi$. Bei endlichem η nimmt T_c ab. In Abb. 6 von [HK98] ist dies für verschiedene temperaturunabhängige η explizit gezeigt. In der

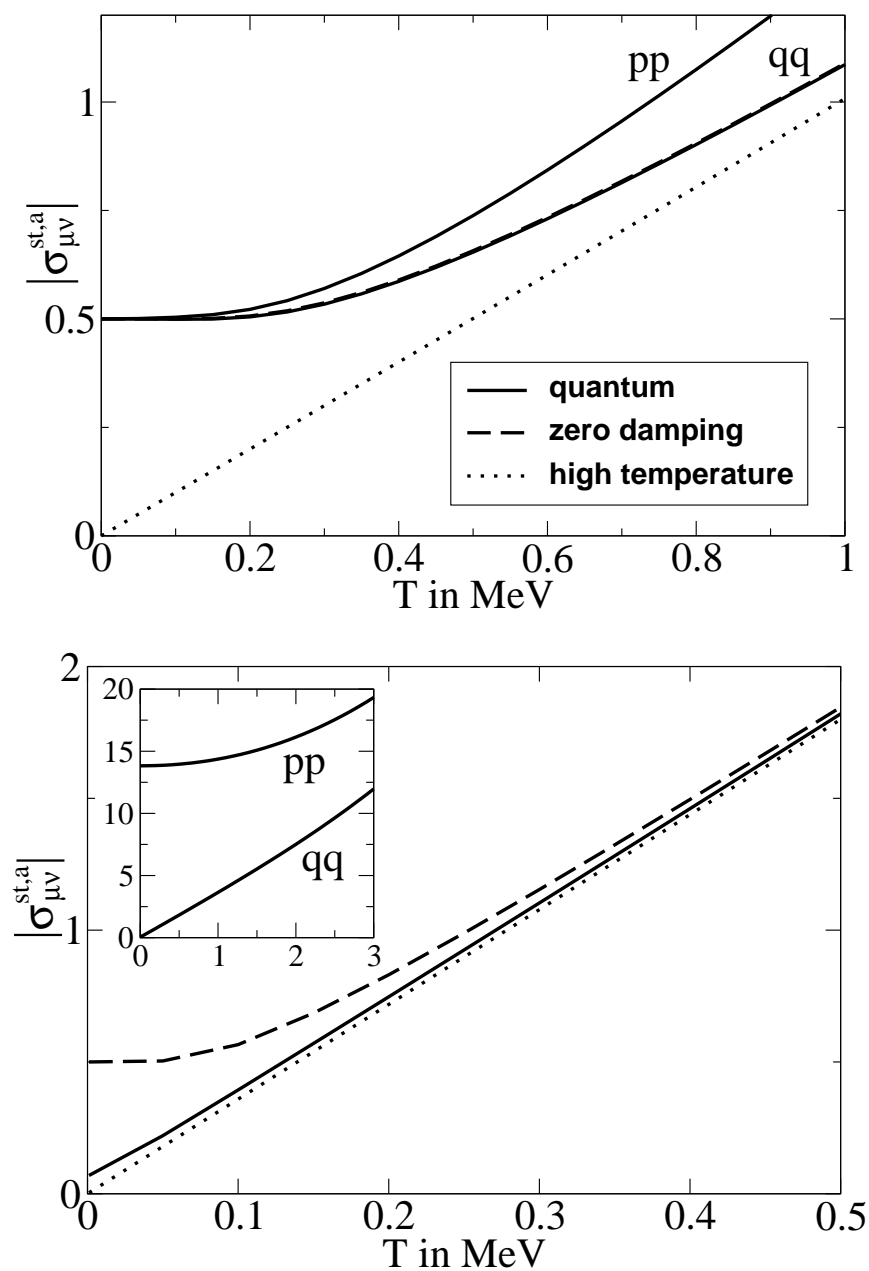


Abbildung 3.3: Die Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichts-Fluktuationen für das Minimum von ^{224}Th im mikroskopischen (oben) und makroskopischen Modell (unten). Unten sind die quantenmechanischen Resultate zusätzlich auf einer Skala gezeigt, auf der auch die sehr großen Impuls-Fluktuationen sichtbar sind.

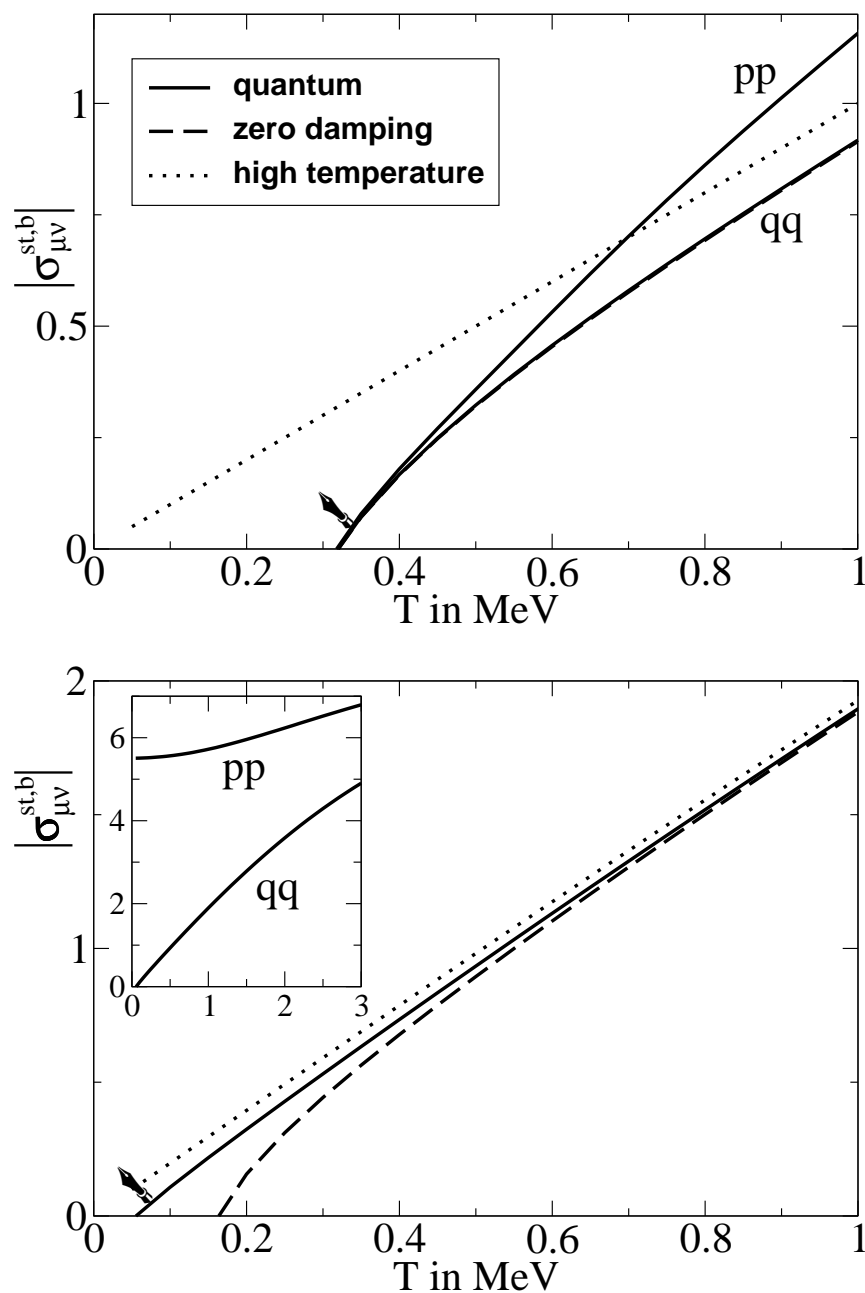


Abbildung 3.4: Die Temperaturabhängigkeit der stationären Fluktuationen für die Barriere von ^{224}Th im mikroskopischen (oben) und makroskopischen Modell (unten). Die Pfeile zeigen auf die Grenztemperatur T_c , wo die Theorie zusammenbricht. Unten sind die quantenmechanischen Resultate zusätzlich auf einer Skala gezeigt, auf der auch die sehr großen Impuls-Fluktuationen sichtbar sind.

vorliegenden Arbeit ist dieser Effekt z.B. in der unten zu besprechenden Abb. 3.4 sichtbar: Das tatsächliche T_c (Pfeil) der quantenmechanischen Rechnung liegt im makroskopischen Modell aufgrund der starken Dämpfung deutlich unter der Vorhersage des “zero damping limit”.

In [HK98] wurden die stationären Fluktuationen und die Diffusionskoeffizienten für temperaturunabhängige Transportkoeffizienten aus dem FDT berechnet und mit den Grenzfällen hoher Temperatur und schwacher Dämpfung verglichen. Im vorhergehenden Abschnitt wurde jedoch gezeigt, dass im mikroskopischen Modell die Transportkoeffizienten im Fall eines schweren Kerns wie ^{224}Th sensibel von T abhängen. Aus diesem Grund war es sinnvoll, die Rechnungen aus [HK98] für die gefundene Temperaturabhängigkeit (3.1) und (3.2) und die daraus mit (2.39) und (2.40) abgeleiteten Werte von $\varpi(T)$ und $\eta(T)$ zu wiederholen [RH03]. Die dazu benutzten Ausdrücke sind im Anhang A.2.2 zusammengestellt. Zur Regularisierung des Frequenzintegrals aus (3.8) wurde die in [HK98] vorgeschlagene Methode übernommen und eine Drude-Regularisierung (3.10) mit $\varpi_D \equiv 10 \text{ MeV}/\hbar \gg \varpi(T)$ als Cut-off-Parameter benutzt.

Die Ergebnisse für $\text{sgn}C \sigma_{qq}^{st}(T)$ und $\sigma_{pp}^{st}(T)$ sind in Abb. 3.3 (Minimum) und Abb. 3.4 (Barriere) für das mikroskopische (oben) und das makroskopische Modell (unten) gezeigt. Es werden für den Kern ^{224}Th jeweils die quantenmechanischen Resultate mit den Grenzfällen hoher Temperatur und schwacher Dämpfung verglichen. Im makroskopischen Modell ist aufgrund der hohen Reibung der Grenzfall schwacher Dämpfung weder für die Koordinaten- noch für die Impuls-Fluktuationen wirklich anwendbar. Im mikroskopischen Modell hingegen beschreibt er die stationären Koordinaten-Fluktuationen auch bei tiefen Temperaturen sehr gut, während der Hochtemperatur-Limes im Fall des Minimums zu kleine und im Fall der Barriere zu große Werte liefert. Für die Impuls-Fluktuationen ist der Grenzfall schwacher Dämpfung nur bei sehr tiefen Temperaturen in vernünftiger Übereinstimmung mit der quantenmechanischen Rechnung. Nur dort wird η tatsächlich sehr klein (vgl. Abb. 3.1 und 3.2 rechts unten). Bei mittleren Temperaturen sind die quantenmechanischen Impuls-Fluktuationen größer als die mit dem Grenzfall schwacher Dämpfung erhaltenen. Erst bei extrem hohen Temperaturen liefern die beiden Grenzfälle wieder eine gute Abschätzung der quantenmechanischen Impuls-Fluktuationen. Die Größe der Abweichung bei mittleren Temperaturen hängt von der Wahl der Cut-off-Frequenz ϖ_D der Drude-Regularisierung ab. Derzeit gibt es leider keine allgemeine Vorschrift für die Wahl dieses Cut-offs. Es wurde aber überprüft, dass im Bereich $\varpi_D = 5 \dots 20 \text{ MeV}/\hbar$ die Resultate nicht sehr stark von der Wahl von ϖ_D abhängen [RH03]. Ein ähnliches Resultat war auch schon in [HK98] für temperaturunabhängige Transportkoeffizienten gefunden worden.

In Abb. 3.5 ist die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten d_{pp} für das Minimum (oben) und die Barriere (unten) gezeigt. Da sowohl $1/\tau_{\text{kin}}$ (vgl. Abb. 3.1 und 3.2 links oben) als auch σ_{pp}^{st} (vgl. Abb. 3.3 und 3.4) im mikroskopischen und makroskopischen Modell stark voneinander abweichen, verwundert es nicht, das auch ihr Produkt (3.6) ein völlig unterschiedliches Verhalten zeigt. Im Allgemeinen ist der Diffusionskoeffizient d_{pp} im

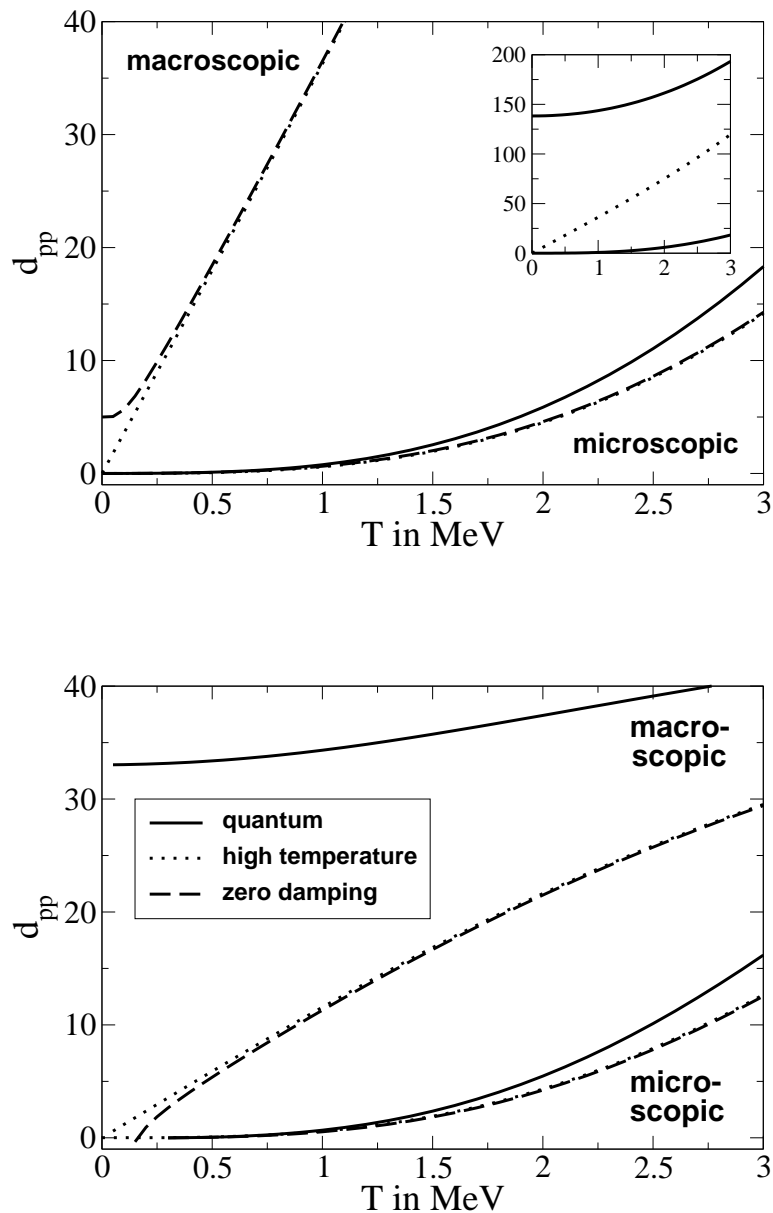


Abbildung 3.5: Die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten d_{pp} für das Minimum (oben) und die Barriere (unten) von ^{224}Th in verschiedenen Näherungen. Oben sind die Resultate zusätzlich auf einer Skala gezeigt, auf der ebenfalls die sehr großen Werte für das makroskopische Modell sichtbar sind.

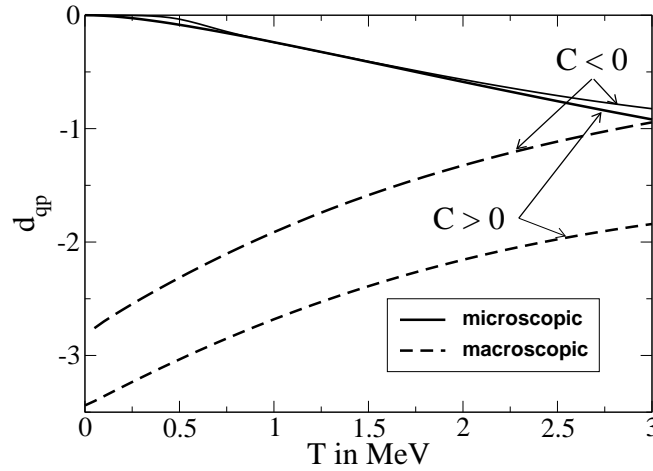


Abbildung 3.6: Die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten d_{qp} für das Minimum und die Barriere von ^{224}Th bei quantenmechanischer Rechnung.

mikroskopischen Modell viel kleiner als im makroskopischen. Im mikroskopischen Modell geben die Näherungen hoher Temperatur und schwacher Dämpfung die quantenmechanischen Diffusionskoeffizienten auch wesentlich besser wieder. Die Ursache liegt darin, dass aufgrund der niedrigen Reibung die Impuls-Fluktuationen von den beiden Grenzfällen nicht so dramatisch unterschätzt werden wie im makroskopischen Modell (vgl. Abb. 3.3 und 3.4).

Abb. 3.6 zeigt den Diffusionskoeffizienten d_{qp} als Funktion der Temperatur. Dieser ist durchwegs negativ und schwächer T -abhängig als d_{pp} . Im mikroskopischen Modell verhält sich der Diffusionskoeffizient d_{qp} , der kein klassisches Analogon hat, am Minimum und an der Barriere fast identisch. Bei tiefen Temperaturen $T \lesssim 1$ MeV ist d_{qp} in diesem Modell von der gleichen Größenordnung wie d_{pp} . Daher spielt er in diesem Temperaturbereich für die Zeitentwicklung der Fluktuationen (A.6) bis (A.8) eine wichtige Rolle. Bei höheren Temperaturen gilt generell $|d_{qp}| \ll d_{pp}$.

Kurzzusammenfassung

In diesem Kapitel wurde am Beispiel des Minimums und der Barriere von ^{224}Th das Temperaturverhalten der Verhältnisse (2.37) bis (2.40) der Transportkoeffizienten für die Kollektivbewegung untersucht. Dabei wurden die Resultate der im Abschnitt 2.2 vorgestellten mikroskopischen Theorie des linearen Response mit einem makroskopischen Modell verglichen. Eine graphische Darstellung findet man in Abb. 3.1 und 3.2. Das wichtigste Resultat

besteht in der Tatsache, dass die effektive Dämpfung im mikroskopischen Modell aufgrund von Quanteneffekten der nukleonischen Bewegung *wesentlich kleiner* ist als im makroskopischen und bei $T \approx 2$ MeV ein Übergang von unterdämpfter zu überdämpfter Dynamik erfolgt.

Bei voll quantenmechanischer Rechnung tritt im Gegensatz zum klassischen Grenzfall in der Kramers-Gleichung (2.36) zusätzlich zu d_{pp} ein Diffusionskoeffizient d_{qp} auf. Während bei tiefen Temperaturen im mikroskopischen Modell d_{pp} und d_{qp} von vergleichbarer Größe sind, dominiert bei hohen Temperaturen und im makroskopischen Modell d_{pp} stark.

Kapitel 4

Anwendung der Kramers-Gleichung auf die Compoundkern-Bildung

Der Prozess der Produktion superschwerer Elemente wird häufig in drei Teilschritte unterteilt: “sticking”, “formation” und “survival” (vgl. (2.41)). In diesem Kapitel wird untersucht, welchen Einfluss die Verwendung der mikroskopischen Transportkoeffizienten aus Kapitel 3 und die Berücksichtigung von Quantenfluktuationen in der Kollektivbewegung auf die Compoundkern-Bildung (“formation”) hat. Wie in [RH03, RH04a] wird dazu im Folgenden angenommen, dass der Prozess mit Transportgleichungen beschrieben werden kann. Die zu überwindende innere Barriere wird dabei, wie in Abb. 4.1 ange-

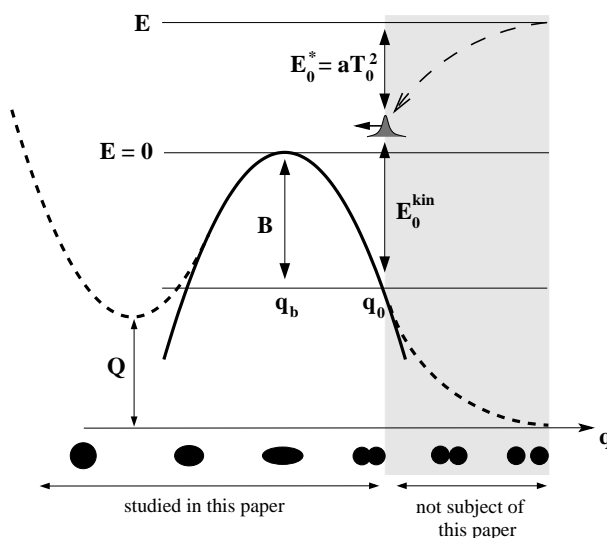


Abbildung 4.1: Das Szenario für die Beschreibung der Bildungswahrscheinlichkeit von Compoundkernen.

deutet, als instabiler harmonischer Oszillator in einer Dimension mit $C < 0$ angenähert [ABGW00, Abe02, RH03, BAB03]. Es wird die Kramers-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(q, p, t) = & \left[-\frac{\varpi p}{\hbar} \frac{\partial}{\partial q} + \operatorname{sgn} C \hbar \varpi q \frac{\partial}{\partial p} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial p} \frac{p}{\tau_{\text{kin}}} + d_{qp} \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} + d_{pp} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] f(q, p, t) \end{aligned} \quad (2.36)$$

bei festgehaltener Temperatur T benutzt und angenommen, dass die Phasenraumdichte für alle Zeiten durch die Gauß-Lösungen (A.19) gegeben sind.

4.1 Die Wahrscheinlichkeit eine parabolische Barriere zu überwinden

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein durch das einfallende Gauß-Paket (A.19) beschriebenes System zur Zeit t eine bei $q = 0$ lokalisierte parabolische Barriere mit Frequenz ϖ_b überwunden hat, kann mit der Formel

$$\Pi(t) = \int_0^\infty dq \int_{-\infty}^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} f_G(q, p, t) \quad (4.1)$$

berechnet werden. Es ergibt sich [HS75]

$$\Pi(t) = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{q_c(t)}{\sqrt{2\sigma_{qq}(t)}} \right) \right] = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(-\frac{q_c(t)}{\sqrt{2\sigma_{qq}(t)}} \right). \quad (4.2)$$

Für große Zeiten $t - t_0 \gg \tau_b^- = 1/|\omega_b^-|$ konvergiert dies gegen den stationären Endwert

$$\Pi_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} \Pi(t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(-\frac{q_\infty}{\sqrt{2\sigma_{qq}^\infty}} \right). \quad (4.3)$$

Hier gilt mit den Frequenzen

$$i\omega_b^\pm = -\varpi_b \left(\pm \sqrt{1 + \eta_b^2} - \eta_b \right) \quad (4.4)$$

für den instabilen Oszillator, den Anfangswerten $q(t_0) = q_0$ und $p(t_0) = p_0$ und den Abweichungen $\Delta\sigma_{\mu\nu}(t_0)$ der Anfangsfluktuationen von den stationären Fluktuationen (vgl. (A.9)) für das Argument der Fehlerfunktion

$$q_\infty = \frac{\varpi_b}{i\omega_b^-} \frac{p_0}{\hbar} + q_0 \quad (4.5)$$

und

$$\sigma_{qq}^{\infty} = \left(\frac{\varpi_b}{i\omega_b^-} \right)^2 \frac{\Delta\sigma_{pp}(t_0)}{\hbar^2} + 2 \frac{\varpi_b}{i\omega_b^-} \frac{\Delta\sigma_{qp}(t_0)}{\hbar} + \Delta\sigma_{qq}(t_0) \quad (4.6)$$

(vgl. (A.4) und (A.13)).

Die Wahrscheinlichkeit Π_{∞} , dass das System die Barriere für große Zeiten überwunden hat, ist wesentlich durch das Verhalten der mittleren Trajektorie $q_c(t)$ bestimmt. An (4.3) kann man ablesen, dass Π_{∞} gerade $1/2$ wird, wenn die mittlere Trajektorie auf dem Barrierscheitel zur Ruhe kommt, d.h. $q_{\infty} = 0$. Folglich kann man durch Nullsetzen von (4.5) unter Zuhilfenahme von (4.4) die Trajektorien durch ihre kinetische Energie zum Anfangszeitpunkt t_0

$$E_0^{\text{kin}} = \frac{\hbar\varpi_b}{2} \left(\frac{p_0}{\hbar} \right)^2 \quad (4.7)$$

und die *effektive Barrierenhöhe*

$$B_{\text{eff}} = \left(\sqrt{1 + \eta_b^2} + \eta_b \right)^2 B \geq B \quad (4.8)$$

klassifizieren [HS75, ABGW00, Abe02]. Die Barriere selbst hat dabei die Höhe

$$B = -V(q_0) = \frac{\hbar\varpi_b}{2} q_0^2. \quad (4.9)$$

Alle Trajektorien mit $E_0^{\text{kin}} < B_{\text{eff}}$ werden an der Barriere reflektiert. Für die Überwindungswahrscheinlichkeit gilt folglich $\Pi_{\infty} < 1/2$. Im Gegensatz dazu können alle Trajektorien mit $E_0^{\text{kin}} > B_{\text{eff}}$ die Barriere überwinden und es gilt $\Pi_{\infty} > 1/2$.

4.2 Die Anfangsbedingungen

Statt der Anfangskoordinaten q_0 und -impulse p_0 werden hier die Einschussenergie E und die Höhe der zu überwindenden Barriere B aus (4.9), als Variable benutzt. Für numerische Rechnungen wird in Übereinstimmung mit der typischen Höhe der inneren Barriere der Wert $B = 10$ MeV genommen (vgl. z.B. [DH00]). Die kinetische Anfangsenergie (4.7) und die durch die Temperatur T parametrisierte Anregungsenergie E_0^* , bei der die Compoundkern-Bildung abläuft, hängen von der Stärke der Reibung in der Anfangsphase (“sticking”) ab. Über die in dieser Phase ablaufenden Prozesse, kann hier keine detaillierte Aussage gemacht werden. Dazu muss angemerkt werden, dass für die Transportkoeffizienten bisher *keine* mikroskopische Theorie existiert, die Quantenfluktuationen berücksichtigt und auch für diese Phase angewendet werden könnte. Statt einer expliziten Behandlung wird anhand verschiedener *Annahmen* untersucht, wie sensibel die Ergebnisse von der Unsicherheit der Anfangsbedingungen abhängen. Es wird dabei davon ausgegangen, dass die

Einschussenergie E über dem Barrierenscheitel stark dissipiert wird. Wie in Abb. 4.1 angedeutet, wird angenommen, dass ein Großteil der zur Verfügung stehenden Energie $E + B$ in thermische Anregung umgewandelt wird und der Rest als kinetische Anfangsenergie für die Compoundkern-Bildung dient:

$$E_0^* = aT^2 = (1 - r)(E + B) \quad \text{und} \quad E_0^{\text{kin}} = r(E + B) \quad (4.10)$$

Das Verhältnis r mit $0 \leq r \leq 1$ wird später festgelegt. Als Abschätzung für den Niveaudichte-Parameter wird der Wert $a \approx A/10$ MeV benutzt. In Abb. 4.2 ist die Abhängigkeit der Temperatur T von der Einschussenergie für einen Kern mit Nukleonenzahl $A = 224$ und zwei verschiedene Werte des Verhältnisses r gezeigt. Die erhaltenen Temperaturen liegen

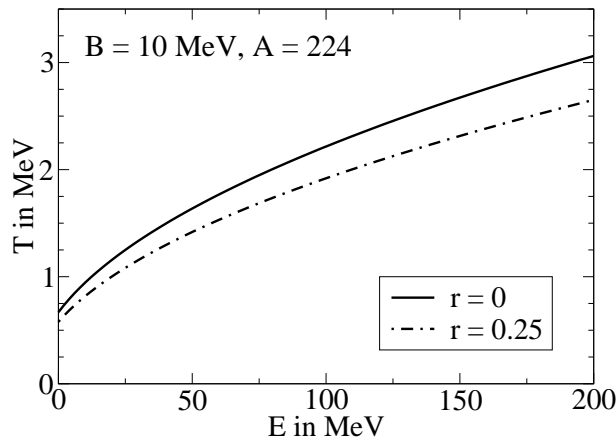


Abbildung 4.2: Die Abhängigkeit der Temperatur von der Einschussenergie.

im für Schwerionen-Reaktionen typischen Bereich. Beispielsweise wurde in [AWOA99] für das superschwere Element $^{298}_{114}_{184}$, von dem vorhergesagt wurde, dass es im Zentrum der “Insel superschwerer Elemente” liegt, der Temperaturbereich $T = 0.68 \dots 1.24$ MeV untersucht.

Mithilfe von Langevin-Simulationen der Anfangsphase wurde unter Verwendung des “surface-friction” Modells [GK78] herausgefunden, dass als Anfangsbedingung für die Compoundkern-Bildung kaum kinetische Energie übrig bleibt. Um diese Behauptung zu unterstützen wird z.B. in [Abe02] in Abb. 3 oder in [SKA02] in Abb. 1b die Verteilung des Relativimpulses p am Ende der “sticking”-Phase gezeigt. Diese entspricht in sehr guter Näherung einer bei $p_0 = 0$ zentrierten Maxwell-Verteilung mit Temperatur T . Im Gegensatz dazu wurde in [KSA02, AO03] vorgeschlagen, in der Anfangsphase eine schwächere Dämpfung als die des “surface-friction” Modells zu verwenden, um experimentelle Daten reproduzieren zu können. In der vorliegenden Arbeit werden solche Unsicherheiten berücksichtigt, indem zwei verschiedene Werte des Verhältnisses r aus (4.10) verglichen werden. Der Fall verschwindender kinetischer Anfangsenergie $E_0^{\text{kin}} = 0$ entspricht dabei $r = 0$. Als Vergleichsfall mit wesentlich schwächerer Reibung bei großen Deformationen wird der Fall $r = 0.25$ herangezogen.

Zur Festlegung der Fluktuationen der Phasenraumdichte zur Zeit t_0 benötigt man noch die Breiten in p und q . Da hier u.a. die Wichtigkeit der Berücksichtigung von *Quanteneffekten* studiert werden soll, verbietet sich die Wahl $\sigma_{\mu\nu}(t_0) \equiv 0$. Eine solche würde die Unschärferelation

$$\sigma_{pp}(t)\sigma_{qq}(t) - \sigma_{qp}^2(t) \geq \hbar^2/4 \quad (4.11)$$

verletzen. Im Folgenden werden die Anfangsfluktuationen mithilfe zweier weiterer Parameter $w > 0$ und $W \geq 1$ durch die stationären Impuls-Fluktuationen $\sigma_{pp}^{st,b}$ aus (A.14) festgelegt:

$$\sigma_{pp}(t_0) = w \sigma_{pp}^{st,b}, \quad \sigma_{qq}(t_0) = W \frac{\hbar^2}{4w\sigma_{pp}^{st,b}}, \quad \sigma_{qp}(t_0) = 0. \quad (4.12)$$

Der Parameter w legt hier die anfänglichen Impuls-Fluktuationen vollständig fest und W bestimmt die Koordinaten-Fluktuationen aus den ersteren. Im Falle einer starken Reibung in der Anfangsphase kann die Impulsverteilung gut durch das thermische Gleichgewicht bzw. im klassischen Grenzfall durch die Maxwell-Verteilung beschrieben werden und es gilt $w \approx 1$. Der Parameter W kann als Maß für die Gesamtbreite der Phasenraumverteilung interpretiert werden. Die Forderung $W \geq 1$ garantiert die Gültigkeit der Unschärfe-Relation (4.11) zum Anfangszeitpunkt t_0 . Im nächsten Abschnitt wird die quantenmechanische Zeitentwicklung mit den im Abschnitt 3.3 besprochenen Grenzfällen hoher Temperatur (klassisch) und schwacher Dämpfung verglichen. Dies ist nur sinnvoll, wenn in allen Fällen zum Zeitpunkt t_0 *dieselbe* Phasenraumdichte zugrundegelegt wird. Daher wird hier für die stationären Impuls-Fluktuationen $\sigma_{pp}^{st,b}$ in (4.12) *immer* der quantenmechanische Wert (A.14) benutzt.

Das in Abb. 3.4 dargestellte Verhalten der stationären Fluktuationen $\sigma_{\mu\nu}^{st,b}$ in Abhängigkeit von T zeigt wesentliche Abweichungen der Grenzfälle hoher Temperatur und schwacher Dämpfung von den voll quantenmechanischen Resultaten. Insbesondere für $\sigma_{pp}^{st,b}$ und makroskopische Transportkoeffizienten der mittleren Bewegung (Abb. 3.4 unten) sind die Abweichungen groß. Daraus könnte vorschnell der Schluss gezogen werden, dass die Wahrscheinlichkeiten $\Pi(t)$ und Π_∞ bei nicht zu hohen Temperaturen für die verschiedenen Fälle wesentlich voneinander abweichen. Allerdings muss man sich vergegenwärtigen, dass zu (4.6), das im Argument der Fehlerfunktion von (4.3) auftritt, nicht nur die stationären Fluktuationen $\sigma_{\mu\nu}^{st,b}$ beitragen, sondern auch die Anfangsfluktuationen $\sigma_{\mu\nu}(t_0)$. Um zu untersuchen, welcher Einfluss tatsächlich von den verschiedenen Näherungen zu erwarten ist, ist in Abb. 4.3 die Temperaturabhängigkeit von σ_{qq}^∞ aus (4.6) gezeigt. Aufgetragen sind für das mikroskopische (links) und das makroskopische Modell (rechts) die auf die quantenmechanische Rechnung normierten Ergebnisse der Näherungen hoher Temperatur und schwacher Dämpfung. Gezeigt ist das Verhalten für die bei $t = t_0$ engste mit der Unschärferelation (4.11) vereinbare Phasenraumverteilung, deren Impulsverteilung anfangs im thermischen Gleichgewicht ist ($w = W = 1$). Für alle anderen untersuchten Werte von w und W war der Effekt noch kleiner. Da die Abweichung der gezeigten Quotienten von Eins relativ klein ist, kann schon hier geschlossen werden, dass die Quanteneffekte in der *Kollektivbewegung* klein sind. Man beachte dazu für den Fall makroskopischer Transportkoeffizienten, dass

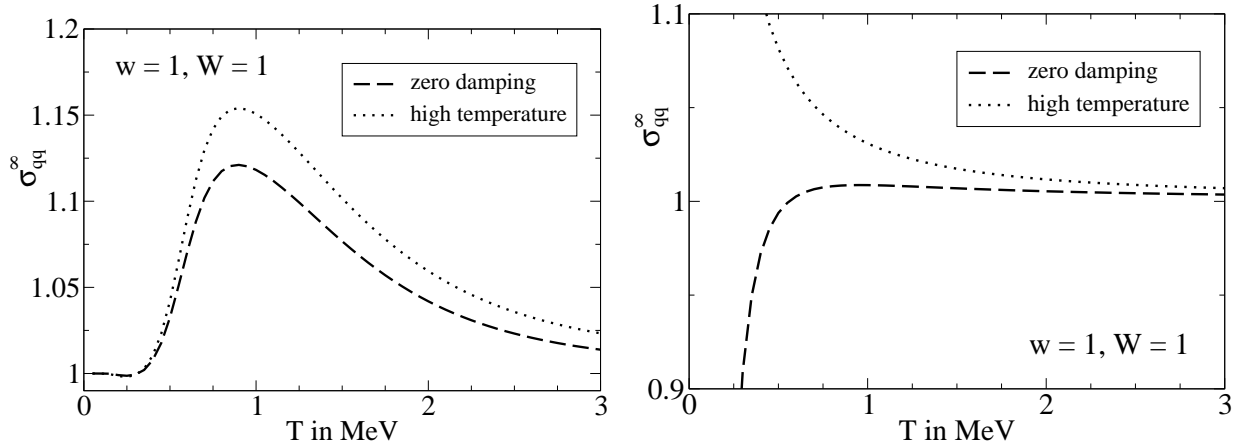


Abbildung 4.3: Die Temperaturabhängigkeit von σ_{qq}^{∞} für die Grenzfälle schwacher Dämpfung und hoher Temperatur. Beide Resultate sind auf den quantenmechanischen Wert normiert. Links: mikroskopisches Modell, rechts: makroskopisches Modell.

in der hier vorgenommenen Modellierung des Prozesses nur Temperaturen $T \gtrsim 0.6$ MeV zugänglich sind (vgl. Abb. 4.2).

4.3 Die Bildungswahrscheinlichkeit

In Abb. 4.4 ist die Wahrscheinlichkeit $\Pi(t)$ für die Bildung eines Compoundkerns für die Einschussenergie $E = B = 10$ MeV aufgetragen. Die Transportkoeffizienten wurden aus dem im Kapitel 3 definierten mikroskopischen Modell genommen. Die in (4.10) und (4.12) definierten Parameterwerte für r , w und W sind in den Abbildungen spezifiziert. Es sind ausschließlich Rechnungen mit den voll quantenmechanischen Diffusionskoeffizienten (3.6), (3.7) und (3.9) mit (A.14) bis (A.16) gezeigt. Die dargestellte Situation entspricht un-

| r | E_0^{kin} | E_0^* | T | η_b^{micro} | $B_{\text{eff}}^{\text{micro}}$ | η_b^{macro} | $B_{\text{eff}}^{\text{macro}}$ |
|------|--------------------|---------|------|-------------------------|---------------------------------|-------------------------|---------------------------------|
| 0.0 | 0.0 | 20.0 | 0.94 | 0.25 | 16.4 | 5.80 | 1366 |
| 0.25 | 5.0 | 15.0 | 0.82 | 0.18 | 14.3 | 5.83 | 1379 |

Tabelle 4.1: Die Energieverhältnisse bei der Compoundkern-Bildung für $E = B = 10$ MeV. Alle Energien und die Temperatur sind in MeV angegeben. Die effektive Dämpfung und die effektive Barrierenhöhe (in MeV) sind für den mikroskopischen und den makroskopischen Satz von Transportkoeffizienten angegeben.

terdämpfter Dynamik: $\eta_b \approx 0.2$ (vgl. Tab. 4.1). In diesem Fall spielt die anfängliche kinetische Energie E_0^{kin} für die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeit für die Compoundkern-

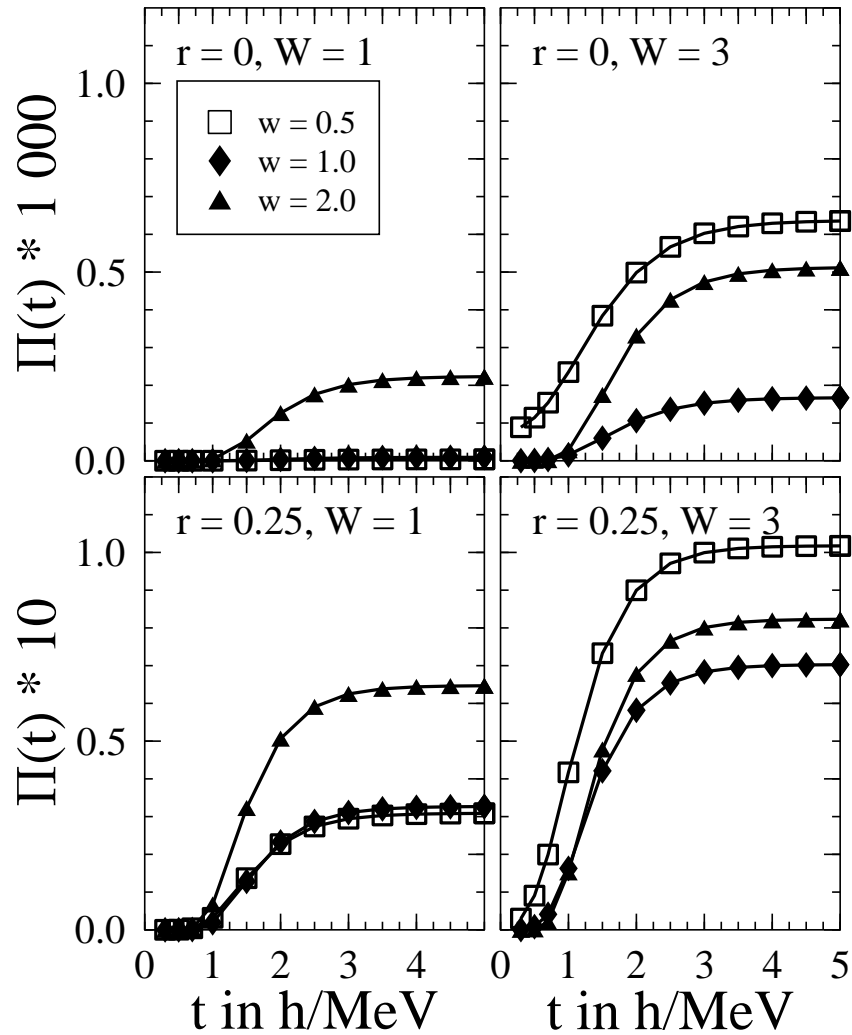


Abbildung 4.4: Die Zeitentwicklung der Bildungswahrscheinlichkeit im mikroskopischen Modell für verschiedene Parameter. Es wurden quantenmechanische Diffusionskoeffizienten und die Einschussenergie $E = B = 10$ MeV verwendet. Man beachte, dass sich die Skalierung oben und unten um zwei Größenordnungen unterscheidet. Beim Parameter $r = 0$ startet der Prozess mit verschwindender kinetischer Anfangsenergie. Bei $w = 1$ ist die Impulsverteilung anfangs im thermischen Gleichgewicht und $W = 1$ stellt die kompakteste Phasenraumverteilung dar, die mit der Unschärferelation vereinbar ist.

Bildung eine Rolle. Der stationäre Endwert Π_∞ ist bei vollständig aufgezehrter kinetischer Energie ($r = 0$) unabhängig von der Wahl der anderen Parameter *um zwei Größenordnungen kleiner* als im Fall $r = 0.25$. Auch die Zeitskala, auf der $\Pi(t)$ von 0 auf Π_∞ anwächst, verkürzt sich mit zunehmender kinetischer Anfangsenergie E_0^{kin} etwas. Bei höheren Einschussenergien E wird der Effekt deutlicher. Im Fall $E = 50$ MeV verkürzt sich die Zeitskala beispielsweise um einen Faktor $2 \dots 3$. Von den Parametern w und W , die die Breite der anfänglichen Impuls- bzw. Phasenraumverteilung spezifizieren, hängt die Zeitskala hingegen überhaupt nicht ab. Auch die Variation von Π_∞ mit diesen Parametern ist mit weniger als einer Größenordnung weitaus schwächer, als die Abhängigkeit von r . Dennoch sind in Abb. 4.4 die Unsicherheiten deutlich, die die Unkenntnis der Anfangsbedingungen mit sich bringt.

Unter Verwendung des makroskopischen Modells für die Transportkoeffizienten ist die Dynamik der kollektiven Bewegung stark überdämpft: Für die hier verwendeten Parameter bekommt man in diesem Fall $\eta_b \approx 5.8$ (vgl. Tab. 4.1). Die Zeitskala, auf der $\Pi(t)$ dabei ansteigt, stellt sich um einen Faktor 10 größer als im in Abb. 4.4 gezeigten mikroskopischen Fall und von der anfänglichen kinetischen Energie E_0^{kin} bzw. dem Anfangsimpuls p_0 völlig unabhängig heraus. Auch der stationäre Endwert der Bildungswahrscheinlichkeit Π_∞ ist im makroskopischen Modell fast unabhängig von E_0^{kin} . Dieses Verhalten ist in Übereinstimmung mit dem Smoluchowski-Grenzfall, wo jede Abhängigkeit vom Impuls oder der kinetischen Energie verschwindet.

Zur Untersuchung der Abhängigkeit des stationären Endwertes Π_∞ der Wahrscheinlichkeit für Compoundkern-Bildung von der Einschussenergie E ist es sinnvoll, das in (4.8) eingeführte Konzept der effektiven Barrierenhöhe zu benutzen. In Abb. 4.5 wird ein Vergleich zwischen der voll quantenmechanischen Rechnung für die Diffusionskoeffizienten und den Grenzfällen hoher Temperatur und schwacher Dämpfung angestellt. Dazu ist links Π_∞ als Funktion des Verhältnisses der anfänglichen kinetischen Energie E_0^{kin} zur effektiven Barrierenhöhe B_{eff} für das mikroskopische Modell und die Parameterwahl $r = 0.25$, $w = 1$ und $W = 3$ (vgl. Abb. 4.4 rechts unten) auf linearer Skala dargestellt. Der in Abb. 4.4 benutzte Wert $E = 10$ MeV gehört dabei zu $E_0^{\text{kin}}/B_{\text{eff}} = 0.35$. Wie schon in Abb. 4.2 wurde auch hier die Energie auf den Bereich $E = 0 \dots 200$ MeV begrenzt, für den die Temperaturen im Bereich $T = 0.6 \dots 2.6$ MeV liegen. Man beachte, dass im betrachteten Energiebereich die mittlere Trajektorie die Barriere nicht überquert und folglich immer gilt $\Pi_\infty < 1/2$. Das “back-bending” in Abb. 4.5 links bei $E_0^{\text{kin}}/B_{\text{eff}} \approx 0.5$ kommt durch die unterschiedliche E -Abhängigkeit der anfänglichen kinetischen Energie E_0^{kin} und der effektiven Barrierenhöhe (4.8) zustande. Das Verhältnis $E_0^{\text{kin}}/B_{\text{eff}}$ hat bei $r = 0.25$ ein Maximum und ein Minimum (bei $T \approx 4$ MeV, also weit jenseits des hier betrachteten Energiebereichs). Für extrem hohe Einschussenergien gilt: $\Pi_\infty \rightarrow 1$.

Beide verwendeten Näherungen für die Diffusionskoeffizienten überschätzen in Abb. 4.5 links die voll quantenmechanische Rechnung etwa gleich stark. Wie schon im Zusammenhang mit Abb. 4.3 angedeutet, bestätigt sich hier, dass die *Quanteneffekte der Kollektiven*

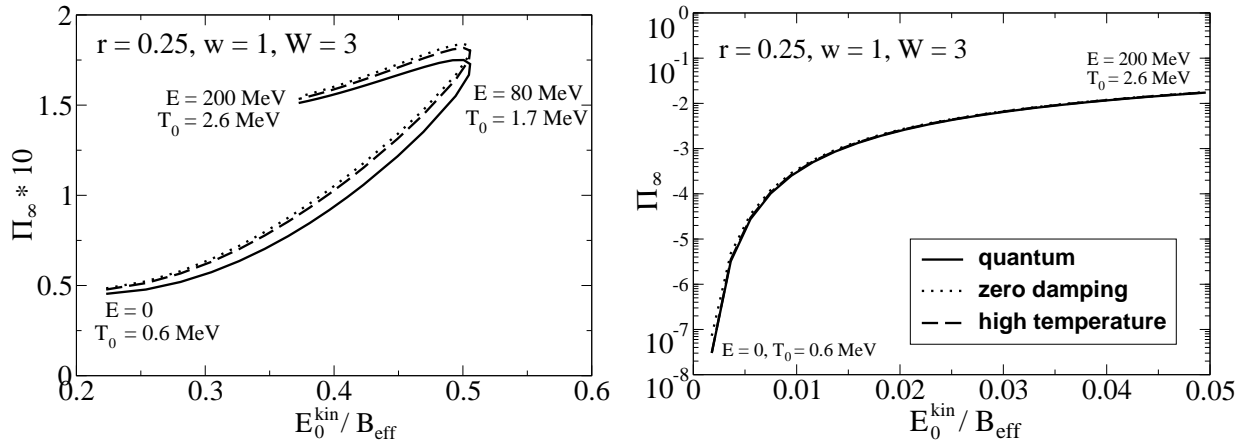


Abbildung 4.5: Die Wahrscheinlichkeit Π_∞ für die Compoundkern-Bildung als Funktion des Verhältnisses $E_0^{\text{kin}}/B_{\text{eff}}$. Links wurde das mikroskopische Modell für die Transportkoeffizienten verwendet, rechts das makroskopische. Das System läuft mit einer endlichen anfänglichen kinetischen Energie auf die Barriere zu ($r = 0.25$) und die Impulsverteilung ist anfangs im thermischen Gleichgewicht ($w = 1$). Die Phasenraumverteilung ist breiter als von der Unschärferelation gefordert ($W = 3$). Man beachte, dass sich die Einschussenergie längs der Kurven verändert: $E = 0 \dots 200$ MeV.

tivbewegung klein sind. Sie führen für Einschussenergien unterhalb der effektiven Barrierrhöhe (4.8) zu einer *Absenkung* von Π_∞ gegenüber den beiden Grenzfällen. Dieses Resultat widerspricht zunächst der Intuition. Allerdings muss man sich vergegenwärtigen, dass beim instabilen Oszillator die stationären Koordinaten-Fluktuationen mit Quanteneffekten *kleiner* sind als im klassischen Fall (vgl. Abb. 3.4). Dieses Verhalten der Koordinaten-Fluktuationen macht plausibel, dass Π_∞ in Fällen, wo die mittlere Trajektorie die Barriere überquert ($E_0^{\text{kin}} > B_{\text{eff}}$) die Bildungswahrscheinlichkeit (4.2) mit Quanteneffekten *größer* ist als im klassischen Fall und beim hier betrachteten Fall von Reflexion ($E_0^{\text{kin}} < B_{\text{eff}}$) *kleiner*. Über dieses heuristische Argument hinaus hilft zum Verständnis dieses Effekts nur die erneute Betrachtung der Größe (4.6): Mit Quanteneffekten ist der Nenner des Arguments der Fehlerfunktion aus (4.3) *kleiner* (vgl. Abb. 4.3) und folglich die Funktion selbst bei positivem Zähler (Überqueren) *größer* und bei negativem Zähler (Reflexion) *kleiner* als im klassischen Fall.

In Abb. 4.5 ist rechts Π_∞ als Funktion von $E_0^{\text{kin}}/B_{\text{eff}}$ für das makroskopische Modell in logarithmischer Darstellung gezeigt. Der Energiebereich und die Parameter sind die gleichen, die schon für die mikroskopischen Transportkoeffizienten benutzt wurden. Man findet hier kein “back-bending”. Die Quanteneffekte verhalten sich qualitativ ähnlich wie oben beschrieben. Quantitativ sind sie bei den betrachteten Temperaturen sogar noch kleiner als im mikroskopischen Modell (vgl. Abb. 4.3) und daher auf logarithmischer Skala kaum zu sehen. Aufgrund der Tatsache, dass im makroskopischen Modell die Kollektivbewegung

stark überdämpft ist ($\eta_b = 5.9 \dots 4.9$ für $T = 0.6 \dots 3$ MeV), ist die effektive Barrierenhöhe (4.8) hier *sehr hoch*: $B_{\text{eff}} = 1.4$ GeV \dots 980 MeV. Im mikroskopischen Modell bewegt sich die gleiche Größe im Bereich $B_{\text{eff}} = 15 \dots 180$ MeV. Daher ist Π_∞ im makroskopischen Modell mehrere Größenordnungen kleiner als im mikroskopischen.

In Abb. 4.6 wird gezeigt, dass die wesentlich schwächere Dämpfung im mikroskopischen Modell für die Transportkoeffizienten insbesondere bei kleinen Einschussenergien einen Unterschied von mehreren Größenordnungen in Π_∞ mit sich bringt [RH04a]. Außerdem

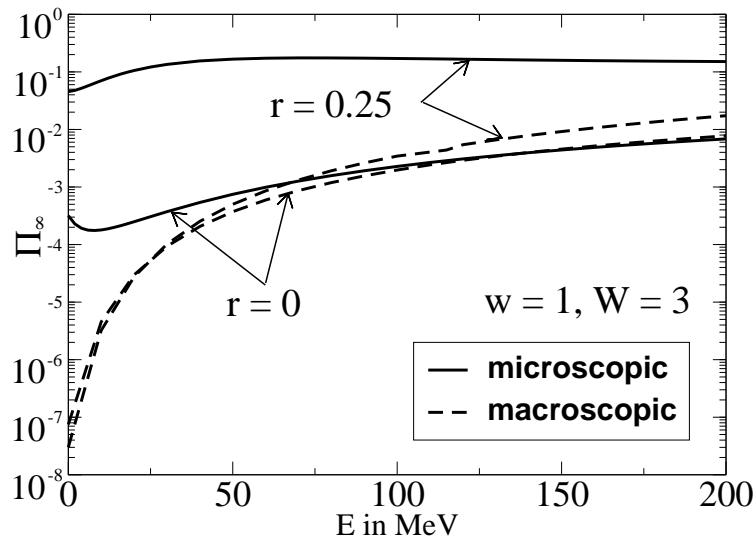


Abbildung 4.6: Die Wahrscheinlichkeit für die Bildung eines Compoundkerns als Funktion der Einschussenergie.

sieht man die extreme Sensitivität auf r bzw. die anfängliche kinetische Energie im mikroskopischen Modell. Man beachte dazu, dass sich weder die Temperatur, noch die effektive Dämpfung in beiden Fällen wesentlich voneinander unterscheiden (vgl. Tab. 4.1). Im makroskopischen Modell ist eine solche r -Abhängigkeit nur bei hohen Einschussenergien beobachtbar und zudem viel schwächer. Die *Quanteneffekte der nukleonischen Bewegung*, führen zu wesentlichen Unterschieden (vgl. Abschnitt 3.2) in den Transportkoeffizienten für die mittlere Bewegung zwischen dem mikroskopischen und dem makroskopischen Modell. Angewendet auf die Wahrscheinlichkeit zur Bildung eines Compoundkerns liefert die im mikroskopischen Modell wesentlich kleinere Dämpfung eine um bis zu mehrere Größenordnungen höhere Ausbeute. Verglichen damit sind die *Quanteneffekte der Kollektivbewegung*, die durch die quantenmechanische Berechnung der Diffusionskoeffizienten aus dem FDT ins Spiel kommen (vgl. Abschnitt 3.3), *klein*. Sie sind nur bei sehr tiefen Temperaturen wichtig.

Kurzzusammenfassung

Im Kapitel 4 wurden Gauß'sche Lösungen (A.19) der Kramers-Gleichung (2.36) im Rahmen des in Abb. 4.1 dargestellten Szenarios angewendet, um die Wahrscheinlichkeit der Compoundkern-Bildung bei Schwerionen-Reaktionen unter Verwendung der Transportkoeffizienten aus dem Kapitel 3 abzuschätzen. Die wichtigsten Ergebnisse sind:

- Die Quanteneffekte der Kollektivbewegung sind wesentlich schwächer als diejenigen der nukleonischen Bewegung, die die Dämpfung im mikroskopischen Modell stark reduzieren (vgl. Abb. 4.5).
- Die Bildungswahrscheinlichkeit ist im mikroskopischen Modell aufgrund der schwächeren Dämpfung stärker vom Anfangsimpuls und damit von den (weitgehend unbekannt) Reibungskräften bei großen Deformationen abhängig als im makroskopischen.
- Gerade bei kleinen Einschussenergien übersteigt die Bildungswahrscheinlichkeit des mikroskopischen Modells diejenige des makroskopischen um Größenordnungen (vgl. Abb. 4.6).

Kapitel 5

Vielteilchen-Systeme mit separabler Zweiteilchen-Wechselwirkung

In den vorhergehenden beiden Kapiteln wurde deutlich, dass die Verwendung einer mikroskopischen Theorie für die Transportkoeffizienten der Kollektivbewegung wichtig ist. Nun soll eine Methode genauer untersucht werden, mit der von einer separablen Zweiteilchen-Wechselwirkung

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^m k_{\mu} \hat{F}^{\mu} \hat{F}^{\mu} \quad (2.2)$$

startend kollektive Koordinaten eingeführt werden können. Im Kapitel 7 wird diese Theorie so erweitert, dass ebenfalls Transportkoeffizienten extrahiert werden können.

Ein prominentes Beispiel für eine Wechselwirkung der Form (2.2) ist die *Quadrupol-Quadrupol-Wechselwirkung*. Auch die theoretische Behandlung von kürzlich experimentell zugänglich gewordenen mikroskopisch kleinen supraleitenden Aluminiumclustern von 5...10 nm Ausdehnung [RBT95, BRT96, RBT97] oder kleinen suprafluiden Systemen startet wie die *Paarungswechselwirkung* in Atomkernen von einer solchen separablen Wechselwirkung [BDRT97, BD98, RCR99, RZC99, BD99, CR00, RZ00, RC01]. Mit $G > 0$ und dem Paarerzeugungsoperator $\hat{P}^{\dagger} = \sum_j \hat{a}_{j+}^{\dagger} \hat{a}_{j-}^{\dagger}$ lautet der dort betrachtete Hamilton-Operator

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - G \hat{P}^{\dagger} \hat{P} . \quad (5.1)$$

In [IH99] wurde (5.1) benutzt, um den Einfluss von Paarkorrelationen auf die Dämpfung der Kollektivbewegung zu untersuchen.

In der vorliegenden Arbeit wird zum Zweck der Einführung kollektiver Koordinaten und der Beschreibung dissipativer Systeme ein Hamilton-Operator mit lediglich einem separablen Wechselwirkungsterm betrachtet:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \frac{k}{2} \hat{F} \hat{F} \quad (5.2)$$

Im Unterschied zur im Abschnitt 2.2 vorgestellten Theorie des linearen Response sollen die Kopplungskonstante k und die Operatoren \hat{H} und \hat{F} hier *nicht* von der einzuführenden kollektiven Koordinate abhängen. Zum späteren Gebrauch sei bereits an dieser Stelle betont, dass in (5.2) im Einteilchen-Anteil \hat{H} keine Restwechselwirkung berücksichtigt ist. Die Verallgemeinerung der im Folgenden aufbauend auf (5.2) abgeleiteten Ergebnisse auf den Fall (2.2) sollte keine grundsätzlichen Schwierigkeiten bereiten (vgl. [AA97]). Zum Studium isoskalarer Moden genügt eine Beschränkung auf eine attraktive Wechselwirkung mit $k < 0$. Wechselwirkungen mit repulsivem Anteil sind in [CR97] für Systeme ohne Dissipation untersucht worden.

5.1 Die Zustandssumme

Die Zustandssumme eines durch den Hamilton-Operator (5.2) beschriebenen Systems lautet im großkanonischen Ensemble

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{A})] = \text{Tr} \hat{U}(\hbar\beta) . \quad (5.3)$$

Hier ist $\beta = 1/T$ die inverse Temperatur und μ das chemische Potential. Aus \mathcal{Z} kann die Niveaudichte des zugrunde liegenden Systems berechnet werden (siehe Abschnitt 6.2.4). Dieser Umstand hat zur Entwicklung eines Approximationsschemas für \mathcal{Z} geführt [AZ84, LAB88, ABLP88, LB89, PBB91], das in der vorliegenden Arbeit weiterentwickelt wird. Neben der Niveaudichte können aus \mathcal{Z} auch thermodynamische Größen wie die freie und innere Energie sowie die spezifische Wärme der zugrundeliegenden Systeme (siehe Abschnitt 6.2.1 und 6.2.2) bestimmt werden. Ebenso können thermische Erwartungswerte von Observablen und Stärkefunktionen berechnet werden [PBB91, AA97, RR98]. Im Kapitel 8 dieser Arbeit wird vorgeführt, wie man aus der Zustandssumme außerdem die Zerfallsrate eines metastabilen Systems ableiten kann [RH01, RH04b].

In (5.3) wurde in Analogie zum Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(\Delta t) = \exp(-i\hat{\mathcal{H}}\Delta t/\hbar)$ durch Einführen einer *imaginären Zeit* τ , die von 0 bis $\hbar\beta$ läuft, durch die Ersetzung $i\Delta t \leftrightarrow \hbar\beta$ der “Imaginärzeit-Propagator” $\hat{U}(\hbar\beta)$ definiert. Zu dessen Berechnung kann das Imaginärzeit-Intervall der Länge $\hbar\beta = N\varepsilon$ in N Teilschritte zerlegt werden. Durch Anwenden einer Hubbard-Stratonovich-Transformation (HST) [Str57, Hub59] auf jedem dieser Schritte der Länge ε kann dabei zur Behandlung der separablen Wechselwirkung $\hat{F}\hat{F}$ aus (5.2) ein *fluktuierendes Hilfsfeld* $q(\tau)$ eingeführt werden. Der Fehler, den man dabei in $\hat{U}(\hbar\beta)$ in Kauf nehmen muss, ist von der Ordnung $N\varepsilon^2 \sim \beta^2/N$. Nach einem Übergang zum Grenzfall $N \rightarrow \infty$ kann die Zustandssumme als *Funktionalintegral* über $q(\tau)$

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp[-S_E[q(\tau)]/\hbar] \quad (5.4)$$

geschrieben werden. Das Integralmaß wird hier nur in der Fourier-Darstellung gebraucht und in (5.9) angegeben (für Details siehe z.B. [NO88, AA97, Rum00]). Die zum Pfad

$q(\tau)$ gehörige *Euklidische Wirkung* $S_E[q(\tau)]$ kann dabei mit dem durch die HST ins Spiel gebrachten Einteilchen-Hamilton-Operator

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{HST}}[q(\tau)] = \hat{H} + q(\tau)\hat{F} \quad (5.5)$$

und

$$\hat{u}[q(\tau)] = \hat{T} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \hat{\mathcal{H}}_{\text{HST}}[q(\tau)] \right] \quad (5.6)$$

folgendermaßen geschrieben werden:

$$S_E[q(\tau)] = \frac{1}{2|k|} \int_0^{\hbar\beta} d\tau q^2(\tau) - \hbar \ln \text{Tr} \hat{u}[q(\tau)] \quad (5.7)$$

Das Symbol \hat{T} bezeichnet in (5.6) den Imaginärzeit-Ordnungsoperator. Man beachte die Ähnlichkeit des Hamilton-Operators (5.5) mit (2.5), der im Kapitel 2.2 als Ausgangspunkt der Linear-Response-Theorie für die kollektive Kernbewegung verwendet wurde.

Im Folgenden soll das Funktionalintegral für die Zustandssumme (5.4) in einen statischen Anteil und “dynamische” Korrekturen aufgespalten werden. Dazu ist es günstig, das Hilfsfeld mit den Matsubara-Frequenzen ν_r in eine Fourier-Reihe zu zerlegen:

$$q(\tau) = q_0 + \sum_{r \neq 0} q_r \exp(i\nu_r \tau) \quad \text{mit} \quad \nu_r = \frac{2\pi}{\hbar\beta} r = \frac{2\pi}{\hbar} Tr \quad (5.8)$$

Damit kann die Zustandssumme (5.4) mit dem Integralmaß

$$\mathcal{D}q(\tau) = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi|k|}} dq_0 \cdot \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{r=1}^{(N-1)/2} \frac{\beta}{\pi|k|} d\text{Re}(q_r) d\text{Im}(q_r) = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi|k|}} dq_0 \cdot \mathcal{D}'q \quad (5.9)$$

in der Form

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta) &= \sqrt{\frac{\beta}{2\pi|k|}} \int dq_0 \exp[-\beta \mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)] \zeta(\beta, q_0) \\ &= \sqrt{\frac{\beta}{2\pi|k|}} \int dq_0 \exp[-\beta \mathcal{F}^{\text{eff}}(\beta, q_0)] \end{aligned} \quad (5.10)$$

geschrieben werden, auf die im Folgenden häufig zurückgegriffen wird. Hier ist neben dem gleich zu besprechenden Faktor $\zeta(\beta, q_0)$ die Größe

$$\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0) = \frac{1}{2|k|} q_0^2 - \frac{1}{\beta} \ln z(\beta, q_0) \quad (5.11)$$

eingeführt worden, wo $z(\beta, q_0)$ die zum statischen Anteil

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{H} + q_0 \hat{F} \quad (5.12)$$

des Einteilchen-Hamilton-Operators (5.5) gehörende Zustandssumme im großkanonischen Ensemble ist. \mathcal{F}^{SPA} kann als die freie Energie der Nukleonen interpretiert werden, die sich in einem tatsächlich *statischen* mittleren Feld bewegen, das durch die kollektive Koordinate q_0 charakterisiert ist. Während das “dynamische” Hilfsfeld $q(\tau)$ eine *Selbstkonsistenzbedingung* vom Typ (2.4) erfüllt, gilt für den statischen Pfad

$$k\langle\hat{F}\rangle_{q_0} = q_0 \quad (5.13)$$

hingegen nur *an den Extrema* der freien Energie (5.11). Dies sieht man durch Anwenden von statischer Störungstheorie auf (5.12) [Rum00].

Die effektive Größe

$$\mathcal{F}^{\text{eff}}(\beta, q_0) = \mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0) - \frac{1}{\beta} \ln \zeta(\beta, q_0) \quad (5.14)$$

ist dabei die freie Energie der Nukleonen, die sich in einem mittleren Feld bewegen, dessen “dynamische” kollektive Koordinate $q(\tau)$ *im Imaginärzeit-Mittel* den Wert q_0 annimmt. Im Gegensatz zu \mathcal{F}^{SPA} enthält also \mathcal{F}^{eff} über den Faktor

$$\zeta(\beta, q_0) = \int \mathcal{D}'q \exp[-s_{\text{E}}(\beta, q_0)/\hbar] \quad (5.15)$$

auch Information über die *Dynamik*. Die vom statischen Anteil abhängige Euklidische Wirkung kann nach Potenzen von q_r entwickelt werden [RH04b, RA02]:

$$s_{\text{E}}(\beta, q_0) = \frac{\hbar\beta}{|k|} \left(\sum_{r,s \neq 0} \lambda_{rs} q_r q_s + \sum_{r,s,t \neq 0} \rho_{rst} q_r q_s q_t + \sum_{r,s,t,u \neq 0} \sigma_{rstu} q_r q_s q_t q_u \right) + \mathcal{O}(q_r^5) \quad (5.16)$$

Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, tragen Terme erster Ordnung nicht bei und wurden deshalb garnicht angeschrieben. In bisherigen Anwendungen wurde diese Entwicklung nach dem Term zweiter Ordnung abgebrochen. Im Folgenden wird sie gemeinsam mit (5.10) und (5.15) als Ausgangspunkt für verschiedene Näherungen genommen. Wenngleich die Berechnung der Koeffizienten der Entwicklung für Vielteilchen-Systeme mit zunehmender Ordnung komplexer wird, kann man in (5.16) im Prinzip zu beliebiger Ordnung in q_r gehen. In dieser Arbeit werden Terme von höherer als vierter Ordnung allerdings nicht benutzt.

5.2 Die Entwicklungskoeffizienten

Die Entwicklungskoeffizienten in (5.16) sind für wechselwirkende Vielteilchen-Systeme gegeben durch [RH04b, RA02]

$$\lambda_{rs}(\beta, q_0) = \frac{1}{2} \delta_{r,-s} + \frac{-|k|}{2! \beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_r d\tau_s L_{rs}(\beta, q_0) , \quad (5.17)$$

$$\rho_{rst}(\beta, q_0) = \frac{-|k|}{3! \beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_r d\tau_s d\tau_t R_{rst}(\beta, q_0) , \quad (5.18)$$

$$\sigma_{rstu}(\beta, q_0) = \frac{-|k|}{4! \beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_r d\tau_s d\tau_t d\tau_u [S_{rstu}(\beta, q_0) - 3L_{rs}(\beta, q_0)L_{tu}(\beta, q_0)] \quad (5.19)$$

mit

$$L_{rs}(\beta, q_0) = e^{i\nu_r \tau_r} e^{i\nu_s \tau_s} \frac{1}{\hbar^2} \langle \hat{\mathcal{T}} \hat{F}(\tau_r) \hat{F}(\tau_s) \rangle_{q_0} , \quad (5.20)$$

$$R_{rst}(\beta, q_0) = e^{i\nu_r \tau_r} e^{i\nu_s \tau_s} e^{i\nu_t \tau_t} \frac{1}{\hbar^3} \langle \hat{\mathcal{T}} \hat{F}(\tau_r) \hat{F}(\tau_s) \hat{F}(\tau_t) \rangle_{q_0} \quad (5.21)$$

$$\text{und } S_{rstu}(\beta, q_0) = e^{i\nu_r \tau_r} e^{i\nu_s \tau_s} e^{i\nu_t \tau_t} e^{i\nu_u \tau_u} \frac{1}{\hbar^4} \langle \hat{\mathcal{T}} \hat{F}(\tau_r) \hat{F}(\tau_s) \hat{F}(\tau_t) \hat{F}(\tau_u) \rangle_{q_0} . \quad (5.22)$$

Koeffizienten höherer Ordnung liefern entsprechend kompliziertere Ausdrücke, werden in dieser Arbeit aber nicht benötigt. Zur Berechnung der thermischen Mittelwerte und τ -Integrale kann man das in [AA97] für den Term zweiter Ordnung (5.17) angegebene Vorgehen verallgemeinern [RA02]. Hier wird die Rechnung am Beispiel eines Beitrags zum Koeffizienten σ_{rstu} vorgeführt. Die Übertragung auf alle anderen Fälle ist einfach. Die Ergebnisse sind im Anhang B zusammengestellt.

Zunächst ist es sinnvoll, die Operatoren $\hat{F}(\tau) = \sum_{ij} F_{ij} \hat{a}_i^\dagger(\tau) \hat{a}_j(\tau)$ in zweiter Quantisierung darzustellen und die imaginärzeit-geordneten Mittelwerte mit dem Wick-Theorem für endliche Temperaturen durch Ausführen aller Kontraktionen zu berechnen [NO88]. Für den hier behandelten Beispielterm (B.7) ergibt sich

$$\begin{aligned} & F_{ij} F_{kl} F_{mn} F_{op} \frac{1}{\hbar^4} \langle \hat{\mathcal{T}} \overbrace{a_i^\dagger(\tau_r) a_j(\tau_r) a_k^\dagger(\tau_s) a_l(\tau_s) a_m^\dagger(\tau_t) a_n(\tau_t) a_o^\dagger(\tau_u) a_p(\tau_u)} \rangle_{q_0} \\ &= F_{ij} F_{kl} F_{mn} F_{op} \delta_{il} (-\delta_{jo}) \delta_{kn} \delta_{mp} \times \\ & g_i^{(0)}(\tau_s - \tau_r) g_o^{(0)}(\tau_r - \tau_u) g_k^{(0)}(\tau_t - \tau_s) g_m^{(0)}(\tau_u - \tau_t) , \end{aligned} \quad (5.23)$$

wobei die ungestörten Einteilchen-Green-Funktionen in imaginärer Zeit definiert sind als

$$g_i^{(0)}(\tau_s - \tau_r) = -\frac{1}{\hbar} \langle \hat{\mathcal{T}} \hat{a}_i(\tau_s) \hat{a}_i^\dagger(\tau_r) \rangle_{q_0} = -\frac{1}{\hbar\beta} \sum_{I=-\infty}^{\infty} e^{-i\bar{\nu}_I(\tau_s - \tau_r)} g_i^{(0)}(i\bar{\nu}_I) \quad (5.24)$$

mit $\bar{\nu}_I = (2I + 1) \pi / \hbar\beta$. Die Frequenz-Darstellung stimmt in der komplexen z -Ebene mit (2.15) überein

$$g_i^{(0)}(i\bar{\nu}_I) = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{i\bar{\nu}_I - \omega_i} \quad (5.25)$$

und die nukleonischen Frequenzen ω_i hängen mit den Energien des statischen Einteilchen-Hamilton-Operators (5.12) und dem chemischen Potential μ über (2.14) zusammen. Die τ -Integrale in (5.19) sind infolgedessen über Integranden vom Typ

$$\exp\left(i \frac{2\pi}{\hbar\beta} (r + I - O) \tau_r\right) \quad (5.26)$$

auszuführen, wo r , I und O ganze Zahlen sind, und liefern die Bedingungen $r + I - O = 0$, $s - I + K = 0$, $t - K + M = 0$ und $u + O - M = 0$. Diese lassen sich zusammenfassen zur *Summenregel*

$$r + s + t + u = 0. \quad (5.27)$$

Ein analoger Ausdruck ergibt sich für die Berechnung des Koeffizienten beliebiger Ordnung in q_r .

Drückt man die Summationsindizes K , M und O durch $I = -\infty \dots \infty$ und $r, s, t \neq 0$ aus, so lässt sich der hier betrachtete Beitrag zu (5.19) mit (5.25) schreiben als

$$\frac{-|k|}{4! \beta} \sum_{i,k,m,o} F_{io} F_{ki} F_{mk} F_{om} \sum_{I=-\infty}^{\infty} g_i^{(0)}(i\bar{\nu}_I) g_o^{(0)}(i\bar{\nu}_I + i\nu_r) g_k^{(0)}(i\bar{\nu}_I - i\nu_s) g_m^{(0)}(i\bar{\nu}_I - i\nu_{s+t}). \quad (5.28)$$

Zur Auswertung der unendlichen Summe über I verwendet man die Technik der Frequenz-Summation [FW71]. Dazu ersetzt man $i\bar{\nu}_I$ durch die komplexe Zahl z und verwendet die Beobachtung, dass die komplexe Funktion $-\hbar\beta / (\exp(\hbar\beta z) + 1)$ an den Stellen $z = i\bar{\nu}_I$ Pole mit Residuum 1 besitzt. Der Residuensatz der Funktionentheorie erlaubt nun die Umformung der unendlichen Summe in ein Integral über die Kontur \mathcal{C} in der komplexen z -Ebene, die die Pole auf der imaginären Achse einschließt:

$$\begin{aligned} & \sum_{I=-\infty}^{\infty} g_i^{(0)}(i\bar{\nu}_I) g_o^{(0)}(i\bar{\nu}_I + i\nu_r) g_k^{(0)}(i\bar{\nu}_I - i\nu_s) g_m^{(0)}(i\bar{\nu}_I - i\nu_{s+t}) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} dz \frac{-\hbar\beta}{\exp(\hbar\beta z) + 1} g_i^{(0)}(z) g_o^{(0)}(z + i\nu_r) g_k^{(0)}(z - i\nu_s) g_m^{(0)}(z - i\nu_{s+t}) \end{aligned} \quad (5.29)$$

Der Integrand von (5.29) hat vier zusätzliche Pole an den Stellen $z_1 = \omega_i$, $z_2 = \omega_o - i\nu_r$, $z_3 = \omega_k + i\nu_s$ und $z_4 = \omega_m + i\nu_{s+t}$. Da der Integrand für $|z| \rightarrow \infty$ hinreichend schnell abfällt, tragen Kreisbögen im Unendlichen zu Wegintegralen in der komplexen Ebene nicht bei. Durch geeignete Deformation der Kontur \mathcal{C} (siehe Abb. 5.1) erhält man mit dem

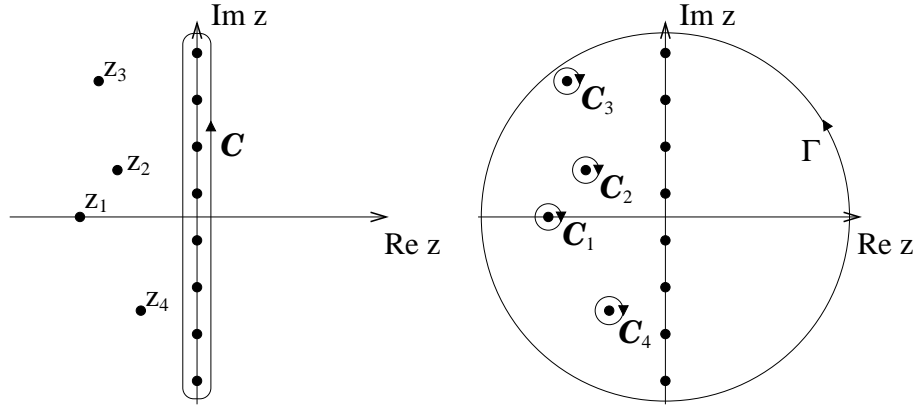


Abbildung 5.1: Die Integrationskonturen vor (links) und nach (rechts) der Deformation. Γ trägt nicht zum Integral bei.

Cauchy-Integralsatz den Gesamtbeitrag

$$\frac{|k|}{4!} \sum_{i,k,m,o} F_{io} F_{ki} F_{mk} F_{om} \times \left\{ n(\epsilon_i) g_o^{(0)}(\omega_i + i\nu_r) g_k^{(0)}(\omega_i - i\nu_s) g_m^{(0)}(\omega_i - i\nu_{s+t}) \right. \quad (5.30)$$

$$+ n(\epsilon_o) g_i^{(0)}(\omega_o - i\nu_r) g_k^{(0)}(\omega_o - i\nu_{r+s}) g_m^{(0)}(\omega_o - i\nu_{r+s+t})$$

$$+ n(\epsilon_k) g_i^{(0)}(\omega_k + i\nu_s) g_o^{(0)}(\omega_k + i\nu_{r+s}) g_m^{(0)}(\omega_k - i\nu_t)$$

$$\left. + n(\epsilon_m) g_i^{(0)}(\omega_m + i\nu_{s+t}) g_o^{(0)}(\omega_m + i\nu_{r+s+t}) g_k^{(0)}(\omega_m + i\nu_t) \right\} .$$

Man beachte, dass die Pole bei z_i , $i = 1 \dots 4$ nach der Deformation im *negativen Sinn* umlaufen werden. Dies liefert einen Vorzeichenwechsel. In (5.30) wurden die Fermi-Besetzungszahlen (2.13) und die Abkürzung (2.14) für die nukleonischen Anregungsenergien bzw. Frequenzen verwendet. Die Matrixelemente und die Anregungsenergien hängen von q_0 ab. Mit dem skizzierten Verfahren können durch Lösen der zum *statischen* Einteilchen-Hamilton-Operator (5.12) gehörigen Schrödinger-Gleichung alle zur Beschreibung des *dynamischen* Problems notwendigen Koeffizienten berechnet werden.

5.3 Standardnäherungen: SPA und PSPA

Bei hohen Temperaturen $T \rightarrow \infty$ bzw. $\beta \rightarrow 0$ reicht nach der im Abschnitt 5.1 angebotenen Überlegung mit einem Fehler der Ordnung β^2 ein einziger Imaginärzeit-Schritt zur Zerlegung von $\hat{U}(\hbar\beta)$ aus: $N = 1$. Der “dynamische Pfad” reduziert sich dabei auf seinen statischen Anteil: $q(\tau) \equiv q_0$. Diese Feststellung kann folgendermaßen interpretiert werden: q_0 repräsentiert die *thermischen* Fluktuationen großer Amplitude, über die bei der Berechnung der Zustandssumme durch Ausführen des q_0 -Integrals in (5.10) gemittelt

werden muss. Die q_r enthalten die *Quantenfluktuationen*, die in den Korrekturfaktor (5.15) eingehen und nur bei tiefen Temperaturen wichtig sind.

Diese Beobachtung war der Ausgangspunkt für das hier benutzte Näherungsschema, das ursprünglich zum Studium von “finite-size” Effekten in Supraleitern verwendet wurde [MSD72]. Die Näherung

$$\zeta^{\text{SPA}}(\beta, q_0) \equiv 1, \quad (5.31)$$

in der sich der Integrand von (5.10) auf $\exp[-\beta\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)]$ reduziert, ist unter dem Namen “Static Path Approximation” (SPA) bekannt und stellt den *klassischen Grenzfall* dar. In der Kernphysik wurde die SPA in [AZ84, LAB88, ABLP88, LAB88, LB89] ausgiebig untersucht und gefunden, dass sie bei endlicher Temperatur sowohl der Hartree-Näherung als auch der BCS-Theorie überlegen ist. Im Kapitel 6 wird am Beispiel des Lipkin-Meshkov-Glick-Modells (LMGM) [LMG65] nochmals demonstriert, dass die SPA für hohe Temperaturen gute Resultate liefert.

Falls alle Koeffizienten $\lambda_{rs}(\beta, q_0)$ einen großen positiven Wert haben, kann die Entwicklung (5.16) nach dem Glied zweiter Ordnung abgebrochen werden:

$$s_E^{\text{PSPA}}(\beta, q_0) = \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r,s \neq 0} \lambda_{rs}(\beta, q_0) q_r q_s \quad (5.32)$$

Für die Koeffizienten erhält man aus (B.1) den Zusammenhang

$$\lambda_{rs}(\beta, q_0) = \frac{1}{2} (1 + k\chi(i\nu_r)) \delta_{r,-s} = \frac{1}{2} \frac{1}{1 - k\chi_{\text{coll}}(i\nu_r)} \delta_{r,-s} = \frac{1}{2} \lambda_r(\beta, q_0) \delta_{r,-s} \quad (5.33)$$

mit der FF-Response-Funktion $\chi(z)$. Für die zweite Identität wurde hier die allgemeine Beziehung (2.22) benutzt. Die Relation (5.33) kann im IPM mit (2.16) explizit geschrieben werden als

$$\lambda_r(\beta, q_0) = \frac{\prod_{\mu} (\nu_r^2 + \varpi_{\mu}^2(\beta, q_0))}{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2(q_0))}. \quad (5.34)$$

Der Strich am Produkt $\prod'_{k>l}$ symbolisiert, dass Anregungen mit $\omega_{kl} = 0$ auszunehmen sind. Später wird die gleiche Symbolik auch für Summen verwendet. Die Identität (5.34) folgt aus einer Entwicklung der Funktion $1 + k\chi(\omega)$ nach Polen ω_{kl} und Nullstellen ϖ_{μ} [AA97]. Die nukleonischen Frequenzen sind durch (2.14) gegeben und die lokalen RPA-Frequenzen $\varpi_{\mu}(\beta, q_0)$ sind die Lösungen der Säkulargleichung (2.21). Unter der Bedingung, dass alle λ_{rs} groß genug sind, um höhere Terme in (5.16) weglassen zu dürfen, können die mit (5.34) in (5.15) resultierenden Gauss’schen q_r -Integrale leicht ausgeführt werden und man erhält für den Korrekturfaktor

$$\zeta^{\text{PSPA}}(\beta, q_0) = \prod_{r>0} \frac{1}{\lambda_r(\beta, q_0)} = \prod_{r>0} \frac{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2(q_0))}{\prod_{\mu} (\nu_r^2 + \varpi_{\mu}^2(\beta, q_0))}. \quad (5.35)$$

Diese “SPA+RPA” [PBB91, AA98, ASDS98], “Perturbed Static Path Approximation” (PSPA) [AA97] oder “Correlated Static Path Approximation” (CSPA) [RC97, RR98] genannte Näherung berücksichtigt *Quantenfluktuationen* auf dem Niveau lokaler RPA-Moden, während die *thermischen* Fluktuationen großer Amplitude mit dem q_0 -Integral in (5.10) voll mitgenommen werden. Bei allen Lösungen von (2.21), für die gilt $\varpi_\mu^2 \approx \omega_{kl}^2$, tragen die entsprechenden Faktoren zu ζ^{PSPA} kaum bei. Die Quantenkorrekturen (5.35) werden folglich von den tatsächlich *kollektiven* Moden ϖ_μ dominiert, die von den nukleonischen Moden ω_{kl} aufgrund der Wechselwirkung weit weggeschoben sind.

An dieser Stelle sollte angemerkt werden, dass auch [AA97] in ihrer Formel (91) Ausdrücke wie die geschweifte Klammer in (5.30) finden, obwohl dort die Euklidische Wirkung in der Form (5.32) benutzt wird. Die Ursache liegt darin, dass dort Stärkekfunktionen berechnet werden, die angeben, wie sich das *Gesamtsystem* (5.2) unter dem Einfluss einer (real-)zeitabhängigen tatsächlich äußeren Störung verhält. Zu diesem Zweck müssen imaginärzeit-geordnete Erwartungswerte $\langle \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{U}}_q \hat{D}^\dagger(\tau) \hat{D}(0) \rangle_{q_0}$ mit $\hat{D} = \sum_{ik} D_{ik} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k$ berechnet werden. Obwohl der (Imaginärzeit-)Entwicklungsoperator $\hat{\mathcal{U}}_q$ dazu in PSPA nur bis zur *zweiten* Ordnung in den q_r entwickelt wird, treten dabei Terme vierter Ordnung in $\hat{a}_i^\dagger(\tau) \hat{a}_k(\tau)$ und folglich q_r auf.

Mit abnehmender Temperatur ist die für die PSPA notwendige Bedingung, dass λ_r für alle $r > 0$ eine große positive Zahl ist, wegen der Faktoren $\nu_r^2 + \varpi_\mu^2$ in (5.34) mit $\nu_r \sim Tr$ an Stellen mit *negativem* ϖ_μ^2 jedoch immer schlechter erfüllt. Schließlich divergieren für $\nu_1^2 + \text{Min}_{q_0} \varpi_\mu^2(q_0) = 0$ die q_1 -Integrale in (5.15). Die Bedingung, dass das *nicht* geschieht, lässt sich in eine Bedingung an die Temperatur übersetzen [Rum00, RH01]:

$$T > T_0 = \text{Max}_{q_0} \frac{\hbar |\varpi_\mu(q_0)|}{2\pi} \quad (5.36)$$

Aus der Theorie des “dissipativen Tunnelns”, das in [GW84, GOW87] im Rahmen des Caldeira-Leggett-Modells (CLM) behandelt wird und wo eine ebensolche Divergenz auftritt, wurde für die Temperatur T_0 der Name “*Crossover-Temperatur*” übernommen. Der physikalische Hintergrund von T_0 ist in beiden Fällen derselbe: Während im Bereich $T > T_0$ die kollektive Dynamik vornehmlich aufgrund von thermischer Aktivierung stattfindet, werden im Fall $T < T_0$ *Quanteneffekte dominant* und die Amplitude des Hilfsfelds $q(\tau)$ wird so groß, dass für (5.16) die Näherung zweiter Ordnung versagt. Im Fall von metastabilen Systemen mit Barriere in \mathcal{F}^{SPA} trägt hier das quantenmechanische Tunneln maßgeblich zur Zerfallsrate bei (siehe Kapitel 8).

Bei ultrakleinen supraleitenden Aluminiumclustern ist der typische Abstand der Einteilchen-Niveaus von der gleichen Größenordnung wie die Energielücke im unendlich ausgedehnten Aluminium $\Delta_{\text{bulk}} \approx 180 \mu\text{eV}$. Experimente, die bei einer Temperatur von $T = 50 \text{ mK} \approx 4 \mu\text{eV}$ durchgeführt wurden [RBT95, BRT96, RBT97] und bei denen individuelle Einteilchen-Niveaus spektroskopiert werden konnten, wurden mit einer der BCS ähnlichen Theorie mit $T = 0$ interpretiert [BDRT97, BD98, BD99]. Bei endlicher Temperatur beobachtet man bei diesen Systemen ein Auswaschen des scharfen Phasenübergangs von

der normalleitenden zur supraleitenden Phase aufgrund von *“finite-size” Effekten*. Im unendlich ausgedehnten Aluminium erfolgt dieser Übergang bei $T_{\text{crit}} = 1.18 \text{ K} \approx 100 \mu\text{eV}$. Zur theoretischen Behandlung dieser Eigenschaft sowie von *“odd-even” Effekten* wurde sowohl die SPA [RZ00] als auch die PSPA angewendet [RZC99, CR00, RC01]. Die *“Crossover”-Temperatur* $T_0 \approx 60 \mu\text{eV}$ liegt allerdings nicht wesentlich unterhalb der kritischen Temperatur T_{crit} . Bereits in einem Bereich oberhalb von T_0 arbeitet die PSPA nicht mehr verlässlich (siehe Kapitel 6). Zum Studium des Phasenübergangs könnte folglich eine Methode zur Berechnung der Zustandssumme hilfreich sein, die im *“Crossover”-Bereich* $T \approx T_0$ noch gute Ergebnisse liefert.

Auch bei der Behandlung thermisch angeregter mittelschwerer Kerne mit Quadrupol-Quadrupol-Wechselwirkung sind tiefe Temperaturen $T \lesssim 0.25 \text{ MeV}$ [AA98] bzw. $T \lesssim 0.6 \text{ MeV}$ [ASDS98] mit der PSPA nicht zugänglich. Insbesondere wenn man bei Verwenden der Quadrupol-plus-Pairing-Wechselwirkung an einer Untersuchung des Phasenübergangs zu gepaarten Zuständen interessiert ist, der bei Temperaturen $T_{\text{crit}} \lesssim 0.5 \text{ MeV}$ stattfindet, ist die PSPA daher nicht ausreichend. In [Pud93] wurde dieser Bereich aus der Untersuchung ausgeklammert. Auch bei kernphysikalischen Anwendungen ist also eine Theorie wünschenswert, die im Bereich und unterhalb der *“Crossover”-Temperatur* noch benutzt werden kann. In den folgenden Abschnitten werden daher neue Methoden entwickelt, die auch bei $T < T_0$ noch gute Resultate liefern.

5.4 Verbesserungen im *“Crossover”-Bereich*

Um den unphysikalischen Zusammenbruch an der *“Crossover”-Temperatur* T_0 , der alleine durch das Versagen der harmonischen Näherung zustande kommt, genauer untersuchen zu können, ist es sinnvoll, die Gauß’schen Fluktuationen zu betrachten, die in (5.35) berücksichtigt sind. Ihre typische Breite ist durch

$$\Delta_r(\beta, q_0) = \sqrt{\frac{|k|}{2\beta\lambda_r(\beta, q_0)}} = \sqrt{\frac{|k|T}{2\lambda_r(\beta, q_0)}} \quad (5.37)$$

gegeben. Wenn die Temperatur von oben gegen T_0 strebt, verschwindet λ_1 , während alle anderen $\lambda_{r>1}$ positiv bleiben. Für die Fluktuationen bedeutet dies

$$\Delta_1 \longrightarrow \infty, \quad \text{während} \quad 0 < \Delta_{r>1} < \infty \quad (5.38)$$

Infolgedessen ist bei Temperaturen $T \approx T_0$ die harmonische Näherung für die q_1 -Mode nicht mehr gerechtfertigt, während sie für die $q_{r>1}$ -Moden noch benutzt werden kann. Diese Beobachtung wird im Folgenden dazu benutzt werden, durch Berücksichtigung von Anharmonizitäten in q_1 und q_{-1} im Crossover-Bereich $T \approx T_0$ verbesserte Ergebnisse zu erreichen und den Zusammenbruch der Näherung zur niedrigeren Temperatur $T_0/2$ zu verschieben [RA02]. Das Vorgehen ähnelt dabei stark dem in [GW84, GOW87] zur Behandlung der

Zerfallsrate metastabiler Zustände im “Crossover”-Bereich entwickelten. Startpunkt der Ableitung der neuen Näherung ist folgende, durch obige Beobachtung über die Größe der Fluktuationen und die Summenregel (5.27) legitimierte Vereinfachung der Entwicklung (5.16):

$$s_E^{\text{ePSPA}} = \frac{\hbar\beta}{|k|} \left(\lambda_1 q_1 q_{-1} + 3\rho_{1,1,-2} q_1^2 q_{-2} + 3\rho_{-1,-1,2} q_{-1}^2 q_2 + 6\sigma_{1,1,-1,-1} q_1^2 q_{-1}^2 + \sum_{r>1} \lambda_r q_r q_{-r} \right) \quad (5.39)$$

Weitere Terme zu denen q_1 und q_{-1} beitragen, wie z.B. $q_1 q_s q_{-s-1}$ oder $q_1 q_{-1} q_s q_{-s}$ mit $s > 1$, sind im Rahmen einer semiklassischen Näherung vernachlässigbar [GW84, GOW87].

Unter der Bedingung $\lambda_3 > 0$ sind die $q_{r>2}$ -Integrale in (5.15) mit (5.39) nach wie vor vom Gauß’schen Typ und bedürfen keiner weiteren Kommentierung. Sie tragen wie in der gewöhnlichen PSPA mit Faktoren $\lambda_{r>2}^{-1}$ zum “dynamischen” Korrekturfaktor bei. Die Integration über q_2 und $q_{-2} = q_2^*$ können analytisch ausgeführt werden, nachdem $q_2' = \text{Re } q_2$ und $q_2'' = \text{Im } q_2$ als neue Integrationsvariablen eingeführt und der relevante Teil der Wirkung umgeschrieben worden ist in

$$a = \frac{\hbar\beta}{|k|} \left(\lambda_2 (q_2')^2 + 3 (\rho_{-1,-1,2} q_{-1}^2 + \rho_{1,1,-2} q_1^2) q_2' + \lambda_2 (q_2'')^2 + 3i (\rho_{-1,-1,2} q_{-1}^2 - \rho_{1,1,-2} q_1^2) q_2'' \right). \quad (5.40)$$

Die entsprechenden Integrale können durch quadratische Ergänzung leicht auf Gauß-Integrale zurückgeführt und gelöst werden:

$$\frac{\beta}{\pi|k|} \int dq_2' dq_2'' \exp[-a/\hbar] = \frac{1}{\lambda_2} \exp \left[\frac{\beta}{|k|} \frac{9\rho_{-1,-1,2}\rho_{1,1,-2}}{\lambda_2} q_1^2 q_{-1}^2 \right] \quad (5.41)$$

Der Integrand der verbleibenden q_1 -Integrale in (5.15) kann mit der Definition

$$B = 6\sigma_{1,1,-1,-1} - \frac{9\rho_{-1,-1,2}\rho_{1,1,-2}}{\lambda_2} \quad (5.42)$$

geschrieben werden als

$$\exp \left[-\frac{\beta}{|k|} (\lambda_1 q_1 q_{-1} + B q_1^2 q_{-1}^2) \right]. \quad (5.43)$$

Hier bietet sich die Verwendung von Polarkoordinaten r und ϕ statt q_1 und $q_{-1} = q_1^*$ an. Das Phasenintegral kann ausgeführt werden und mit einer neuerlichen Substitution $z = r^2$ reduzieren sich die q_1 -Integrale auf

$$\begin{aligned} & \frac{\beta}{\pi|k|} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dr r \exp \left[-\frac{\beta}{|k|} (\lambda_1 r^2 + B r^4) \right] \\ &= \frac{\beta}{|k|} \int_0^\infty dz \exp \left[-\frac{\beta}{|k|} (\lambda_1 z + B z^2) \right] \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda_1} x \exp[x^2] \text{erfc}[x]. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Um die letzte Identität zu erhalten ergänzt man quadratisch, substituiert

$$u = \sqrt{\frac{\beta B}{|k|}} z + x \quad \text{mit} \quad x = \sqrt{\frac{\beta}{4|k|B}} \lambda_1 \quad (5.45)$$

und benutzt die Definition der Fehlerfunktion (D.3). Man beachte, dass die Umformungen nur für $B(\beta, q_0) > 0$ sinnvoll sind. Glücklicherweise ist dies in den im Kapitel 6 untersuchten Situationen der Fall.

Zusammen mit den Beiträgen der $q_{r>2}$ -Integrale und von (5.41) ergibt sich für den “dynamischen” Korrekturfaktor (5.15) in “erweiterter PSPA” unter der Voraussetzung $B(\beta, q_0) > 0$ mit positivem x/λ_1 :

$$\zeta^{\text{ePSPA}}(\beta, q_0) = \sqrt{\pi} \frac{x(\beta, q_0)}{\lambda_1(\beta, q_0)} \exp [x^2(\beta, q_0)] \operatorname{erfc} [x(\beta, q_0)] \prod_{r>1} \frac{1}{\lambda_r(\beta, q_0)} \quad (5.46)$$

In Fällen, wo die Fluktuationen Δ_1 der q_1 -Mode klein genug sind, dass man in (5.16) die Terme dritter und vierter Ordnung vernachlässigen kann, d.h. $x \gg 1$, reduziert sich (5.46) unter Zuhilfenahme von (D.4) auf die gewöhnliche PSPA (5.35).

5.5 Eine Näherung für sehr tiefe Temperaturen

Im letzten Abschnitt wurde eine Erweiterung der PSPA vorgeschlagen, die im “Crossover”-Bereich $\beta \approx \beta_0$ anwendbar ist, aber bei $\beta = 2\beta_0$ wegen $\Delta_2 \rightarrow \infty$ ebenfalls zusammenbricht. Ein Kriterium für die Anwendbarkeit der ePSPA ist, dass die Amplitude der q_2 -Mode hinreichend klein bleibt, dass sie noch in harmonischer Näherung behandelt werden kann. Dies lässt sich in der Bedingung $\lambda_2 > 0$ zusammenfassen. Eine Behandlung der q_2 -Mode analog zum Vorgehen im Abschnitt 5.4 müsste bei Temperaturen, wo q_1 und q_2 große Amplitude haben, in der Entwicklung (5.39) auch Terme wie z.B. $q_1 q_2 q_{-3}$ und $q_1 q_{-1} q_2 q_{-2}$ berücksichtigen. Dies würde das Vorgehen komplizieren und nur Erfolg versprechen bis bei $\beta = 3\beta_0$ gilt: $\lambda_3 = 0$. Für sehr tiefe Temperaturen $\beta \gg \beta_0$ ist eine solche schrittweise Erweiterung der PSPA praktisch nicht durchführbar. Im Grenzfall $\beta \rightarrow \infty$ wird die Amplitude *aller* Moden q_r groß und eine semiklassische Behandlung der Zustandssumme $\mathcal{Z}(\beta)$ würde vollständig versagen.

Andererseits wird das Integral (5.10) zur Berechnung der Zustandssumme im Fall großer β von den Extrema der freien Energie $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ dominiert, sofern angenommen werden kann, dass der Korrekturfaktor $\zeta(\beta, q_0)$ verglichen mit der Exponentialfunktion schwach veränderlich ist (Sattelpunktsnäherung). Falls desweiteren die zu den Maxima q_j^{max} und Minima q_i^{min} von \mathcal{F}^{SPA} gehörenden Barrierenhöhen $B_{ij} = \mathcal{F}^{\text{SPA}}(q_j^{\text{max}}) - \mathcal{F}^{\text{SPA}}(q_i^{\text{min}})$ verglichen mit der Temperatur groß sind $\beta B_{ij} \gg 1$, tragen bei großen β im Wesentlichen nur

die Minima zur Zustandssumme bei. Im Fall der ePSPA lautet somit eine Abschätzung der Zustandssumme für tiefe Temperaturen [RA02]:

$$\mathcal{Z}^{\text{ePSPA}}(\beta \gg \beta_0) \approx \sum_i \frac{\exp[-\beta \mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_i^{\text{min}})]}{\sqrt{|k| C^{\text{SPA}}(\beta, q_i^{\text{min}})}} \zeta^{\text{ePSPA}}(\beta, q_i^{\text{min}}) \quad (5.47)$$

$C^{\text{SPA}} = \partial^2 \mathcal{F}^{\text{SPA}} / \partial q_0^2$ ist hierbei die Steifheit von \mathcal{F}^{SPA} .

Die für (5.47) notwendige Voraussetzung, dass Variationen des Korrekturfaktors gegenüber denjenigen der Exponentialfunktion vernachlässigbar sind, ist an Stellen, an denen $\zeta^{\text{ePSPA}}(\beta, q_0)$ divergiert, sicherlich nicht erfüllt. Solche unphysikalischen, da nur durch die harmonische Näherung hervorgerufene Divergenzen treten bei tiefen Temperaturen auf, wenn das Quadrat der RPA-Frequenzen ϖ_μ^2 hinreichend negativ ist. Das ist nur in einem Bereich um die Maxima von \mathcal{F}^{SPA} der Fall. Wenn diese jedoch mit $\beta B_{ij} \gg 1$ energetisch ausreichend von den Minima separiert sind, können die problematischen Bereiche im Integral (5.10) vernachlässigt werden. Eine weitere Näherung der Zustandssumme kann daher darin bestehen, den Integrationsbereich an den Maxima entsprechend einzuschränken. Am kompaktesten lässt sich dies mathematisch durch folgende Definition des Korrekturfaktors mit der Stufenfunktion Θ formulieren [RA02]:

$$\zeta^{\text{LTA}}(\beta, q_0) = \Theta[\lambda_1(\beta, q_0)] \zeta^{\text{ePSPA}}(\beta, q_0) \quad (5.48)$$

Der Integrationsbereich bleibt dann $q_0 = -\infty \dots \infty$. Diese Näherung wird im Folgenden als “*Low Temperature Approximation*” (LTA) bezeichnet. Formal reduziert sich die LTA für $\beta < \beta_0$ auf die ePSPA, da dort $\lambda_1 > 0$ stets erfüllt ist. Für $\beta \gg \beta_0$ erhält man als Grenzfall die Sattelpunktsnäherung (5.47).

Im Limes extrem tiefer Temperaturen $\beta \rightarrow \infty$ stellt auch die LTA keine vernünftige Näherung mehr dar. In diesem Fall ist ein Vorgehen, das im Ausdruck (5.10) vom “statischen” Hochtemperatur-Limes $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ ausgeht und *kleine* “dynamische” Korrekturen $\zeta(\beta, q_0)$ berücksichtigt, nicht mehr gerechtfertigt. Statt einer Entwicklung des Funktionalintegrals (5.4) um statische Pfade q_0 , muss vielmehr um diejenigen *dynamischen* Pfade $q_\tau = q(\tau)$ entwickelt werden, die die Wirkung $S_E[q(\tau)]$ minimieren [NO88]. Im Abschnitt 5.7 ist dieses Vorgehen angedeutet.

5.6 Ein Variationsverfahren

Zur Berechnung der quantenmechanischen Zustandssumme eines Teilchens der Masse M im eindimensionalen Potential $V(q)$ mit der Euklidischen Wirkung

$$S_E[q(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{q}^2(\tau) + V(q(\tau)) \right] \quad (5.49)$$

wurde in [GT85, GT86, FK86] ein Verfahren entwickelt, das dem im Abschnitt 5.1 vorgestellten Herangehen ähnelt: Auch dort wird das Pfadintegral

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp[-S_E[q(\tau)]/\hbar] \quad (5.50)$$

für die quantenmechanische Zustandssumme (man beachte, dass das Integralmaß $\mathcal{D}q(\tau)$ hier anders definiert ist als in (5.9)) auf ein gewöhnliches Integral über die statischen Pfade q_0

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta) &= \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int dq_0 \exp(-\beta V(q_0)) \zeta(\beta, q_0) \\ &= \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int dq_0 \exp(-\beta V^{\text{eff}}(q_0)) \end{aligned} \quad (5.51)$$

zurückgeführt, in dessen Integrand im Exponenten ein *temperaturabhängiges* “effektives klassisches Potential” $V^{\text{eff}}(\beta, q_0)$ eingeht, das *Quanteneffekte* enthält. Die Namensgebung [FK86] trägt der Tatsache Rechnung, dass die zweite Identität von (5.51) die gleiche Form hat wie das Zustandssummenintegral eines klassischen Systems nach Ausführen der Integration über die Impulse. Die Potentiale $V(q_0)$ und $V^{\text{eff}}(\beta, q_0)$ spielen in (5.51) die gleiche Rolle, wie $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ und $\mathcal{F}^{\text{eff}}(\beta, q_0)$ in (5.10). Die Wirkung (5.49) wird zur Berechnung von ζ bzw. V^{eff} ähnlich wie (5.16) nach Störungen der statischen Pfade q_0 entwickelt. Es werden lokale Oszillatoren eingeführt, deren Frequenzen $\Omega(\beta, q_0)$ aber im Unterschied zur PSPA aus einem *Variationsverfahren* so bestimmt werden, dass die zur Zustandssumme \mathcal{Z} gehörige freie Energie

$$\mathcal{F}(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}(\beta) \quad (5.52)$$

minimiert bzw. \mathcal{Z} selbst maximiert wird.

Es gibt zahlreiche Weiterentwicklungen des Feynman-Kleinert-Variationsverfahrens (FKV) aus [FK86]. In [Kle86] wird es benutzt, um die Teilchendichte in einem Potential $V(q)$ zu approximieren. In [Kle92] wurde die Qualität des ursprünglichen FKV im Tieftemperaturbereich erheblich verbessert, indem zunächst die Zustandssumme des lokalen Näherungsozillators in ihren spektralen Gehalt $\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-\hbar\beta\Omega(\beta, q_0)(n + 1/2)]$ entwickelt und das Variationsverfahren auf jeden der Summanden einzeln angewendet wird. Zumindest für den quartisch anharmonischen Oszillator können damit auch hochangeregte Eigenzustände mit hoher Präzision bestimmt werden. Zusammenfassende Darstellungen des Variationsverfahrens für eindimensionale Probleme (5.49) findet man in [Kle90] und [CGT⁺95].

In diesem Abschnitt wird zur Berechnung der Zustandssumme (5.10) eine Strategie verfolgt, die die wesentlichen Ideen der ursprünglichen Version dieses Variationsverfahrens übernimmt und auf wechselwirkende Vielteilchen-Systeme anwendet [RH04b]. Dabei wird nicht wie in [YKNN00] mit dem Funktionalintegral für kohärente Zustände und Einteilchen-Green-Funktionen gearbeitet, sondern direkt auf der Entwicklung (5.16) der Euklidischen

Wirkung aufgebaut. Eine spätere Weiterentwicklung der Methodik in Richtung von [Kle92] angewandt auf wechselwirkende Vielteilchen-Systeme ist denkbar. Das Funktionalintegral für den dynamischen Korrekturfaktor (5.15) kann in folgender Weise umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned}\zeta(\beta, q_0) &= \int \mathcal{D}'q \exp[-s_\Omega^{q_0}/\hbar] \exp[-(s_E - s_\Omega^{q_0})/\hbar] \\ &= \zeta_\Omega^{q_0} \langle \exp[-(s_E - s_\Omega^{q_0})/\hbar] \rangle_\Omega^{q_0}\end{aligned}\quad (5.53)$$

In dieser Umformung wurde eine *Referenz-Wirkung* $s_\Omega^{q_0}$ eingeführt, die so gewählt wird, dass das Funktionalintegral für den Normierungsfaktor

$$\zeta_\Omega^{q_0} = \int \mathcal{D}'q \exp[-s_\Omega^{q_0}/\hbar] \quad (5.54)$$

exakt ausgewertet werden kann. Der Erwartungswert in der zweiten Zeile der exakten Umformung (5.53) ist in Bezug auf diese Referenz-Wirkung definiert. Da es sich bei der Zustandssumme um eine Größe des thermodynamischen Gleichgewichts handelt, kann zu ihrer näherungsweisen Berechnung das Prinzip ausgenutzt werden, dass die freie Energie (5.52) minimiert und infolgedessen die Zustandssumme maximiert werden muss. Letztlich soll dazu die *Jensen-Peierls-Ungleichung* $\langle e^{-x} \rangle \geq e^{-\langle x \rangle}$ benutzt werden, die aus der Konvexität der Exponentialfunktion folgt und leicht auf die hier verwendete Mittelwertbildung übertragen werden kann [Kle90]:

$$\langle \exp[-(s_E - s_\Omega^{q_0})/\hbar] \rangle_\Omega^{q_0} \geq \exp[-\langle s_E - s_\Omega^{q_0} \rangle_\Omega^{q_0}/\hbar] \quad (5.55)$$

Um die rechte Seite zu maximieren, müssen die in $s_\Omega^{q_0}$ eingehenden Parameter variiert werden. Eine geeignete Form für die Referenz-Wirkung, die die Forderung nach exakter Berechenbarkeit der Normierungsfaktors erfüllt, erhält man aus (5.32) mit (5.34) indem man die lokalen RPA-Frequenzen $\varpi_\mu(\beta, q_0)$ durch *freie Variationsparameter* $\Omega_\mu(\beta, q_0)$ ersetzt:

$$\begin{aligned}s_E^{\text{PSPA}} &= \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r>0} \lambda_r |q_r|^2 = \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r>0} \frac{\prod_\mu (\nu_r^2 + \varpi_\mu^2)}{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)} |q_r|^2 \\ \longrightarrow s_\Omega^{q_0} &= \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r>0} \frac{\prod_\mu (\nu_r^2 + \Omega_\mu^2)}{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)} |q_r|^2\end{aligned}\quad (5.56)$$

Der Normierungsfaktor (5.54) ergibt sich damit aus dem PSPA-Korrekturfaktor (5.35) zu

$$\zeta_\Omega^{q_0} = \prod_{r>0} \frac{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2(q_0))}{\prod_\mu (\nu_r^2 + \Omega_\mu^2(\beta, q_0))}. \quad (5.57)$$

Wie später an einem Beispiel gezeigt wird (vgl. Abb. 6.5), treten jedoch für das Variationsverfahren bei der Berechnung von (5.57) selbst an Instabilitäten *keine Konvergenzprobleme*

mehr auf. Die Ursache liegt darin, dass die durch Minimierung der freien Energie gefundene Frequenz Ω_μ für alle β und q_0 so beschaffen ist, dass gilt $\nu_1^2 + \Omega_\mu^2 > 0$.

Um die rechte Seite von (5.55) zu berechnen, zerlegt man die Euklidische Wirkung (5.16) in $s_E = s_E^{\text{PSPA}} + \delta s_E$ und wertet die Beiträge $\langle s_E^{\text{PSPA}} - s_\Omega^{q_0} \rangle_\Omega^{q_0}$ und $\langle \delta s_E \rangle_\Omega^{q_0}$ getrennt aus. Der Beitrag zweiter Ordnung in q_r wird mit der Definition

$$\Pi_r = \prod_\mu (\nu_r^2 + \varpi_\mu^2) - \prod_\mu (\nu_r^2 + \Omega_\mu^2) \quad (5.58)$$

zu (siehe Anhang D.1.1)

$$\langle s_E^{\text{PSPA}} - s_\Omega^{q_0} \rangle_\Omega^{q_0} = \hbar \sum_{r>0} \frac{\Pi_r}{\prod_\mu (\nu_r^2 + \Omega_\mu^2)}. \quad (5.59)$$

Man beachte, dass die Summe konvergiert, da der Nenner zwei Ordnungen höher in $\nu_r = (2\pi/\hbar\beta)r$ ist als der Zähler. Um $\langle \delta s_E \rangle_\Omega^{q_0}$ berechnen zu können, muss man im Prinzip die Entwicklungskoeffizienten in allen Ordnungen kennen. In der ursprünglichen Version des Variationsverfahrens für die Euklidische Wirkung (5.49) ist dies trivial erfüllt: Die Koeffizienten sind einfach durch diejenigen der Taylor-Reihe des Potentials $V(q)$ gegeben. In der hier entwickelten Verallgemeinerung müssen hingegen in jeder Ordnung komplizierte Ausdrücke der Art (5.17) bis (5.19) berechnet werden. Aufgrund von Symmetrieüberlegungen verschwinden allerdings alle Beiträge zu $\langle \delta s_E \rangle_\Omega^{q_0}$, die mindestens einen in q_r ungeraden Term enthalten. Daher tragen Terme ungerader Ordnung in q_r generell nicht bei. Im Folgenden soll die Diskussion auf die Entwicklung vierter Ordnung (5.16) beschränkt und untersucht werden, wie weit man mit dieser Vereinfachung kommt. Im Anhang D.1.2 wird gezeigt, dass der Beitrag vierter Ordnung geschrieben werden kann als

$$\langle \delta s_E^{(4)} \rangle_\Omega^{q_0} = \frac{\hbar|k|}{\beta} \sum_{r,s>0} \sigma_{rs-r-s} \frac{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)}{\prod_\mu (\nu_r^2 + \Omega_\mu^2)} \frac{\prod'_{k>l} (\nu_s^2 + \omega_{kl}^2)}{\prod_\mu (\nu_s^2 + \Omega_\mu^2)}. \quad (5.60)$$

Für die Konvergenz der Summe ist das Verhalten der Koeffizienten σ_{rs-r-s} für große r und s entscheidend. Die im Abschnitt 5.2 hergeleitete Form von σ_{rstu} (siehe (5.30) und (5.25)) stellt sicher, dass der Koeffizient für große r oder s hinreichend klein wird, um Konvergenz zu garantieren.

Nun kann man unter Verwendung der Ungleichung (5.55) eine obere Grenze für die in (5.14) definierte effektive freie Energie finden:

$$\mathcal{F}^{\text{eff}}(\beta, q_0) \leq \mathcal{F}^{\text{var}}(\beta, q_0) = \mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0) - \frac{1}{\beta} \ln \zeta^{\text{var}}(\beta, q_0) \quad (5.61)$$

Hier wurde die Abkürzung

$$\begin{aligned}
\ln \zeta^{\text{var}}(\beta, q_0) &= \ln \zeta_{\Omega}^{q_0} - \frac{1}{\hbar} \langle s_{\text{E}}^{\text{PSPA}} - s_{\Omega}^{q_0} \rangle_{\Omega}^{q_0} - \frac{1}{\hbar} \langle \delta s_{\text{E}}^{(4)} \rangle_{\Omega}^{q_0} \\
&= \sum_{r>0} \ln \frac{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)}{\prod_{\mu} (\nu_r^2 + \Omega_{\mu}^2)} - \sum_{r>0} \frac{\Pi_r}{\prod_{\mu} (\nu_r^2 + \Omega_{\mu}^2)} \\
&\quad - \frac{|k|}{\beta} \sum_{r,s>0} \sigma_{rs-r-s} \frac{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)}{\prod_{\mu} (\nu_r^2 + \Omega_{\mu}^2)} \frac{\prod'_{k>l} (\nu_s^2 + \omega_{kl}^2)}{\prod_{\mu} (\nu_s^2 + \Omega_{\mu}^2)}.
\end{aligned} \tag{5.62}$$

verwendet. Um $\mathcal{F}^{\text{eff}}(\beta, q_0)$ zu optimieren, berechnet man $\mathcal{F}^{\text{var}}(\beta, q_0)$ und sucht das *Minimum* bezüglich der Variationsparameter $\Omega_{\mu}^2(\beta, q_0)$. Dieses Minimum stellt eine Näherung an die freie Energie des nukleonischen Systems dar, wo sich die Nukleonen in einem Potential bewegen, welches *im Mittel* durch die statische kollektive Koordinate q_0 beschrieben wird.

Mit (5.61) und (5.62) ist es in dieser Arbeit geglückt, die Approximation der Zustandssumme eines wechselwirkenden Vielteilchen-Systems auf ein Optimierungsproblem zurückzuführen. Allerdings ist die konkrete Durchführung des vorgeschlagenen Verfahrens in Fällen schwierig, wenn die Zahl der Lösungen ϖ_{μ} der Säkulargleichung (2.21) nicht klein ist. Für diesen Fall wird im Kapitel 7 ein Zugang vorgeschlagen, der gleichzeitig die Berücksichtigung dissipativer Effekte erlaubt.

5.7 Ausblick: Dynamik großer Amplitude

Bevor im Kapitel 6 die Güte der in den Abschnitten 5.3 bis 5.6 vorgestellten Näherungen getestet wird, müssen hier noch einige Bemerkungen zu einem möglichen Vorgehen bei extrem tiefen Temperaturen gemacht werden. Im Allgemeinen gibt es dort *dynamische* Pfade $q_{\tau} = q(\tau)$, deren Wirkung *kleiner* ist als die des statischen Pfades mit der kleinsten Wirkung. Folglich sind diese Pfade in einer brauchbaren Näherung als dominante Beiträge *unbedingt zu berücksichtigen*. Wie im Abschnitt 8.3 erläutert wird, sind diese dynamischen Pfade im Bereich $T < T_0$ auch essentiell für die Berechnung der Zerfallsrate metastabiler Systeme.

Das in dieser Arbeit verfolgte Näherungsschema zur Berechnung der Zustandssumme eines wechselwirkenden Vielteilchen-Systems nimmt jedoch den Hochtemperatur-Limes als Ausgangspunkt und betrachtet Imaginärzeit-Dynamik immer als *Störungen*, die in unterschiedlichen harmonischen Näherungen behandelt werden. Im Grenzfall $T \rightarrow 0$ ist nicht mehr zu erwarten, dass diese Korrekturen zum Hochtemperatur-Grenzfall $T \rightarrow \infty$ noch sinnvoll sind. Die Dynamik hat bei $T \rightarrow 0$ große Amplitude und die *volle Nichtlinearität muss berücksichtigt werden*.

Dazu kann man wieder vom exakten Funktionalintegral-Ausdruck (5.4) starten. Als Alternative zur numerischen Auswertung – beispielsweise mit Monte-Carlo-Simulationen [Sch81, LJKO93] – bietet sich eine Entwicklung um denjenigen *imaginärzeit-abhängigen* Pfad q_τ an, der die Euklidische Wirkung (5.7) minimiert [KL81]. Durch Variation der Euklidischen Wirkung $\delta S_E[q(\tau)] = 0$ ergibt sich als Bestimmungsgleichung für q_τ die Erweiterung der TDHF-Gleichung auf imaginäre Zeit [KL81, NO88]

$$\left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{HST}}[q(\tau)] \right) |\psi_l[q(\tau)]\rangle = \varepsilon_l[q(\tau)] |\psi_l[q(\tau)]\rangle, \quad (5.63)$$

die gemeinsam mit einer Nebenbedingung der Art (2.4) selbstkonsistent zu lösen ist. Für die Einteilchen-Green-Funktion lautet die Gleichung [BR86, NO88]:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau_s} g_{ll'}^{(0)}(\tau_s - \tau_r) + \sum_k \left(\hat{\mathcal{H}}_{\text{HST}}[q(\tau_s)] \right)_{lk} g_{kl'}^{(0)}(\tau_s - \tau_r) = -\delta_{ll'} \delta(\tau_s - \tau_r) \quad (5.64)$$

Im Realzeit-Formalismus wurde zur Beschreibung von Kernspaltung bei $T = 0$ ein analoger Zugang verfolgt [Lev80, LNP80b, LNP80a]. In [Neg89] wird zur Behandlung von Kernspaltung mit kohärenten Zuständen von ähnlichen Ideen Gebrauch gemacht. Die Durchführung des hier angedeuteten Verfahrens und insbesondere die Berücksichtigung der Restwechselwirkung und von Dissipation (siehe Kapitel 7) sowie die Ableitung einer Zerfallsrate für metastabile Systeme (siehe Kapitel 8) aus der dynamischen Lösung $q_\tau = q(\tau)$ von (5.63) bzw. (5.64) unter Berücksichtigung von Gauß'schen Korrekturen ist jedoch jenseits des Rahmens der vorliegenden Arbeit angesiedelt.

Kurzzusammenfassung

Im Kapitel 5 konnte die auf einer statischen Näherung (SPA) aufbauende PSPA zur Berechnung der Zustandssumme (5.10) von wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen so erweitert werden, dass auch tiefe Temperaturen zugänglich werden. Bei der ‘‘Crossover’’-Temperatur

| Näherung | anwendbar | Quanteneffekte | $\zeta(\beta, q_0)$ |
|-------------------|-------------|-------------------------------|-------------------------------|
| SPA | $T > 0$ | keine | $\zeta^{\text{SPA}} \equiv 1$ |
| PSPA | $T > T_0$ | lokale RPA | (5.35) |
| ePSPA | $T > T_0/2$ | lokale RPA + Anharmonizitäten | (5.46) |
| LTA | $T < T_0$ | lokale RPA + Anharmonizitäten | (5.48) |
| Variationsprinzip | $T > 0$ | lokale RPA + Anharmonizitäten | (5.62) |

Tabelle 5.1: Die Anwendbarkeitsbereiche und Quanteneffekte der verwendeten Näherungen.

T_0 beginnen Quantenfluktuationen großer Amplitude gegenüber thermischen Fluktuationen zu dominieren. Im Rahmen der PSPA brechen dabei an Instabilitäten Gauß'sche Näherungen für Imaginärzeit-Funktionalintegrale zusammen. Durch die Berücksichtigung von

Anharmonizitäten kann der Anwendbarkeitsbereich ausgedehnt werden: Quanteneffekte können mit den in dieser Arbeit neu entwickelten Näherungen der ePSPA (Abschnitt 5.4) und des Variationsverfahrens (Abschnitt 5.6) auch unterhalb von T_0 berücksichtigt werden (siehe Tab. 5.1).

Eine direkte Anwendung der Neuentwicklungen ist in folgenden Bereichen denkbar:

- Kernphysik: Berechnung von Niveaudichte und thermischen Eigenschaften bei kleinen Anregungen
- Kernphysik: Berechnung der thermischen Spaltrate bei tiefen Temperaturen (siehe Kapitel 8)
- mesoskopische Systeme: Berechnung thermischer Eigenschaften von ultrakleinen supraleitenden Metallclustern

Kapitel 6

Ein Test der Näherungsverfahren für die Zustandssumme

6.1 Anwendung auf den eindimensionalen Doppeltopf

Sowohl die auf der SPA basierenden Näherungen als auch das Variationsverfahren wurden in der Literatur zum Test ihrer Güte auf eindimensionale Systeme angewendet. In diesem Abschnitt soll die freie Energie (5.52) mit einer numerisch exakten Berechnung verglichen werden, bevor im Abschnitt 6.2 die Anwendung auf ein exakt lösbares Vielteilchen-Modell folgt. Hier werden die im Ausdruck (5.51) den einzelnen, im Kapitel 5 für wechselwirkende Vielteilchen-Systeme diskutierten Näherungen entsprechenden Formeln für den “dynamischen” Korrekturfaktor $\zeta(\beta, q_0)$ nicht hergeleitet, sondern aus [RA02] bzw. [FK86] und [Kle90] übernommen. Die wesentliche Vereinfachung gegenüber dem Vielteilchen-Modell besteht – wie bereits im Abschnitt 5.6 erwähnt – darin, dass im eindimensionalen Fall die Entwicklungskoeffizienten der Euklidischen Wirkung direkt aus der Taylor-Reihe des Potentials $V(q) = \sum_{k=1}^{\infty} 1/k! V^{(k)}(q_0) (q - q_0)^k$ abgelesen werden können.

In SPA erhält man für eindimensionale Systeme in Übereinstimmung mit der Formel (5.31) $\zeta^{\text{SPA}}(\beta, q_0) \equiv 1$. Mit aufgrund des unterschiedlichen Integralmaßes veränderten Koeffizienten λ_r lautet das Analogon zum PSPA-Korrekturfaktor (5.35)

$$\zeta^{\text{PSPA}}(\beta, q_0) = \prod_{r>0} \frac{\nu_r^2}{\nu_r^2 + V''(q_0)/M} = \prod_{r>0} \frac{1}{\lambda_r(\beta, q_0)}. \quad (6.1)$$

In erweiterter PSPA erhält man wieder (5.46), wobei jetzt gilt

$$x(\beta, q_0) = \sqrt{\frac{\beta}{V^{(4)}(q_0) - \frac{(V^{(3)}(q_0))^2}{M\nu_2^2 + V''(q_0)}} \frac{\nu_1^2 + V''(q_0)/M}{\nu_1^2}}. \quad (6.2)$$

Das direkte Analogon des Variationsverfahrens aus Abschnitt 5.6 ist das Feynman-Kleinert-Variationsverfahren (FKV) [FK86]. Es liefert folgende Näherung für das in (5.51) definierte effektive klassische Potential:

$$\begin{aligned} V^{\text{eff}}(\beta, q_0) &\leq V^{\text{FKV}}(\beta, q_0) \\ &= V_{a^2}(\beta, q_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(\beta, q_0) a^2(\beta, q_0) - \frac{1}{\beta} \sum_{r>0} \ln \frac{\nu_r^2}{\nu_r^2 + \Omega^2(\beta, q_0)} \end{aligned} \quad (6.3)$$

Hierbei geht das mit der Breite

$$\begin{aligned} a^2(\beta, q_0) &= \frac{2}{M\beta} \sum_{r>0} \frac{1}{\nu_r^2 + \Omega^2(\beta, q_0)} \\ &= \frac{1}{M\beta\Omega^2(\beta, q_0)} \left(\frac{\hbar\beta\Omega(\beta, q_0)}{2} \coth \frac{\hbar\beta\Omega(\beta, q_0)}{2} - 1 \right) \end{aligned} \quad (6.4)$$

ausgeschmierte Potential $V(q)$ ein [Kle90]:

$$V_{a^2}(\beta, q_0) = \sum_{k=0,2,\dots} \frac{(k-1)!!}{k!} V^{(k)}(q_0) a^k(\beta, q_0) \quad (6.5)$$

Die Frequenz $\Omega(\beta, q_0)$ wird lokal so bestimmt, dass das Potential $V^{\text{FKV}}(\beta, q_0)$ in (6.3) minimal wird.

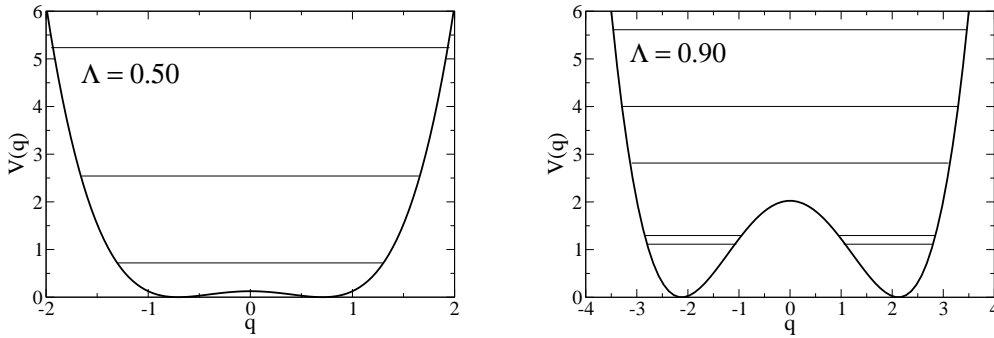


Abbildung 6.1: Das Doppeltopf-Potential und seine niedrigsten Energieniveaus.

Zum Vergleich der aufgeführten Näherungen wird ein Teilchen der Masse $M = 1/2$ im Potential

$$V(q) = -\Lambda q^2 + (1 - \Lambda) q^4 + \frac{\Lambda^2}{4(1 - \Lambda)} \quad \text{mit} \quad 0 \leq \Lambda < 1 \quad (6.6)$$

betrachtet. Für $\Lambda = 0$ stellt es einen quartischen Oszillator dar und für positive Λ entwickelt es bei $q = 0$ eine Barriere der Höhe $B = V(0) = \Lambda^2/(4(1 - \Lambda))$ (siehe Abb. 6.1). Die

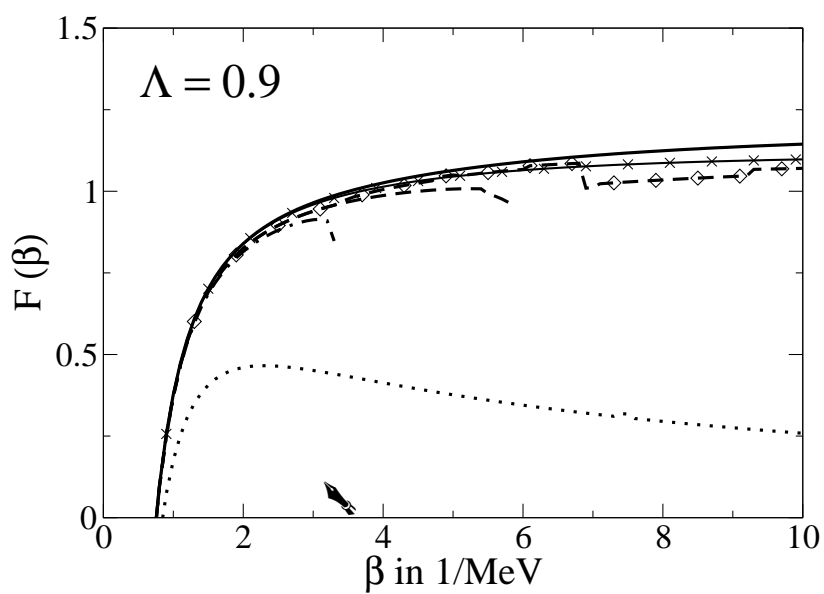
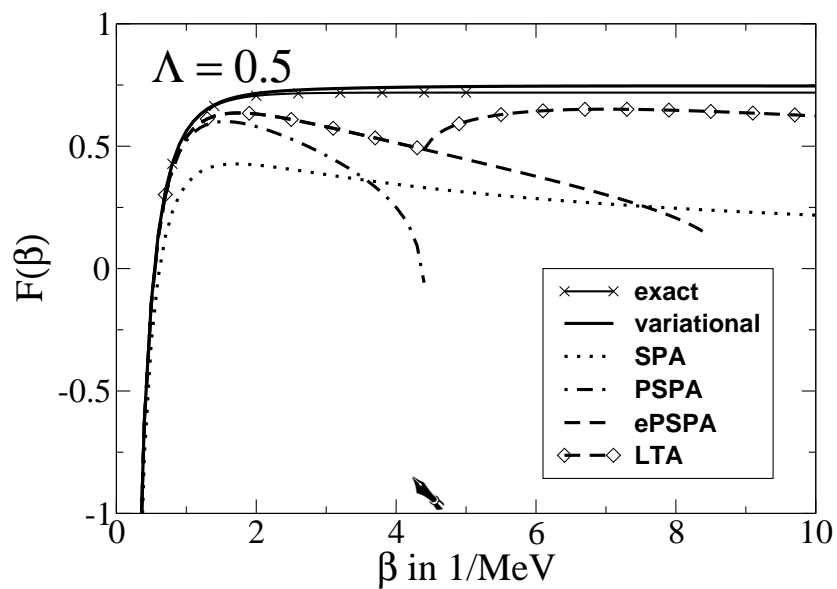


Abbildung 6.2: Die freie Energie eines Teilchens im Doppeltopf-Potential (6.6) als Funktion von β in verschiedenen Naherungen. Der Pfeil deutet auf die inverse “Crossover”-Temperatur β_0 .

Frequenz an den Minima bei $q_{\pm} = \pm\sqrt{\Lambda/(2(1-\Lambda))}$ beträgt $\varpi_{\pm} = \sqrt{8\Lambda}$. Die inverse ‘‘Crossover’’-Temperatur ergibt sich aus der Barrierenfrequenz $|\varpi_b| = 2\sqrt{\Lambda}$ zu $\beta_0 = 1/T_0 = \pi/(\hbar\sqrt{\Lambda})$.

In Abb. 6.2 ist die freie Energie für die beiden Fälle $\Lambda = 0.5$ und $\Lambda = 0.9$ als Funktion der inversen Temperatur in verschiedenen Näherungen aufgetragen. Im Allgemeinen liefert die SPA als klassische Näherung nur für hohe Temperaturen akzeptable Ergebnisse. Die Berücksichtigung von Quanteneffekten auf dem Niveau der lokalen RPA-Moden (PSPA) bringt erhebliche Verbesserungen mit sich, sofern die Barriere hoch ist ($\Lambda = 0.9$) und die Temperatur nicht zu nahe an der ‘‘Crossover’’-Temperatur $T_0 = 1/\beta_0$ liegt. Für $\beta > \beta_0$ ist die PSPA nicht mehr anwendbar. Die Erweiterung ePSPA verbessert das Verhalten in der Crossover-Region $\beta \approx \beta_0$ für hohe Barrieren wesentlich ($\Lambda = 0.9$) und bricht erst bei $\beta = 2\beta_0$ zusammen. Die LTA verhält sich im Crossover-Bereich unphysikalisch. Dies wird insbesondere bei niedrigen Barrieren deutlich ($\Lambda = 0.5$), wo die der LTA zugrundeliegende Annahme, dass wegen $\beta B \gg 1$ die Barrierenregion zum q_0 -Integral nur wenig beiträgt, nicht erfüllt ist. Für $\Lambda = 0.5$ gilt nur $\beta_0 B = 0.18$, während man für $\Lambda = 0.9$ erhält: $\beta_0 B = 2.1$. Das Variationsprinzip FKV liefert für alle Temperaturen gute Ergebnisse. Auch für sehr große β bleibt dieses Verfahren anwendbar.

6.2 Anwendung auf das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell

Nachdem im vorhergehenden Abschnitt die Eigenschaften der im Kapitel 5 entwickelten Näherungen anhand eines eindimensionalen Systems diskutiert wurden, sollen sie nun auch an einem exakt lösbaren Vielteilchen-Modell getestet werden. Zu diesem Zweck eignet sich das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell (LMGM) [LMG65], das auch schon in [PBB91, AA97, RC97, CR97, RR98] zum Test von SPA und PSPA benutzt worden war. Eine anschauliche Deutung sowie eine Zusammenstellung der für diese Arbeit wichtigen Eigenschaften des LMGM findet sich im Anhang C. Der Hamilton-Operator des hier benutzten Spezialfalls des LMGM lautet mit den Quasispin-Operatoren \hat{J}_x und \hat{J}_z

$$\hat{\mathcal{H}} = 2\epsilon\hat{J}_z + 2k\hat{J}_x^2 \quad (6.7)$$

und hat mit $\hat{H} = 2\epsilon\hat{J}_z$ und $\hat{F} = 2\hat{J}_x^2$ die Struktur (5.2). Wie schon in [PBB91, RA02] werden für die folgenden Untersuchungen die Werte

$$\epsilon = 5 \text{ MeV} \quad \text{und} \quad g = 10 \quad (6.8)$$

für den halben Niveauabstand der Eigenwerte des ungekoppelten Systems ($k = 0$) und deren Entartungsgrad benutzt. Das System sei halb gefüllt: $A = g$. Damit gilt für das chemische Potential $\mu(\beta, q_0) \equiv 0$.

Die in (5.11) definierte freie Energie in SPA-Näherung ergibt sich mit den g -fach entar-

teten Einteilchen-Niveaus $\varepsilon(q_0)$ aus (C.7) zu

$$\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0) = \frac{1}{2|k|} q_0^2 - \frac{2g}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta \varepsilon(q_0)}{2} \right) \right]. \quad (6.9)$$

Dies ist die freie Energie der A Teilchen des Vielteilchen-Systems (6.7), die sich im statischen mittleren Feld

$$\hat{\mathcal{H}}_0(q_0) = 2\epsilon \hat{J}_z + 2q_0 \hat{J}_x \quad (6.10)$$

bewegen, das durch die kollektive Koordinate q_0 charakterisiert ist. Eine graphische Darstellung von (6.9) für verschiedene β und einen typischen Wert für die effektive Kopplungsstärke¹

$$\kappa = \frac{|k|g}{\epsilon} \quad (6.11)$$

findet man in Abb. 6.3² gemeinsam mit den $\mathcal{F}^{\text{eff}}(\beta, q_0)$ aus (5.14). Eine ausführliche Diskussion folgt weiter unten. Durch Differenzieren von (6.9) sieht man leicht, dass $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ im Fall $\kappa < 1$ nur ein Minimum bei $q_0 = 0$ aufweist. Für $\kappa > 1$ entwickelt $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ bei $q_0 = 0$ für $\beta > \beta_{\text{crit}}$ eine temperaturabhängige Barriere und zwei symmetrische Minima bei $q_0 = q_{\pm}$. Aufgrund dieser Eigenschaft wird das LMGM häufig als Modell für den *Phasenübergang* zwischen sphärischer und deformierter Kernform verwendet. Die inverse kritische Temperatur $\beta_{\text{crit}} = 1/T_{\text{crit}}$ wird dabei aus der Gleichung $\tanh(\beta_{\text{crit}}\epsilon/2) = 1/\kappa$ bestimmt. Die Höhe der bei $T = 0$ voll ausgebildeten Barriere der effektiven freien Energie in SPA-Näherung (6.9) beträgt

$$B^{\text{SPA}} = \frac{A\epsilon}{2} \frac{(\kappa - 1)^2}{\kappa} \quad \text{für} \quad \kappa > 1. \quad (6.12)$$

Mit Hilfe der FF-Response-Funktion (2.16), die auf der reellen Achse für das LMGM explizit

$$\begin{aligned} \chi(\beta, q_0, \omega) &= -g \left(\frac{\epsilon}{\varepsilon(q_0)} \right)^2 \tanh \left(\frac{\beta \varepsilon(q_0)}{2} \right) \\ &\times \left(\frac{1}{\hbar\omega - 2\varepsilon(q_0) + i0^+} - \frac{1}{\hbar\omega + 2\varepsilon(q_0) + i0^+} \right) \end{aligned} \quad (6.13)$$

lautet, und der Säkulargleichung (2.21) erhält man für die RPA-Frequenzen

$$(\hbar\omega(\beta, q_0))^2 = (2\varepsilon(q_0))^2 \left(1 - \kappa \left(\frac{\epsilon}{\varepsilon(q_0)} \right)^3 \tanh \left(\frac{\beta \varepsilon(q_0)}{2} \right) \right). \quad (6.14)$$

¹Die Kopplungsstärke κ darf nicht mit der in [BM75b] benutzten Größe $\kappa = 1/k$ verwechselt werden.

²Die Parameterwahl $\kappa = 1.313$ ist identisch mit derjenigen in [PBB91]. Dort wurden die Parameter so gewählt, dass man ein möglichst "realistisches" Modell für einen Phasenübergang von sphärischen zu deformierten Kernen bei $T_{\text{crit}} = 1/\beta_{\text{crit}} = 2.5$ MeV mit Barrierenhöhe $B^{\text{SPA}} \approx 2$ MeV erhält.

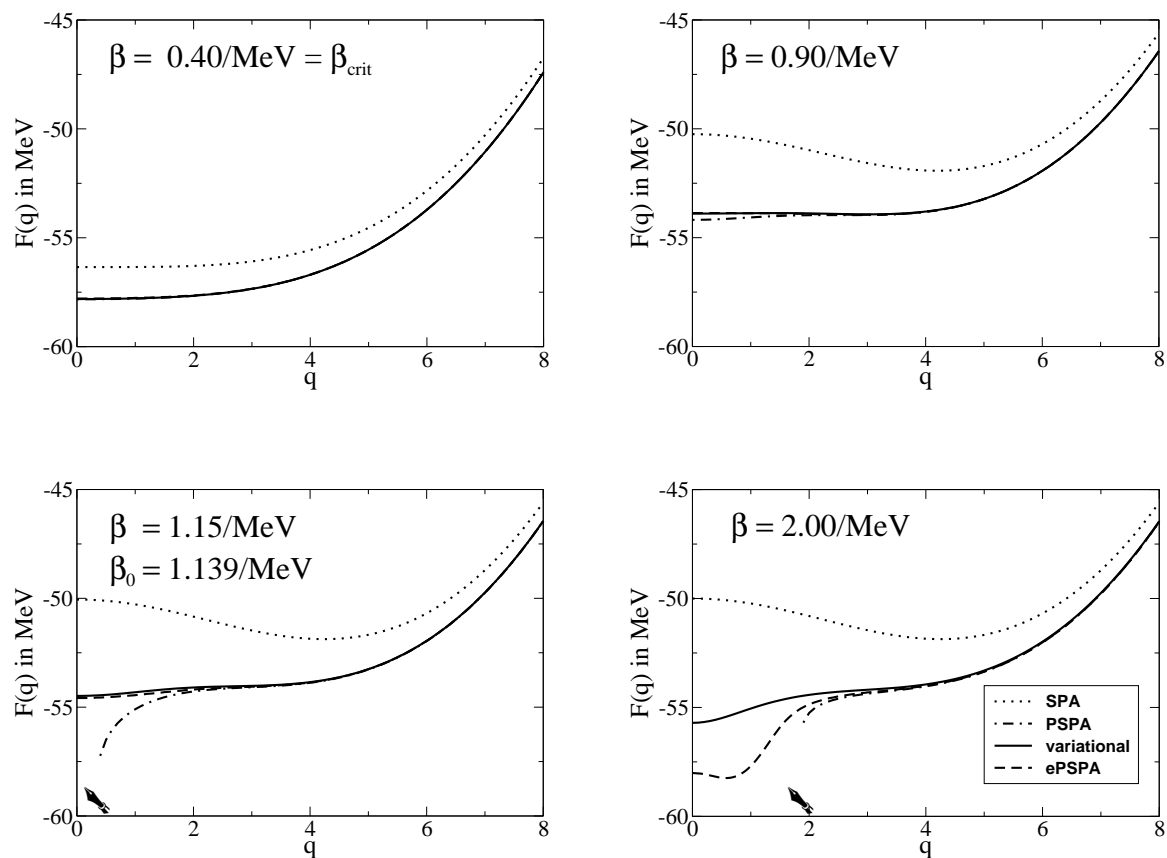


Abbildung 6.3: Die freie Energie \mathcal{F}^{eff} für $\kappa = 1.313$ als Funktion von q_0 bei verschiedenen Temperaturen. Man beachte, dass \mathcal{F}^{eff} eine gerade Funktion in q_0 ist. Die Pfeile deuten auf den kleinsten Wert q_0 , für den die PSPA bei der gegebenen Temperatur formal noch lokal anwendbar ist.

Das LMGM hat damit lediglich ein einziges Paar von RPA-Frequenzen $\pm\varpi$. Infolgedessen genügt für das Variationsverfahren in (5.56) auch ein einziger Variationsparameter Ω . Mit der RPA-Frequenz ergibt sich der “dynamische” Korrekturfaktor in PSPA (5.35) zu

$$\zeta^{\text{PSPA}}(\beta, q_0) = \frac{\sinh(\beta\varepsilon(q_0))}{\beta\varepsilon(q_0)} \frac{\hbar\beta\varpi(\beta, q_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\varpi(\beta, q_0)/2)}. \quad (6.15)$$

Die inverse “Crossover”-Temperatur $\beta_0 = 1/T_0$, bei der die PSPA an der Barriere zusammenbricht, ist im LMGM durch die Gleichung $(\hbar\beta_0\varpi(\beta_0, 0)/2)^2 = -\pi^2$ bestimmt. Da sich die Barriere erst für $\beta > \beta_{\text{crit}}$ ausbildet und die PSPA bei kleinen $|\varpi|^2$ wegen $\nu_1^2 - |\varpi|^2 > 0$ noch anwendbar bleibt (siehe (5.34)), gilt immer $\beta_0 > \beta_{\text{crit}}$. Die Parameter des LMGM sind in Tab. 6.1 für verschiedene Kopplungsstärken κ zusammengestellt.

| κ | β_{crit} | β_0 | B^{SPA} | E_0 |
|----------|-----------------------|-----------|------------------|---------|
| 0.800 | ∞ | ∞ | – | -52.543 |
| 1.100 | 0.609 | 1.988 | 0.227 | -54.038 |
| 1.313 | 0.400 | 1.139 | 1.865 | -55.502 |
| 1.500 | 0.322 | 0.917 | 4.167 | -57.222 |
| 1.700 | 0.270 | 0.788 | 7.206 | -59.625 |

Tabelle 6.1: Die Parameter und Energien des LMGM. Die inverse kritische und “Crossover”-Temperatur β_{crit} und β_0 sind in $1/\text{MeV}$ und die Barrierenhöhe B^{SPA} sowie die Grundzustandsenergie E_0 des Vielteilchen-Systems (6.7) sind in MeV angegeben.

In Abb. 6.3 wurden für $\kappa = 1.313$ neben $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ aus (6.9) auch die in (5.14) definierte effektive freie Energie des Variationsverfahrens und ihre Analoga aus PSPA und ePSPA aufgetragen. Alle vier Größen sind als Funktion der kollektiven Koordinate q_0 und für verschiedene β dargestellt. Bei allen Temperaturen liefern PSPA, ePSPA und das Variationsprinzip deutlich sichtbare Korrekturen gegenüber der klassischen SPA. Bei $\beta = 0.4 \text{ MeV}^{-1} = \beta_{\text{crit}}$ ist $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ im Bereich $q_0 \approx 0$ flach: Die Barriere fängt gerade an, sich auszubilden. Bis zu $\beta = 0.9 \text{ MeV}^{-1}$, wo die Barriere in \mathcal{F}^{SPA} schon fast vollständig entwickelt ist, sind die verschiedenen Korrekturen von PSPA, ePSPA und Variationsprinzip untereinander kaum unterscheidbar. An der inversen “Crossover”-Temperatur $\beta_0 = 1.139 \text{ MeV}^{-1}$ findet bei der PSPA an der Barriere ein Vorzeichenwechsel von λ_1 statt. Folglich ist die PSPA bei $q_0 = 0$ lokal nicht mehr anwendbar, weil die q_1 -Integrale in (5.15) hier divergieren. Für $\beta > \beta_0$ dehnt sich dieser Bereich zu größeren $|q_0|$ aus. Am Beispiel $\beta = 1.15 \text{ MeV}^{-1} \approx \beta_0$ wird deutlich, dass die PSPA bei tiefen Temperaturen auch außerhalb dieses Bereichs mehr Struktur zeigt als die glatten Resultate für ePSPA und das Variationsprinzip, die noch nahe zusammen liegen. Bei $\beta = 2 \text{ MeV}^{-1} \approx 2\beta_0$ schließlich haben sich auch zwischen der ePSPA und dem Variationsprinzip Abweichungen ausgebildet. Letzteres weist noch immer eine relativ strukturarme effektive freie Energie auf, welche sich auch für sehr große β nicht mehr wesentlich ändert. Dieses Verhalten ist aus der Literatur für das auf das eindimensionale

Doppeltopf-Potential angewandte FKV bekannt. Dort wurde mithilfe von Monte-Carlo-Simulationen gezeigt [JK87], dass auch das damit erhaltene effektive klassische Potential $V^{\text{eff}}(q_0)$ aus (5.51) bei tiefen Temperaturen im Bereich der Barriere von $V(q)$ flach ist.

6.2.1 Die freie Energie

Zum Vergleich der Resultate der verschiedenen Näherungen mit dem exakten Ergebnis wird in Abb. 6.4 zunächst wieder die freie Energie (5.52) des durch (6.7) beschriebenen Gesamtsystems herangezogen. Für Produkte und Summen, wie sie beispielsweise in den Korrekturfaktoren (5.35), (5.46) oder (5.62) der verschiedenen Näherungen auftreten, wurde die numerische Auswertung auf $r, s = 1 \dots N$ mit $N = 100$ eingeschränkt. Die Verwendung eines größeren Indexraumes bringt keine feststellbare Veränderung der Ergebnisse mehr. Wie schon im eindimensionalen Fall ist die SPA als klassische Näherung nur bei hohen Temperaturen wirklich gut. Allerdings ist anzumerken, dass der relative Fehler in den untersuchten Fällen auch bei tiefen Temperaturen mit etwa 5% wesentlich kleiner ist als beim eindimensionalen Doppeltopf aus Abschnitt 6.1. Da sich im Fall $\kappa = 0.8$ in \mathcal{F}^{SPA} aus (6.9) keine Barriere ausbildet, ist die PSPA für alle Temperaturen anwendbar. Sie liefert auch bei großen $\beta = 1/T$ eine wesentliche Verbesserung gegenüber der SPA. Die Erweiterungen der PSPA und das neu entwickelte Variationsverfahren ergeben in diesem Fall hingegen keine nennenswerten Verbesserungen mehr.

Anders stellt sich dies im Fall $\kappa = 1.313$ dar. Hier beginnt sich bei $\beta_{\text{crit}} = 0.4 \text{ MeV}^{-1}$ in \mathcal{F}^{SPA} eine Barriere auszubilden (siehe Abb. 6.3) und die inverse ‘‘Crossover’’-Temperatur beträgt $\beta_0 = 1.139 \text{ MeV}^{-1}$. Die PSPA liefert akzeptable Ergebnisse nur für $\beta < 0.9 \text{ MeV}^{-1} < \beta_0$ und ist für $\beta > \beta_0$ überhaupt nicht mehr anwendbar. Die Erweiterung ePSPA verhält sich im ‘‘Crossover’’-Bereich regulär und kann für $\beta < 1.2 \text{ MeV}^{-1} \approx \beta_0$ als gute Näherung verwendet werden. Oberhalb dieses Bereichs liefert auch die ePSPA schlechte Ergebnisse. Da die temperaturabhängige Barriere bei $\beta = \beta_0$ mit einer Höhe von etwa 1.8 MeV aber bereits hoch genug ist, um die im Abschnitt 5.5 gemachten Annahmen der LTA zu rechtfertigen ($\beta_0 B^{\text{SPA}}(\beta_0) \approx 2$), liefert diese Näherung überraschend gute Ergebnisse für alle Temperaturen. Eine Ausnahme stellt der ‘‘Crossover’’-Bereich selbst dar. Hier führt die sukzessive Einschränkung des Integrationsbereichs an der Barriere zu einem unphysikalischen Knick in der Funktion $\mathcal{F}(\beta)$.

Die Näherung, die das Variationsverfahren aus Abschnitt 5.6 liefert, ist für $\kappa = 0.8$ von vergleichbarer Güte wie die Ergebnisse der PSPA und ihrer Erweiterungen. Im Fall $\kappa = 1.313$ jedoch zeigt sich die Stärke dieser Methode: Das Variationsverfahren bleibt auch bei sehr tiefen Temperaturen anwendbar. Der Fehler beträgt dort ähnlich wie bei der LTA nur etwa 1%. Zusätzlich liefert das Variationsverfahren auch im Crossover-Bereich ein völlig glattes Resultat für die freie Energie. Zur Beantwortung der Frage, warum das Variationsverfahren auch bei tiefen Temperaturen nicht zusammenbricht, ist es sinnvoll die

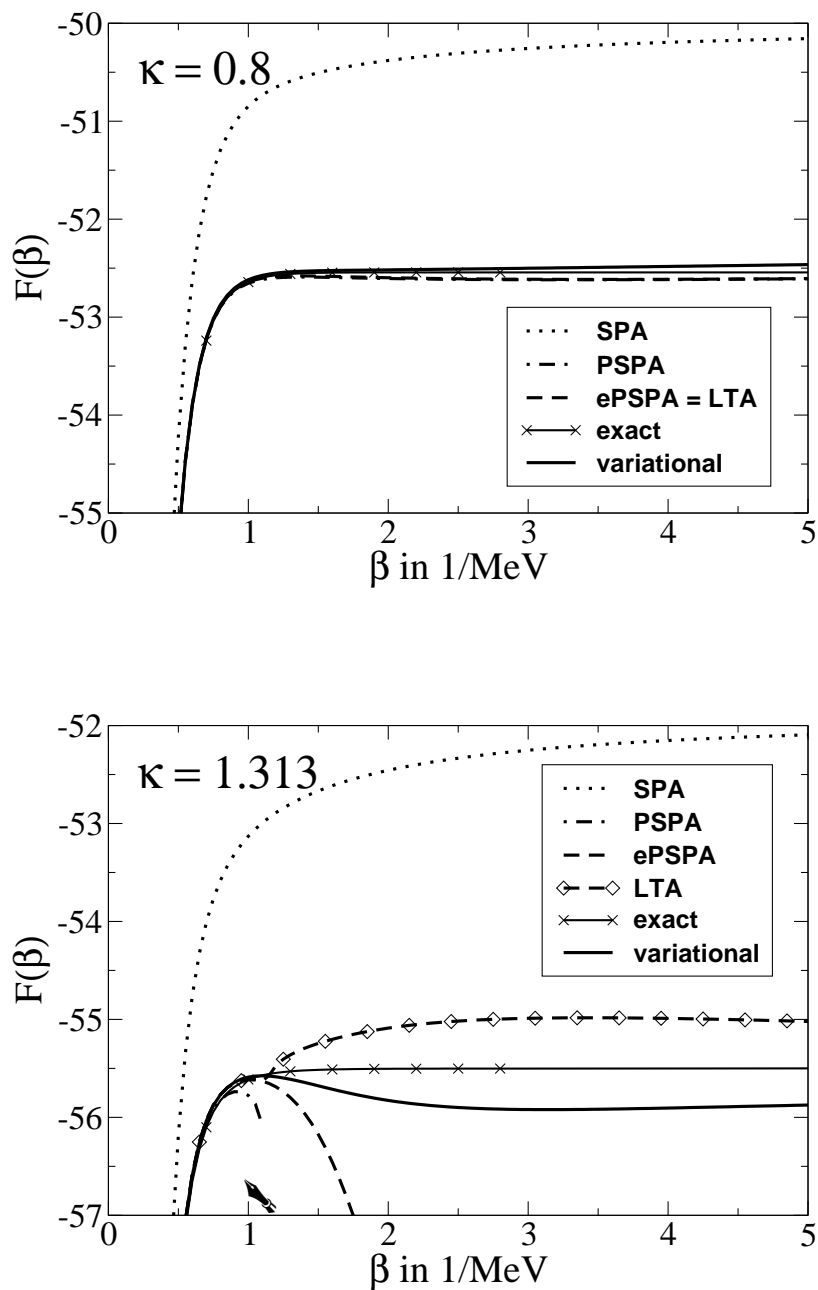


Abbildung 6.4: Die freie Energie des Gesamtsystems im LMGM als Funktion von β in verschiedenen Näherungen. Der Pfeil deutet auf die inverse "Crossover"-Temperatur β_0 . Man beachte, dass der relative Fehler der klassischen SPA bei tiefen Temperaturen nur etwa 5% beträgt.

Größen

$$\Omega_{\text{eff}}^2(\beta, q_0) = \left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}\right)^2 + x^2(\beta, q_0) \quad \text{mit} \quad x^2(\beta, q_0) = \begin{cases} \varpi^2(\beta, q_0) \\ \Omega^2(\beta, q_0) \end{cases} \quad (6.16)$$

mit $2\pi/\hbar\beta \equiv \nu_1$, die zu den Nennern der Korrekturfaktoren (5.35) bzw. (5.57) und (5.62) beitragen, als Funktion von β bei gegebenem q_0 darzustellen. In Abb. 6.5 ist dies für $q_0 = 0$ gemacht, wo das Quadrat der RPA-Frequenz ϖ^2 aus (6.14) den größten negativen Wert annimmt. An der inversen ‘‘Crossover’’-Temperatur β_0 wechselt Ω_{eff}^2 mit $x^2 = \varpi^2$ das Vorzeichen. Mit (5.32) und (5.34) divergiert damit das in (5.15) notwendige q_1 -Integral. Folglich gilt in diesem Fall die Formel (5.35) nicht mehr, die unter der Voraussetzung abgeleitet worden war, dass *alle* q_r -Integrale konvergieren. Ω_{eff}^2 mit $x^2 = \Omega^2$ bleibt hingegen *stets positiv*. Somit sind alle q_r -Integrale, die auf (5.57) führen vom Gauß’schen Typ und der Korrekturfaktor (5.62) des Variationsverfahrens ist für alle β wohldefiniert.

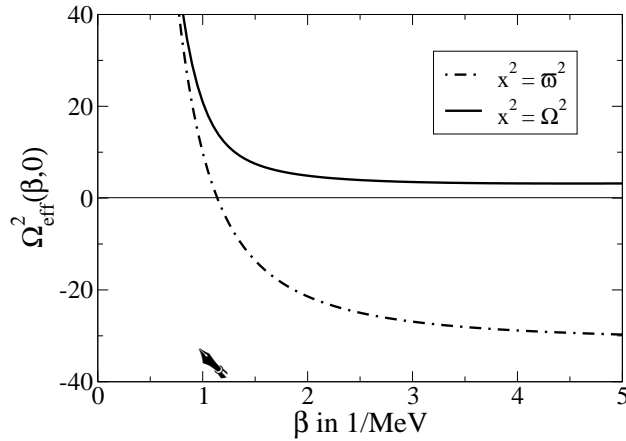


Abbildung 6.5: Ein Vergleich der RPA-Frequenz und des Variationsparameters des LMGM als Funktion von β (siehe (6.16)). Der Pfeil zeigt auf die inverse ‘‘Crossover’’-Temperatur.

In Abb. 6.6 wird am Beispiel der freien Energie (5.52) die Genauigkeit der PSPA und des Variationsverfahrens für verschiedene Kopplungsstärken κ verglichen. Die zugehörigen Barrierenhöhen B^{SPA} bei $T = 0$ sind in Tab. 6.1 angegeben. Die Güte des Variationsverfahrens nimmt im Bereich $\beta > \beta_0$ mit *abnehmendem* κ zu, während die Güte der PSPA in ihrem Anwendbarkeitsbereich $\beta < \beta_0$ mit *zunehmendem* κ besser wird. Die Ursache liegt darin, dass die Berücksichtigung von Quanteneffekten auf dem Niveau der lokalen RPA mittels PSPA an den dominanten Minima der freien Energie des nukleonischen Systems (6.9) die Realität umso besser beschreibt, je höher die Barriere ist und je unwichtiger damit Anharmonizitäten und Tunneleffekte sind, die in der PSPA beide nicht enthalten sind. Ein ähnliches Verhalten kann auch für den eindimensionalen Doppelpf festgestellt werden.

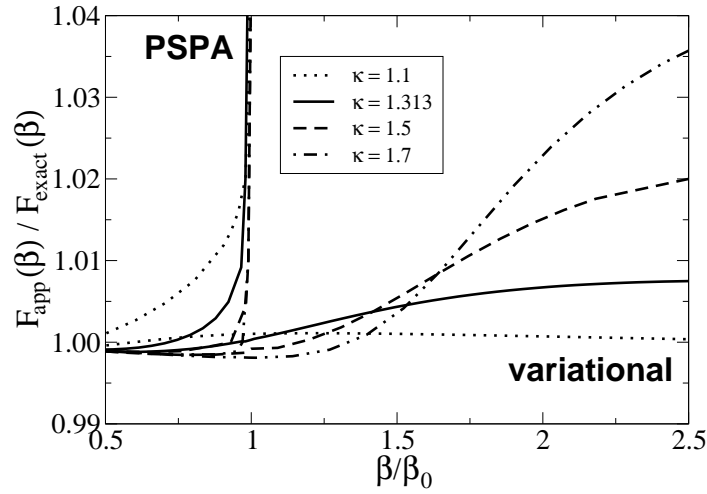


Abbildung 6.6: Ein Vergleich der Genauigkeit der PSPA (Kurven mit Divergenz bei $\beta/\beta_0 = 1$) und des Variationsverfahrens für die freie Energie bei verschiedenen Kopplungsstärken.

6.2.2 Die innere Energie und die spezifische Wärme

Als weiteren Test für die Genauigkeit der verschiedenen Näherungen werden im Folgenden die innere Energie

$$\mathcal{E}(\beta) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{Z}(\beta) \quad (6.17)$$

und die spezifische Wärme

$$\mathcal{C}(\beta) = \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \mathcal{Z}(\beta) \quad (6.18)$$

des durch (6.7) beschriebenen Gesamtsystems berechnet, die die erste und zweite Ableitung der Zustandssumme (5.10) testen. Wie schon bei der freien Energie sind im Fall $\kappa = 0.8$ auch hier alle Weiterentwicklungen der SPA sehr gute Näherungen. In Abb. 6.7 ist für $\kappa = 1.313$ oben die innere Energie als Funktion von β dargestellt. Die klassische SPA liefert ein nur qualitativ richtiges Resultat. Das Variationsverfahren ist auch hier die eindeutig beste Näherung. Der relative Fehler bleibt für alle Temperaturen unter 2% und das Verhalten ist im “Crossover”-Bereich stetig. Während die Fehler der PSPA und der ePSPA schon unterhalb von β_0 bzw. $2\beta_0$ drastisch werden, zeigt die LTA an der inversen “Crossover”-Temperatur eine unphysikalische Unstetigkeit auf, die vom sukzessiven Ausschließen der Barriere aus dem Integrationsbereich herrührt.

In Bezug auf die spezifische Wärme (Abb. 6.7 unten) zeigt die SPA das exakte Resultat für alle Temperaturen ein *qualitativ richtiges Verhalten*. Für $\beta < \beta_0$ wird das exakte

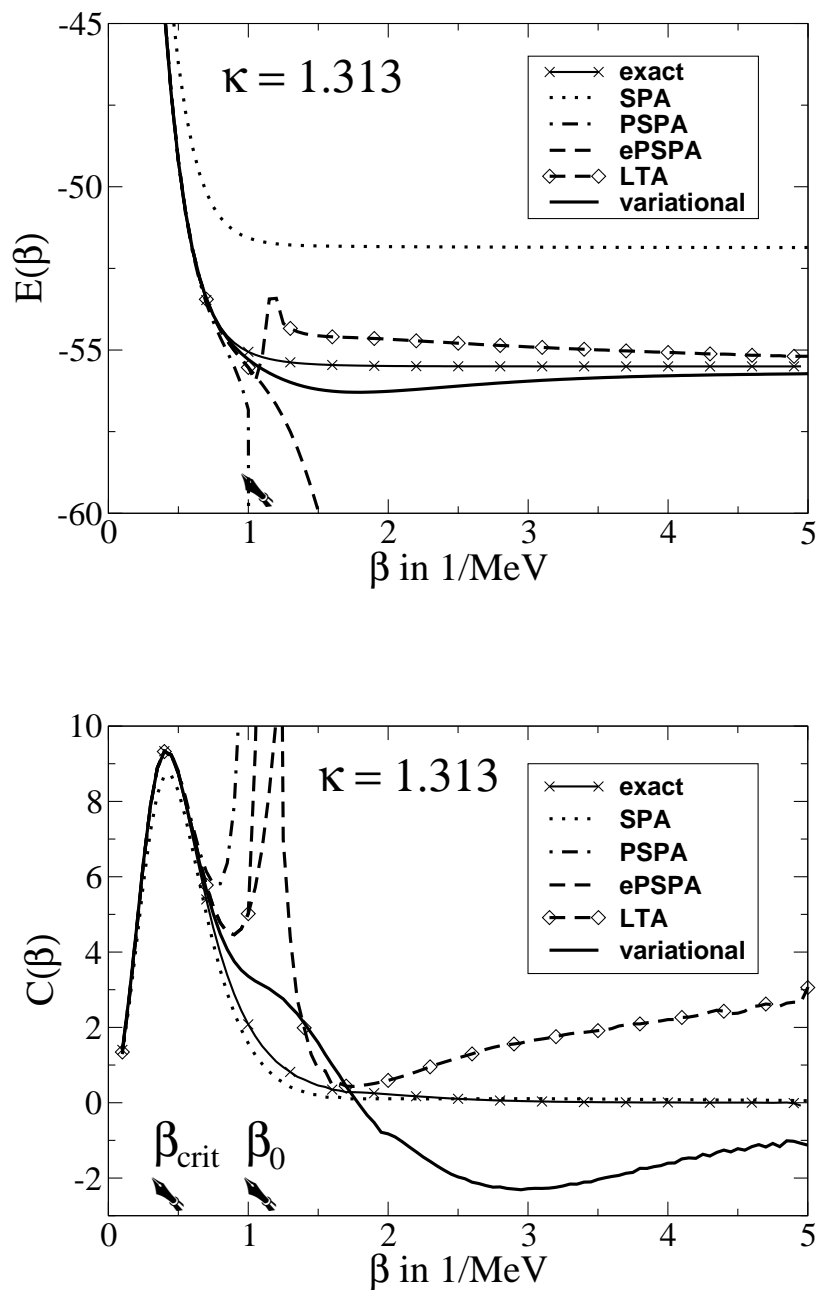


Abbildung 6.7: Die innere Energie (oben) und die spezifische Wärme (unten) des Gesamtsystems im LMGM als Funktion von β in verschiedenen Näherungen. Die Pfeile deuten auf die inverse kritische Temperatur β_{crit} und die inverse “Crossover”-Temperatur β_0 .

Resultat ein wenig unterschätzt. PSPA und ePSPA liefern bei hohen Temperaturen sehr gute Näherungen. Diese versagen allerdings schon weit unterhalb der Grenzen der formalen Anwendbarkeit bei β_0 bzw. $2\beta_0$. Ähnliches gilt für die LTA. Das Variationsverfahren ist auch bezüglich der spezifischen Wärme für $\beta \lesssim 1 \text{ MeV} \approx 0.9\beta_0$ die beste Näherung, liefert aber für $\beta \gtrsim 1.7 \text{ MeV} \approx 1.5\beta_0$ unphysikalische negative Werte. Die Ursache hierfür könnte in der Tatsache liegen, dass bei der Berechnung von $\langle \delta s_E \rangle_\Omega^{q_0}$ in (5.60) die Entwicklung (5.16) der Euklidischen Wirkung nach der vierten Ordnung abgebrochen wurde. Interessant ist, dass beim Variationsverfahren die Divergenzen von ePSPA und LTA im Bereich um die inverse "Crossover"-Temperatur β_0 weitestgehend ausgeschmiert sind. ePSPA und LTA benutzen als Koeffizienten dritter und vierter Ordnung in (5.16) *nur* ρ_{11-2} , ρ_{-1-12} und σ_{11-1-1} , während beim Variationsverfahren *alle* σ_{rs-r-s} mitgenommen werden.

In den beiden letzten Abschnitten konnte gezeigt werden, dass das Variationsverfahren besonders bei tiefen Temperaturen und nicht zu hohen Barrieren eine wesentliche Verbesserung gegenüber den bisher verwendeten Näherungen ergibt, die Quanteneffekte im Wesentlichen auf dem Niveau von lokaler RPA bzw. den niedrigsten anharmonischen Korrekturen hierzu berücksichtigen. Allerdings muss diese Verbesserung durch erheblich längere Rechenzeiten erkauft werden: Bei einer Einschränkung von Produkten und Summen in Formeln wie (5.35) auf $r, s = 1 \dots N$ ist bei den Näherungen PSPA, ePSPA und LTA die Rechenzeit im Wesentlichen durch die Berechnung der N Koeffizienten λ_r limitiert (vgl. Anhang B.1). Im Gegensatz dazu müssen beim Variationsverfahren (5.62) N^2 Koeffizienten σ_{rs-r-s} nach den Formeln aus Anhang B.3 berechnet werden. Im Falle einer Berücksichtigung von Beiträgen $2n$ -ter Ordnung zur Euklidischen Wirkung (5.16) müssten sogar N^n Koeffizienten bestimmt werden. Eine eventuell mögliche sinnvolle Wahl einer Abbruchbedingung für große r und s , die Eigenschaften von σ_{rs-r-s} verwendet, ändert an diesem grundsätzlichen Verhalten nichts. Dieser rechentechnische Mehraufwand stellt eine *wesentliche* Komplizierung gegenüber dem ursprünglichen Variationsverfahren für ein eindimensionales Potential dar, wo die Koeffizienten einfach aus der Taylor-Reihe des Potentials abgelesen werden können (vgl. (6.5)).

6.2.3 Die Temperatur-Fluktuationen

Nach den im Abschnitt 2.7 gemachten Bemerkungen weist die Temperatur endlicher Systeme Fluktuationen auf. Deren relative Größe kann mit der Formel (2.59) bzw.

$$\frac{\Delta T}{T} = \left| \frac{\Delta \beta}{\beta} \right| = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{C}(\beta)}} = \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{C}(\beta)/A}} \quad (6.19)$$

aus der spezifischen Wärme des Systems berechnet werden. Obwohl die Größe dieser Temperatur-Fluktuationen bei kleinen Systemen beachtlich ist, werden diese in der Literatur über Näherungen der im Kapitel 5 diskutierten Art nirgends behandelt. Besonders groß sind die Effekte bei Modellen, die aus einem inerten Rumpf und Valenzteilchen bestehen.

Da der Rumpf nicht thermisch angeregt werden kann, ist die die Temperatur-Fluktuationen bestimmende Teilchenzahl A durch die *Anzahl der Valenzteilchen* gegeben und somit *viel kleiner* als die gesamte Teilchenzahl des Vielteilchen-Systems.

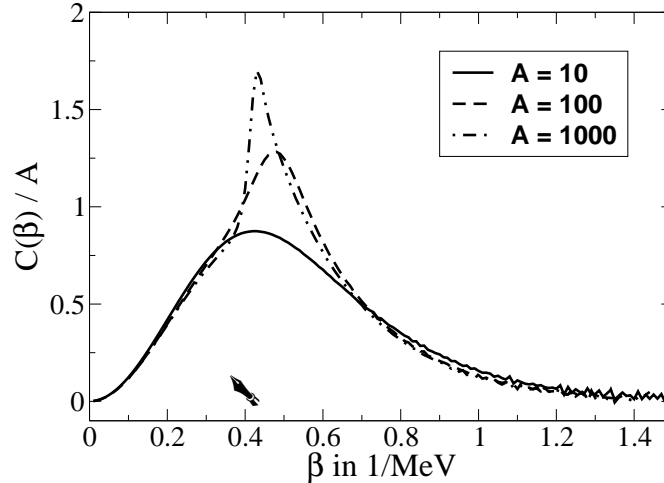


Abbildung 6.8: Die spezifische Wärme je Teilchen in SPA für das LMGM. Es sind drei verschiedene Teilchenzahlen und die effektive Kopplung $\kappa = 1.313$ gezeigt. Der Pfeil deutet auf die inverse kritische Temperatur β_{crit} .

In Tab. 6.2 ist für drei Werte von β dargestellt, wie die Temperatur-Fluktuationen des LMGM näherungsweise wie $\Delta T/T = |\Delta\beta/\beta| \sim 1/\sqrt{A}$ abnehmen. Zum Verständnis der

| A | 0.20 MeV^{-1} | β_{max} | 0.80 MeV^{-1} |
|------|-------------------------|----------------------|-------------------------|
| 10 | 0.49 | 0.34 | 0.53 |
| 100 | 0.16 | 0.09 | 0.17 |
| 1000 | 0.05 | 0.02 | 0.06 |

Tabelle 6.2: Temperatur-Fluktuationen $\Delta T/T = |\Delta\beta/\beta|$ beim Lipkin-Meshkov-Glick-Modell mit $\kappa = 1.313$ in SPA für drei verschiedene Werte von $\beta = 1/T$. $\beta_{\text{max}} \approx \beta_{\text{crit}}$ gehört zum Maximum der spezifischen Wärme $\mathcal{C}(\beta)$. Hier werden die Temperatur-Fluktuationen minimal.

Abweichung bei $\beta \approx \beta_{\text{crit}}$ ist es günstig, wie in Abb. 6.8 das Verhältnis \mathcal{C}/A für verschiedene Teilchenzahlen, aber gleiche effektive Kopplung κ darzustellen. Zur Auswertung wurde dabei die SPA benutzt, da diese Näherung für alle Temperaturen qualitativ das richtige Verhalten aufweist (vgl. Abb. 6.7 unten). Die spezifische Wärme wird dabei unter- und die Temperatur-Fluktuationen werden folglich leicht überschätzt. Sieht man vom Bereich des

Phasenübergangs $\beta \approx \beta_{\text{crit}} = 0.4 \text{ MeV}$ ab, ist \mathcal{C}/A unabhängig von der Teilchenzahl des Systems. Für große A wird eine Ähnlichkeit mit der spezifischen Wärme beim sogenannten “ λ -Übergang” von ${}^4\text{He}$ deutlich. Bei kleiner Teilchenzahl A ist der Phasenübergang durch “finite size”-Effekte ausgeschmiert. Die Tatsache, dass die spezifische Wärme des LMGM auch bei kleinen β verschwindet, was mit (6.19) großen Temperatur-Fluktuationen bei hohen Temperaturen entspricht, ist eine Besonderheit dieses Modells. In [RZC99, RZ00] wird zum Studium sehr kleiner Supraleiter ein Modell benutzt, bei dem sich bei großen Temperaturen ein näherungsweise lineares Anwachsen der spezifischen Wärme bei konstantem Volumen mit T zeigt. Dort verschwinden folglich die Temperatur-Fluktuationen wie $\Delta T/T \sim 1/\sqrt{T}$.

Trotz der Fluktuationen ist die Verwendung der Temperatur als die thermische Anregung spezifizierende Größe immer dann gerechtfertigt, wenn die zu berechnende Observable auf der Skala ΔT nur schwach von T abhängt. Dies ist beispielsweise beim LMGM für die hier betrachteten Größen wie die freie und innere Energie sowie die spezifische Wärme des Vielteilchen-Systems bei tiefen Temperaturen der Fall (siehe Abb. 6.4 und 6.7). Bei schweren Kernen liegen die relativen Temperatur-Fluktuationen in der Größenordnung von etwa 20%. Die Werte der im Kapitel 3 untersuchten Transportkoeffizienten für die Kollektivbewegung (siehe Abb. 3.1 und 3.2) aufgrund dieser Schwankungen sind mit einer Unsicherheit behaftet, die umso kleiner ist, je schwächer die betrachtete Größe mit T variiert.

Aufgrund der Abhängigkeit $\Delta T/T \sim 1/\sqrt{A}$ werden die in dieser Arbeit mit dem Ziel einer Verbesserung der Güte bei tiefen Temperaturen vorgeschlagenen Weiterentwicklungen des Approximationsschemas für die Zustandssumme wechselwirkender Vielteilchen-Systeme mit zunehmender Teilchenzahl wertvoller. Eine Anwendung des Variationsverfahrens auf die diskutierten ultrakleinen Aluminiumcluster, wo $A_{\text{cluster}} \gg A_{\text{nucl}}$ erscheint daher äußerst vielversprechend.

6.2.4 Die Niveaudichte

Eine wesentliche Motivation für die Entwicklung von Näherungen wie der SPA oder der PSPA war neben der Möglichkeit zur Untersuchung von “finite-size” Effekten in wechselwirkenden Systemen [MSD72] die Notwendigkeit zur mikroskopischen Berechnung der Niveaudichte und des Niveaudichte-Parameters [AZ84, LAB88, PBB91, AA98] bei endlichen Temperaturen. Aus der Niveaudichte $\Omega(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ erhält man die Zustandssumme im kanonischen Ensemble mittels

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int_0^\infty dE \exp(-\beta E) \Omega(E) . \quad (6.20)$$

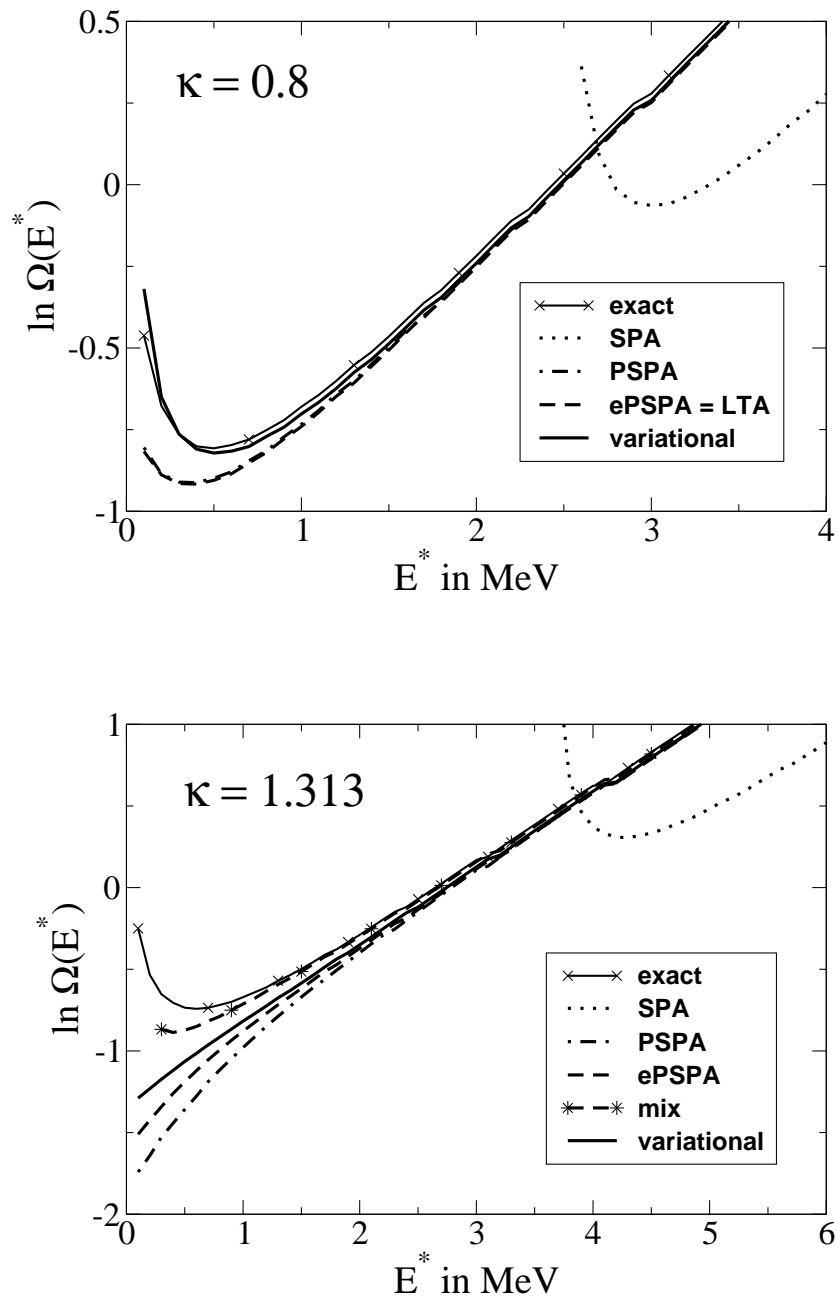


Abbildung 6.9: Logarithmische Darstellung der Niveaudichte des LMGM als Funktion der Anregungsenergie $E^* = E - E_0$ in verschiedenen Näherungen.

Durch Umkehrung dieser Laplace-Transformation ergibt sich für die Niveaudichte der Ausdruck

$$\Omega(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} d\beta \exp(\beta E) \mathcal{Z}(\beta), \quad (6.21)$$

der in einer Sattelpunktsnäherung ausgewertet werden kann (Darwin-Fowler-Methode) [BM75a]:

$$\Omega(E^*) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mathcal{D}}} \exp[\beta^*(E^* - \mathcal{F}(\beta^*))] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mathcal{D}}} \exp[\mathcal{S}(\beta^*)] \quad (6.22)$$

Dabei ist \mathcal{S} die Entropie. β^* kann durch Lösen der Gleichung $E^* = E - E_0 = \mathcal{E}(\beta^*) - E_0$ aus der Anregungsenergie E^* gefunden werden und für \mathcal{D} gilt:

$$\mathcal{D} = \left| \left(\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \mathcal{Z}(\beta) \right)_{\beta=\beta^*} \right| = \left| \frac{1}{(\beta^*)^2} \mathcal{C}(\beta^*) \right| \quad (6.23)$$

In Abb. 6.9 ist die nach (6.22) berechnete Niveaudichte als Funktion von E^* für verschiedene Näherungen aufgetragen. Bei (hier nicht gezeigten) hohen Anregungsenergien $E^* \gtrsim 15$ MeV bzw. hohen Temperaturen liefern alle Näherungen gute Ergebnisse. Bei kleinen E^* jedoch wird die klassische SPA schlecht. Aufgrund der Tatsache, dass die mit der SPA berechnete innere Energie für große β einige MeV über dem wahren Grundzustand E_0 des Vielteilchen-Systems (6.7) liegt (vgl. Tab. 6.1 und Abb. 6.7 oben), kann die Sattelpunktsnäherung (6.22) im Fall der SPA für kleine E^* keine Resultate liefern. Alle anderen Näherungen sind auch in diesem Bereich anwendbar. PSPA und ePSPA liefern wesentliche Verbesserungen gegenüber der SPA. Im Fall $\kappa = 0.8$ sind sie kaum unterscheidbar und zeigen qualitativ das richtige Verhalten. Für $\kappa = 1.313$ sind sie nicht in der Lage, das Verhalten der exakten Rechnung qualitativ richtig wiederzugeben. Die ePSPA stellt aber trotzdem eine (mäßige) Verbesserung gegenüber der PSPA dar. Das Variationsverfahren gibt die exakte Rechnung im Fall $\kappa = 0.8$ sehr gut wieder: Abweichungen sind auch bei sehr kleinen Anregungsenergien kaum sichtbar. Im Fall $\kappa = 1.313$ ist dies anders. Das Variationsverfahren bringt zwar eine gewisse Verbesserung gegenüber der ePSPA, verhält sich aber für kleine Anregungsenergien ebenfalls qualitativ falsch. Die Ursache für dieses Defizit von PSPA, ePSPA und Variationsverfahren liegt darin, dass diese Näherungen im Bereich $\beta \gtrsim 1 \text{ MeV}^{-1} \approx \beta_0$ für die innere Energie Werte liefern, die *unterhalb* des Grundzustands E_0 liegen (vgl. Abb. 6.7 oben). Daher legt eine Sattelpunktsnäherung für die weitere Auswertung einen falschen Wert für β^* zugrunde. Die “gemischte” Näherung, bestehend aus dem Variationsprinzip für die innere Energie und der global akzeptablen SPA für die spezifische Wärme, liefert ein qualitativ richtiges Ergebnis und ist somit für die Niveaudichte ein gutes “Rezept” zur Konstruktion einer Näherung.

Kurzzusammenfassung

Die im Kapitel 5 besprochenen Näherungsverfahren zur Approximation der Zustandssumme wurden am eindimensionalen Doppelpotential (Abschnitt 6.1) und dem exakt lösbaeren Lipkin-Meshkov-Glick-Modell (LMGM) für wechselwirkende Vielteilchen-Systeme getestet (Abschnitt 6.2). Dabei erweist sich das in dieser Arbeit neu entwickelte Variationsverfahren (Abschnitt 5.6) als den bisher benutzten Näherungen und der ePSPA überlegen:

- Es ist formal anwendbar bis herab zu $T = 0$ und verhält sich im “Crossover”-Bereich $T \approx T_0$ völlig regulär.
- Für Observable wie die freie und die innere Energie von wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen (siehe Abb. 6.4 und 6.7 oben) können damit auch bei tiefen Temperaturen $T \ll T_0$ noch sehr gute Ergebnisse erzielt werden.
- Im gesamten Anwendbarkeitsbereich der bisher verwendeten PSPA liefert es für alle hier untersuchten Größen eine wesentlich verbesserte Näherung.

Diese Verbesserungen müssen jedoch durch einen gegenüber der PSPA und der ePSPA nicht unerheblich höheren numerischen Rechenaufwand erkauft werden. Darüber hinaus ist auch das ebenfalls auf einer statischen Näherung aufbauende Variationsverfahren nicht in der Lage, alle Eigenschaften der dynamischen Pfade zu berücksichtigen, die für sehr tiefe Temperaturen dominant werden.

Kapitel 7

Die Ableitung mikroskopischer Transportkoeffizienten bei Berücksichtigung von Dissipation

Wie bereits am Ende von Kapitel 5 erwähnt, ist das in (5.61) und (5.62) vorgeschlagene Variationsverfahren nur von geringem praktischem Nutzen, wenn die Säkulargleichung (2.21) auf eine große Anzahl von Lösungen ϖ_μ führt. Das Minimieren der freien Energie \mathcal{F}^{var} in Bezug auf alle zugehörigen Variationsparameter Ω_μ ist dann äußerst rechenzeitintensiv und erscheint daher hoffnungslos. Es ist allerdings möglich, durch eine weitere Näherung die Anzahl der Variationsparameter auf einen einzigen zu reduzieren. In diesem Zuge können dann in der PSPA [Rum00, RH01], ePSPA, LTA sowie im Variationsverfahren [RH04b] auch dissipative Effekte berücksichtigt werden.

7.1 Das allgemeine Vorgehen

In (5.33) wurde der Zusammenhang zwischen dem führenden Entwicklungskoeffizienten $\lambda_{r,s}$ der Euklidischen Wirkung (5.16) und der nukleonischen sowie kollektiven FF-Response-Funktion in der komplexen Frequenz-Ebene hergestellt. Im IPM ist die nukleonische Response-Funktion durch (2.16) gegeben und die kollektive kann daraus mit (2.22) berechnet werden. Da hier im Einteilchen-Hamilton-Operator (5.12) die Restwechselwirkung $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ vernachlässigt wird, hat $(\chi_{\text{coll}}^{\text{IPM}})''(\omega)$ auf der reellen Achse die *diskrete* Struktur (2.23).

Zur Berücksichtigung der *Restwechselwirkung*, die letztlich für Relaxations- und Dämpfungsphänomene verantwortlich ist, wird hier derselbe Weg wie im Abschnitt 2.2 eingeschlagen. Wieder wird angenommen, dass $\hat{V}_{\text{res}}^{(2)}$ unabhängig von der kollektiven Koordinate

g_0 ist, und den Einteilchen-Zuständen durch “Anziehen” der Einteilchen-Green-Funktionen

$$g_k^{(0)}(z) \longrightarrow g_k^{(\Gamma)}(z), \quad (2.24)$$

wo $g_k^{(0)}(z)$ durch (2.15) und $g_k^{(\Gamma)}(z)$ durch (2.18) gegeben ist, mit (2.20) eine endliche Breite zugeordnet, die mit dem Abstand dieser Zustände von der Fermi-Kante und der Temperatur zunimmt. Dies führt wieder zu einer kollektiven Response-Funktion $\chi_{\text{coll}}^\Gamma(\omega)$, deren Imaginärteil auf der reellen Achse eine *kontinuierliche* Funktion von ω ist.

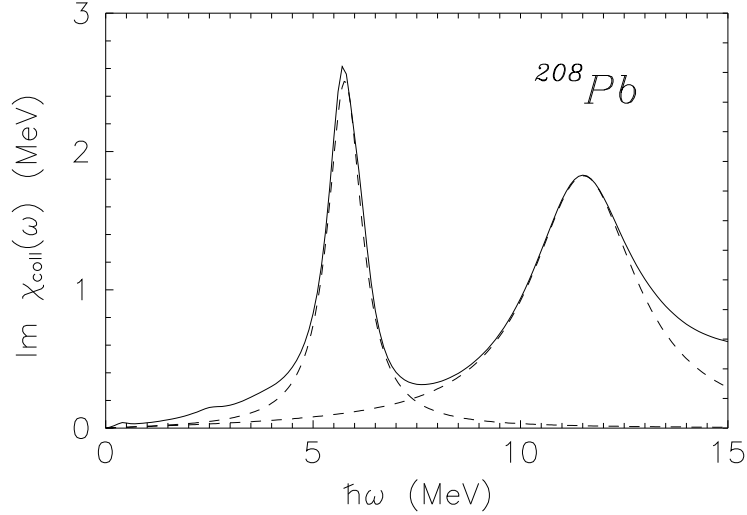


Abbildung 7.1: Anpassung von Lorentz-Funktionen $\chi_{\text{osc}}''(\omega)$ (unterbrochen) an die Peaks des Imaginärteils $(\chi_{\text{coll}}^\Gamma)''(\omega)$ der kollektiven Response-Funktion einer realistischen Rechnung für ^{208}Pb (durchgezogen). In dieser Arbeit wird nur die energetisch niedrigste Mode berücksichtigt.

Zur Beschreibung der *energetisch niedrigsten* Mode der isoskalaren Kollektivbewegung kann man den Imaginärteil des Oszillator-Response an den niedrigsten Peak von $(\chi_{\text{coll}}^\Gamma)''(\omega)$ anpassen und daraus die Parameter des lokalen harmonischen Oszillators für die Kollektivbewegung bestimmen:

$$\chi_{\text{coll}}^{\text{IPM}}(z) \longrightarrow \chi_{\text{coll}}^\Gamma(z) \longrightarrow \chi_{\text{osc}}(z) \quad (2.26)$$

Zum konkreten Vorgehen ist es günstig, den Oszillator-Response (2.25) in der Form

$$\chi_{\text{osc}}(\omega) = \frac{1}{|C|} \frac{-1}{(\omega/\varpi)^2 + 2i\eta\omega/\varpi - \text{sgn}C} \quad (7.1)$$

zu schreiben. Den Real- und Imaginärteil kann man mit der in (2.40) und (2.39) definierten effektiven Dämpfung η und der Frequenz ϖ des Oszillators folgendermaßen ausdrücken:

$$\chi'_{\text{osc}}(\omega) = \frac{1}{|C|} \frac{\text{sgn}C - (\omega/\varpi)^2}{N(\omega/\varpi)} = \chi'_{\text{osc}}(-\omega) \quad (7.2)$$

$$\chi''_{\text{osc}}(\omega) = \frac{1}{|C|} \frac{2\eta\omega/\varpi}{N(\omega/\varpi)} = -\chi''_{\text{osc}}(-\omega) \quad (7.3)$$

Im Nenner wurde dabei die Abkürzung

$$N(x) = x^4 + 2(-\text{sgn}C + 2\eta^2)x^2 + 1 \quad (7.4)$$

benutzt. $\chi_{\text{osc}}''(\omega)$ hat die typische Form einer Lorentz-Funktion. In Abb. 7.1 wird die Anpassung dieser Lorentz-Funktion an $(\chi_{\text{coll}}^\Gamma)''(\omega)$ am Beispiel einer *realistischen* Rechnung¹ illustriert. Zur Bestimmung von $\chi_{\text{coll}}^\Gamma(\omega)$ wurden dabei die Einteilchen-Energien ϵ_k mit einem deformierten Woods-Saxon-Potential berechnet. Die zugehörigen Selbstenergien wurden aus (2.19) und (2.20) bestimmt.

Nimmt man in der kollektiven Response-Funktion die Ersetzung (2.26) vor, so kann man die Säkulargleichung (2.21) auf die Gleichung

$$\left(\frac{\omega}{\varpi}\right)^2 + 2i\eta\left(\frac{\omega}{\varpi}\right) - \text{sgn}C = 0 \quad (7.5)$$

zurückführen. Als Lösung ergeben sich die beiden Frequenzen

$$\omega_{\pm} = \varpi \left(\pm \sqrt{\text{sgn}C - \eta^2 - i\eta} \right) , \quad (7.6)$$

die im Gegensatz zu den RPA-Frequenzen ϖ_{μ} , die im Kapitel 5 als Lösungen der Säkulargleichung für die Kollektivfrequenzen gefunden worden waren, einen *endlichen Imaginärteil* aufweisen. Dies impliziert, dass die kollektive Bewegung infolge des Einflusses der Restwechselwirkung nun *gedämpft* abläuft.

Es ist wichtig, an dieser Stelle zu betonen, dass mit $C = C(T, q_0)$, $\eta = \eta(T, q_0)$ und $\varpi = \varpi(T, q_0)$ bzw. $M = M(T, q_0)$ und $\gamma = \gamma(T, q_0)$ alle Transportkoeffizienten für die kollektive Kernbewegung aus einer *mikroskopischen Quantentheorie* abgeleitet werden konnten, die von der separablen Zweiteilchen-Wechselwirkung (5.2) startet. Sie alle hängen wie die Response-Funktionen selbst von der Temperatur $T = 1/\beta$ und der kollektiven Koordinate q_0 ab. Dies ist – zumindest im Hinblick auf kollektive Kernbewegung – ein entscheidender Vorteil gegenüber dem im Abschnitt 2.6 vorgestellten CLM für Quanten-Dissipation. Dort wird das Wärmebad durch einen Satz von Oszillatoren modelliert, deren spektrale Dichte nicht mit der kollektiven Koordinate variiert und keinerlei Aussage über die Transportkoeffizienten gemacht. Trotz dieses eindeutigen Nachteils wird das CLM immer wieder auch für kernphysikalische Anwendungen benutzt [FT92, BZW94, HTA96, BT98, BB02, TAK02]. Ein wichtiger Unterschied zur im Abschnitt 2.2 vorgestellten Theorie besteht darin, dass hier die in (5.2) auftretende Kopplungskonstante k und die Operatoren \hat{H} und \hat{F} nicht von der kollektiven Koordinate abhängen.

¹Abbildung von F. Ivanyuk.

7.2 Dissipative Prozesse: Modifikation der Näherungen

Nachdem im vorhergehenden Abschnitt gezeigt wurde, wie mit Hilfe der kollektiven Response-Funktion Transportkoeffizienten abgeleitet und gedämpfte Dynamik beschrieben werden kann, soll nun in den verschiedenen im Kapitel 5 besprochenen Verfahren zur Berechnung der Zustandssumme die Restwechselwirkung berücksichtigt werden.

7.2.1 Die PSPA und ihre Erweiterungen

Die SPA aus Abschnitt 5.3 enthält keinerlei Dynamik. Daher macht es auch keinen Sinn, in diese Näherung Dissipation einbauen zu wollen. Bei der PSPA werden dynamische Effekte auf dem Niveau der lokalen RPA in (5.35) berücksichtigt. Hier führt im Ausdruck (5.33) für die Entwicklungskoeffizienten zweiter Ordnung der Euklidischen Wirkung (5.16) die Ersetzung (2.26) mit $z = i\nu_r$ und der Zeitskala (2.37) auf die Form

$$\lambda_r^{(\Gamma)}(\beta, q_0) = \frac{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + \text{sgn}C \varpi^2}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + w^2} \quad (7.7)$$

statt (5.34). Es tritt nur noch eine kollektive Mode ϖ^2 statt ϖ_μ^2 auf. Die Größe

$$w^2(\beta, q_0) = \text{sgn}C \varpi^2(\beta, q_0) + \frac{|k|}{M(\beta, q_0)} \geq \text{sgn}C \varpi^2(\beta, q_0) , \quad (7.8)$$

übernimmt die Rolle der nukleonischen Frequenzen ω_{kl}^2 . Mit $\lambda_r^{(\Gamma)}$ statt λ_r erhält man in *dissipativer PSPA* wieder den in der ersten Identität von (5.35) gegebenen Korrekturfaktor [Rum00, RH01]. Die Konvergenzbedingung $\lambda_1^{(\Gamma)}(\beta, q_0) > 0$ für die zur Ableitung notwendigen q_1 -Integrale in (5.15) lautet im Fall von Dissipation explizit:

$$\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}\right)^2 + \frac{1}{\tau_{\text{kin}}} \frac{2\pi}{\hbar\beta} + \text{sgn}C \varpi^2(q_0) > 0 \quad (7.9)$$

Im Fall stabiler Moden $C > 0$ ist diese Bedingung immer erfüllt. Für instabile Moden $C < 0$ ist die *lokale* “Crossover”-Temperatur $T_0(q_0)$ durch die kleinste Nullstelle der linken Seite dieser Ungleichung gegeben. Mit der effektiven Dämpfung (2.40) lautet sie

$$T_0(q_0) = \frac{1}{\beta_0(q_0)} = \frac{\hbar\varpi(q_0)}{2\pi} \left(\sqrt{1 + \eta^2(q_0)} - \eta(q_0) \right) . \quad (7.10)$$

Die *globale* “Crossover”-Temperatur ergibt sich daraus durch

$$T_0 = \text{Max}_{q_0} T_0(q_0) . \quad (7.11)$$

Der Ausdruck in Klammern von (7.10) stimmt mit dem Kramers-Korrekturfaktor (2.48) zur Berücksichtigung von Dissipation bei Ratenprozessen im “high viscosity limit” überein [Kra40]. Eine höhere Dämpfung η führt zu einem kleineren T_0 , d.h. die “Crossover”-Temperatur eines Systems wird durch Dissipation abgesenkt (vgl. Abb. 2.2). Dieser Effekt ist aus dem CLM hinlänglich bekannt [GOW87, HTB90, Wei93]. Auch für die Temperatur $T_c > T_0$, an der der Realzeit-Formalismus für $C < 0$ zusammenbricht, war im Kapitel 3 gefunden worden, dass T_c mit zunehmender Dämpfung abnimmt.

Die effektive Bewegungsgleichung

$$M \frac{d^2 \hat{Q}}{dt^2} + \int_0^t ds \gamma(t-s) \frac{d\hat{Q}}{ds} + \frac{dV(Q)}{dQ} = \xi(t) \quad (2.55)$$

des CLM zeigt, dass in diesem einfachen Modell die konservativen und die dissipativen Kräfte unabhängig voneinander sind. Daher ist unmittelbar klar, dass dort die Anharmonizitäten, die einfach durch die Taylor-Entwicklung des Potentials $V(q)$ gegeben sind, durch dissipative Effekte nicht modifiziert werden. Bei wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen ist die Situation jedoch komplizierter: Hier sind beide Kräfte gekoppelt. Die Ersetzung (2.24) führt nicht nur zu einem endlichen Dämpfungskoeffizienten η und einer Änderung der Frequenzen der lokal harmonischen Bewegung ω_{\pm} . Bei der Erweiterung der PSPA auf ePSPA aus Abschnitt 5.4 erfahren im Zuge der Berücksichtigung der Restwechselwirkung auch die Anharmonizitäten ρ_{rst} aus (5.18) und σ_{rstu} aus (5.19) Modifikationen. Für die Quantenkorrekturen ergibt sich damit im Fall von Dissipation wieder (5.46), allerdings mit den in (7.7) definierten $\lambda_r^{(\Gamma)}$ und der Größe

$$x^{(\Gamma)} = \sqrt{\frac{\beta}{4|k|B^{(\Gamma)}}} \lambda_1^{(\Gamma)} \quad (7.12)$$

mit

$$B^{(\Gamma)} = 6\sigma_{1,1,-1,-1}^{(\Gamma)} - 9\rho_{-1,-1,2}^{(\Gamma)} \rho_{1,1,-2}^{(\Gamma)} \frac{\nu_2^2 + \nu_2/\tau_{\text{kin}} + w^2}{\nu_2^2 + \nu_2/\tau_{\text{kin}} + \text{sgn}C \varpi^2} . \quad (7.13)$$

Hier müssen die Koeffizienten $\rho_{rst}^{(\Gamma)}$ und $\sigma_{rstu}^{(\Gamma)}$ nach den im Anhang B angegebenen Formeln mit $g_k(z) = g_k^{(\Gamma)}(z)$ aus (2.18) berechnet werden.

Die LTA aus Abschnitt 5.5 ergibt sich aus der ePSPA durch sukzessiven Ausschluss der Barriere aus dem Integrationsbereich. Für die Berücksichtigung der Restwechselwirkung müssen daher für die LTA keine neuen Überlegungen angestellt werden. Die Formel (5.48) kann mit (5.46), (7.7) und (7.12) unverändert übernommen werden.

7.2.2 Das Variationsverfahren

Als Referenz-Wirkung für das Variationsverfahren bietet sich bei Berücksichtigung der Restwechselwirkung mit (7.7) in Analogie zu (5.56) die Form

$$s_{\Omega}^{q_0} = \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r>0} \frac{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + \Omega^2}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + w^2} |q_r|^2 \quad (7.14)$$

mit *nur einem* Variationsparameter Ω^2 an. Mit den Ersetzungen

$$\omega_{kl}^2(q_0) \rightarrow w^2(\beta, q_0) , \quad \varpi_{\mu}^2(\beta, q_0) \rightarrow \text{sgn}C \varpi^2(\beta, q_0) , \quad \Omega_{\mu}^2(\beta, q_0) \rightarrow \Omega^2(\beta, q_0) \quad (7.15)$$

und

$$\nu_r^2 \rightarrow \nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}}(\beta, q_0) \quad (7.16)$$

sowie der Behandlung der Anharmonizitäten aus (5.16) wie im letzten Abschnitt, kann das weitere Vorgehen vollständig aus dem Abschnitt 5.6 übernommen werden. Man erhält für die effektive freie Energie $\mathcal{F}^{\text{var}}(\beta, q_0)$ des Variationsverfahrens wieder (5.61) mit

$$\begin{aligned} \ln \zeta^{\text{var}}(\beta, q_0) &= \sum_{r>0} \ln \frac{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + w^2}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + \Omega^2} \\ &\quad - \sum_{r>0} \frac{\text{sgn}C \varpi^2 - \Omega^2}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + \Omega^2} \\ &\quad - \frac{|k|}{\beta} \sum_{r,s>0} \sigma_{rs-r-s}^{(\Gamma)} \frac{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + w^2}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}} + \Omega^2} \frac{\nu_s^2 + \nu_s/\tau_{\text{kin}} + w^2}{\nu_s^2 + \nu_s/\tau_{\text{kin}} + \Omega^2} \end{aligned} \quad (7.17)$$

anstelle von (5.62).

Man beachte, dass \mathcal{F}^{var} große Ähnlichkeiten mit dem effektiven klassischen Potential V^{FKV} des FKV aufweist, wo Dissipation mit dem CLM berücksichtigt wurde (siehe z.B. [Wei93]). Für ein System mit der Euklidischen Wirkung (5.49) ergibt sich dort die Zustandssumme (5.51) mit dem effektiven Potential (6.3). Im dissipativen Fall wird die Verschmierungsbreite (6.4) modifiziert zu

$$a^2(\beta, q_0) = \frac{2}{M\beta} \sum_{r>0} \frac{1}{\nu_r^2 + \Gamma(\nu_r)\nu_r + \Omega^2(\beta, q_0)} , \quad (7.18)$$

wobei hier die Notation $\Gamma = 1/\tau_{\text{kin}}$ übernommen wurde. Mit diesem Ausdruck ist jetzt das verschmierte Potential (6.5) zu berechnen. Mit den Formeln aus dem Abschnitt 6.1 erhält man

$$V^{\text{FKV}}(\beta, q_0) = V(q_0) - \frac{1}{\beta} \ln \zeta^{\text{FKV}}(\beta, q_0) , \quad (7.19)$$

wobei die Quantenkorrekturen in vierter Ordnung in $a(\beta, q_0)$ lauten:

$$\begin{aligned} \ln \zeta^{\text{FKV}}(\beta, q_0) &= \sum_{r>0} \ln \frac{\nu_r^2}{\nu_r^2 + \Gamma(\nu_r)\nu_r + \Omega^2(\beta, q_0)} \\ &\quad - \frac{\beta M}{2} [V'''(q_0)/M - \Omega^2(\beta, q_0)] a^2(\beta, q_0) \\ &\quad - \frac{\beta}{8} V^{(4)}(q_0) (a^2(\beta, q_0))^2 + \mathcal{O}(a^6) \end{aligned} \quad (7.20)$$

Die lokale Versuchsfrequenz $\Omega^2(\beta, q_0)$ muss durch Minimierung von V^{FKV} optimiert werden. Die Terme von (7.17) und (7.20) entsprechen sich in ihrer Bedeutung zeilenweise. Ein Unterschied zwischen dem FKV und dem Variationsverfahren für dissipative Vielteilchen-Systeme liegt darin, dass im eindimensionalen Fall die Summe (7.18) der Verschmierungsbreite alleine konvergiert. Die Konvergenz der Doppelsumme in der dritten Zeile von (7.20) gründet – wie schon im Abschnitt 5.6 bemerkt – wesentlich auf dem Verhalten der Entwicklungskoeffizienten σ_{rs-r-s} bei großen r und s (vgl. Anhang B.3).

Kurzzusammenfassung

Hier wurde das im Kapitel 5 entwickelte Näherungsschema so erweitert, dass aus der mikroskopischen Quantentheorie Transportkoeffizienten für die Kollektivbewegung extrahiert werden können, die mit der Temperatur und der kollektiven Koordinate variieren. Zugleich können dissipative Phänomene beschrieben werden. Zur Berücksichtigung der Restwechselwirkung wurden im Abschnitt 7.1 die Einteilchen-Green-Funktionen des Modells unabhängiger Teilchen wie in (2.24) “angezogen” und die energetisch niedrigste Mode der resultierenden Response-Funktion durch diejenige eines lokalen gedämpften harmonischen Oszillators angenähert (2.26).

Im Abschnitt 7.2 sind die Modifikationen für PSPA, ePSPA, LTA und das Variationsverfahren einzeln aufgeführt. Die lokalen Frequenzen der kollektiven Bewegung (7.6) erhalten infolge der Restwechselwirkung einen endlichen Imaginärteil. Die Kollektivbewegung läuft daher gedämpft ab. Die “Crossover”-Temperatur T_0 wird infolge von Dissipation abgesenkt (7.10). Im Gegensatz zum CLM beeinflussen sich bei wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen die konservativen und die dissipativen Kräfte gegenseitig.

Kapitel 8

Der Zerfall metastabiler Zustände

8.1 Die Ableitung der Ratenformel aus der SPA

Neben der Niveaudichte und thermodynamischen Größen kann über den Imaginärteil der freien Energie aus der Zustandssumme auch die Zerfallsrate metastabiler Systeme bestimmt werden [Lan67, Lan69] (siehe auch [HTB90, Wei93]). Bei tiefen Temperaturen kann dazu die Formel für die Zerfallsbreite einer Resonanz mit Energie $E = E' - i\Gamma/2$

$$R(T = 0) = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} E = \frac{\Gamma}{\hbar} \quad (8.1)$$

durch Bildung des thermischen Mittels über Anregungszustände verallgemeinert werden zu

$$R(T < T_0) = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \mathcal{F}(T) . \quad (8.2)$$

Oberhalb der “Crossover”-Temperatur ist die modifizierte Formel

$$R(T > T_0) = -\frac{2}{\hbar} \frac{T_0}{T} \operatorname{Im} \mathcal{F}(T) \quad (8.3)$$

zu nehmen [Aff81], um (ohne Dämpfung) als klassischen Grenzfall das Resultat (2.46) zu erhalten. Bei $T = T_0$ gehen beide Formeln stetig ineinander über.

Die Formeln (8.2) und (8.3) können auch für Systeme mit Dissipation verwendet werden (siehe z.B. [HTB90, Wei93]). Zu ihrer Anwendung mit den im Kapitel 7.2 entwickelten Näherungen benutzt man den allgemeinen Zusammenhang (5.52) zwischen der freien Energie und der Zustandssumme sowie für letztere die Formel (5.10). Im Folgenden wird angenommen, dass in SPA die freie Energie des nukleonischen Systems $\mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$ bei $q_0 = q_a$ ein einziges Minimum und bei $q_0 = q_b$ eine einzige Barriere hat. Beide sollen in guter Näherung parabolisch und in q_0 klar voneinander separiert sein. Die Barrierrhöhe $B^{\text{SPA}}(\beta) = \mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_b) - \mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_a)$ soll verglichen mit der Temperatur hoch sein:

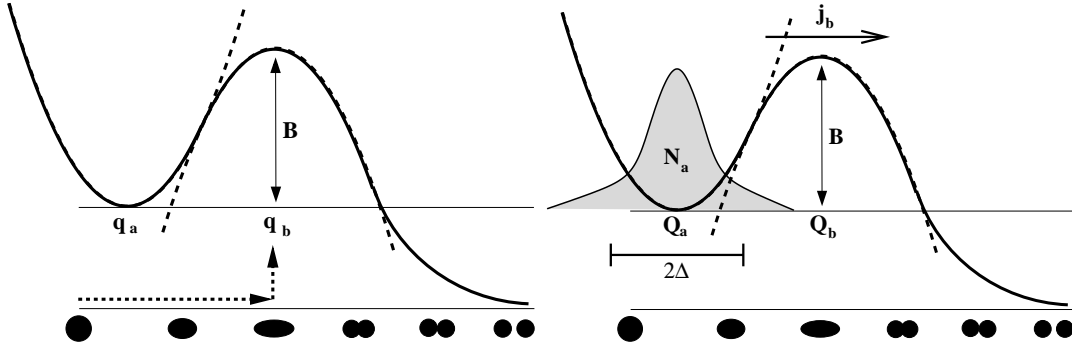


Abbildung 8.1: Die Szenarios für die Berechnung der Zerfallsrate. Links: Berechnung mithilfe des Imaginärteils der freien Energie. Die Form der Integrationskontur in der komplexen q_0 -Ebene ist als gepunktete Linie angedeutet. Rechts: Berechnung mithilfe der Kramers-Gleichung. Die Näherungssoszillatoren am Minimum und der Barriere sind mit unterbrochenen Linien angedeutet.

$\beta B^{\text{SPA}}(\beta) \gg 1$. Die weitere Struktur von \mathcal{F}^{SPA} wird vernachlässigt. Für die Quantenkorrekturen soll gelten, dass ihr Logarithmus $\ln \zeta(\beta, q_0)$ wesentlich schwächer mit q_0 variiert als $\beta \mathcal{F}^{\text{SPA}}(\beta, q_0)$. Unter diesen Voraussetzungen ist zur Auswertung des Integrals (5.10) für die Zustandssumme eine Sattelpunktsnäherung gerechtfertigt und man kann mit

$$\mathcal{Z}_a(\beta) = \frac{1}{\sqrt{|k| C_a^{\text{SPA}}(\beta)}} \exp[-\beta \mathcal{F}_a^{\text{SPA}}(\beta)] \zeta_a(\beta) \quad (8.4)$$

und

$$\mathcal{Z}_b(\beta) = \frac{i/2}{\sqrt{|k| C_b^{\text{SPA}}(\beta)}} \exp[-\beta \mathcal{F}_b^{\text{SPA}}(\beta)] \zeta_b(\beta) . \quad (8.5)$$

schreiben:

$$\mathcal{Z}(\beta) \approx \mathcal{Z}_a(\beta) + \mathcal{Z}_b(\beta) \quad (8.6)$$

Die Indizes a und b bedeuten hier und im Folgenden, dass die betreffenden Größen am Minimum und an der Barriere zu nehmen sind. Die Steifheit der freien Energie wurde wieder mit C^{SPA} bezeichnet. Um (8.5) zu erhalten, muss die Integrationskontur an der Barriere in der komplexen q_0 -Ebene längs der Richtung des steilsten Abfalls (“steepest descent”) deformiert werden [Lan67]. Dies führt zu einer Integration parallel zur positiven imaginären Achse. In Abb. 8.1 ist links die resultierende Integrationskontur in der komplexen q_0 -Ebene als gepunktete Linie eingezeichnet. Für den Imaginärteil der freien Energie des Gesamtsystems kann die Näherung $\text{Im} \mathcal{F} \approx -1/\beta \cdot \text{Im} \mathcal{Z} / \text{Re} \mathcal{Z}$ verwendet werden, die für $\text{Im} \mathcal{Z} \ll \text{Re} \mathcal{Z}$ aus der Entwicklung des Logarithmus folgt. Die Rate ergibt sich daraus in allgemeiner Form als Produkt eines klassischen Anteils und von Quantenkorrekturen (vgl. (2.53)):

$$R(\beta) = R_{\text{class}}(\beta) \cdot f_{\text{qm}}(\beta) \quad (8.7)$$

Mit der ‘‘Crossover’’-Temperatur (7.10) ergibt sich aus (8.3) oberhalb von T_0 der *klassische Anteil* zu [Rum00, RH01]:

$$R_{\text{class}}^{\text{SPA}}(\beta < \beta_0) = \frac{\varpi_b(\beta)}{2\pi} \left(\sqrt{1 + \eta_b^2(\beta)} - \eta_b(\beta) \right) \sqrt{\frac{C_a^{\text{SPA}}(\beta)}{C_b^{\text{SPA}}(\beta)}} \exp[-\beta B^{\text{SPA}}(\beta)] \quad (8.8)$$

Unterhalb von T_0 folgt aus (8.2) die Formel [RH04b]

$$R_{\text{class}}^{\text{SPA}}(\beta > \beta_0) = \frac{1}{\hbar\beta} \sqrt{\frac{C_a^{\text{SPA}}(\beta)}{C_b^{\text{SPA}}(\beta)}} \exp[-\beta B^{\text{SPA}}(\beta)], \quad (8.9)$$

wobei anzumerken ist, dass bei tiefen Temperaturen der klassische Anteil, der ausschließlich durch thermische Aktivierung zustande kommt, alleine keine gute Näherung für die Rate mehr sein kann. Dämpfung geht im Bereich $\beta > \beta_0$ in Übereinstimmung mit dem Caldeira-Leggett-Modell (CLM) [GOW87, Wei93] ausschließlich über den Faktor f_{qm} ein, der für alle Temperaturen die gleiche Form hat:

$$f_{\text{qm}}(\beta) = \frac{\zeta_b(\beta)}{\zeta_a(\beta)} \quad (8.10)$$

Während für ζ im Bereich $\beta < \beta_0$ die im Abschnitt 7.2 zusammengestellten Resultate der PSPA, der ePSPA und des Variationsverfahrens benutzt werden können, ist die Anwendbarkeit für tiefe Temperaturen auf die letztgenannten beschränkt. Die ePSPA kann bis $\beta = 2\beta_0$ verwendet werden. Für das Variationsverfahren gibt es keine formale Grenze der Anwendbarkeit. Die Qualität der aus dem Variationsverfahren abgeleiteten Rate wird im Abschnitt 8.3 für einen weiten β -Bereich an einem eindimensionalen Modell getestet.

Im Beispiel der PSPA kann man den *Quantenkorrekturfaktor*, der die Rate *erhöht*, mit (5.35) und (7.7) explizit als den Quotienten

$$f_{\text{qm}}^{\text{PSPA}}(\beta) = \left(\prod_{r>0} \frac{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}}^b(\beta) + w_b^2(\beta)}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}}^b(\beta) - \varpi_b^2(\beta)} \right) \left(\prod_{r>0} \frac{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}}^a(\beta) + w_a^2(\beta)}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}}^a(\beta) + \varpi_a^2(\beta)} \right)^{-1} \geq 1 \quad (8.11)$$

schreiben. Man beachte, dass hier die unendlichen Produkte in beiden Faktoren *konvergent* sind. Dazu ist notwendig, dass jeweils im Zähler und im Nenner der Koeffizient des in r linearen Terms identisch ist (vgl. Anhang D.3). In den Fällen der ePSPA und des Variationsverfahrens (7.17) sind die Ausdrücke entsprechend komplizierter als (8.11).

An der ‘‘Crossover’’-Temperatur (7.10) verschwindet der Nenner des ersten Faktors von (8.11) (vgl. (7.9)) und die Quantenkorrekturen der PSPA divergieren: $f_{\text{qm}}^{\text{PSPA}} \rightarrow \infty$. Hier ist die zur Ableitung der Ratenformel benutzte Voraussetzung verletzt, dass $\ln \zeta^{\text{PSPA}}$ schwach veränderlich ist. Die typische kollektive und nukleonische Frequenz ϖ bzw. w kann man folgendermaßen abschätzen (vgl. Kapitel 3):

$$1 \text{ MeV} \approx \hbar\varpi \ll \hbar w \approx \frac{41 \text{ MeV}}{A^{1/3}} = 7.7 \dots 6.2 \text{ MeV} \quad \text{für} \quad A = 150 \dots 290 \quad (8.12)$$

Bereits bei $T \approx \hbar w/2$ spielen unter diesen Bedingungen die Quantenkorrekturen (8.11) keine Rolle mehr, weil dort sowohl ϖ^2 als auch w^2 gegenüber $\nu_r^2 = (2\pi T r/\hbar)^2 \approx (w\pi r)^2$ vernachlässigbar sind und somit gilt: $f_{\text{qm}}^{\text{PSPA}} \rightarrow 1$.

In [FT92, HI99] wurde mit $\Gamma = 1/\tau_{\text{kin}}$ die Ad-hoc-Verallgemeinerung

$$f_{\text{qm}}^{\text{CLM}} = \prod_{r>0} \frac{\nu_r^2 + \Gamma(\nu_r)\nu_r + \varpi_a^2}{\nu_r^2 + \Gamma(\nu_r)\nu_r - \varpi_b^2} \longrightarrow \prod_{r>0} \frac{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}}^a + \varpi_a^2}{\nu_r^2 + \nu_r/\tau_{\text{kin}}^b - \varpi_b^2} \quad (8.13)$$

des Quantenkorrekturfaktors des CLM auf Systeme mit *koordinatenabhängigem Reibungs- und Trägheitskoeffizienten* verwendet. Für $\tau_{\text{kin}}^a \neq \tau_{\text{kin}}^b$ kann mit dieser Formel eine *logarithmische Divergenz* nur vermieden werden, wenn $1/\tau_{\text{kin}} = \gamma/M$ selbst wie z.B. im Drude-Modell (3.10) frequenzabhängig ist und für große $|z|$ mindestens wie $1/|z|$ verschwindet (vgl. die Konvergenz-Bedingung (D.6)). In [HI99] wurde eine solche Divergenz bei Ohm'scher Dämpfung (frequenzunabhängiges γ) durch Verwendung des arithmetischen Mittels $1/\tau_{\text{kin}} = 1/2\tau_{\text{kin}}^a + 1/2\tau_{\text{kin}}^b$ umgangen. Aufgrund seiner Struktur als Quotient zweier auch für koordinatenabhängige Trägheit und Reibung konvergenter Produkte zeichnet sich der hier aus der PSPA abgeleitete Korrekturfaktor (8.11) gegenüber (8.13) aus. Dies gilt ebenfalls für die Verallgemeinerungen von (8.11), die man unter Verwendung von ePSPA oder dem Variationsverfahren erhält.

Die Formel (8.8) kann unter Benutzung des allgemeinen Zusammenhangs (2.39) zwischen Steifheit, Trägheit und Frequenz eines harmonischen Oszillators in einer intuitiveren Form geschrieben werden:

$$R_{\text{class}}^{\text{SPA}}(\beta < \beta_0) = \frac{\varpi_a(\beta)}{2\pi} \sqrt{\frac{M_a(\beta)}{M_b(\beta)}} \left(\sqrt{1 + \eta_b^2(\beta)} - \eta_b(\beta) \right) \exp[-\beta B^{\text{SPA}}(\beta)] \cdot f_C(\beta) \quad (8.14)$$

Der klassische Anteil der Rate ist proportional zur Frequenz ϖ_a , die angibt, wie oft das System je Zeiteinheit am Minimum gegen die Barriere anzulaufen versucht, und enthält den Arrhenius-Faktor, der bei vielen Phänomenen auftritt, die durch thermische Aktivierung zustande kommen. Der Faktor $\sqrt{M_a/M_b}$ wird im nächsten Abschnitt ausführlich besprochen. Der Kramers'sche Korrekturfaktor in Klammern beschreibt die Effekte von Dämpfung und Diffusion, die die Rate absenken (vgl. (2.48) und Abb. 2.2). Der Korrekturfaktor

$$f_C(\beta) = \sqrt{\frac{C_b(\beta)}{C_a(\beta)} \frac{C_a^{\text{SPA}}(\beta)}{C_b^{\text{SPA}}(\beta)}} \quad (8.15)$$

ist im Allgemeinen von eins verschieden, da sich die Steifheit C^{SPA} auf die freie Energie \mathcal{F}^{SPA} bezieht und das mittels (2.39) eingeführte C aus der Response-Funktion des gedämpften Oszillators (2.25) extrahiert wird. Im Grenzfall extrem langsamer Kollektivbewegung ("zero frequency limit" (ZFL)), als die die Spaltmode im Allgemeinen angesehen wird, gilt $C \rightarrow C^{\text{SPA}}$ [Hof97] und damit $f_C \rightarrow 1$.

Für die Gültigkeit der Formel (8.3) liegt kein streng mathematischer Beweis vor. Der zusätzliche Faktor T_0/T wurde in der Literatur kontrovers diskutiert und sogar gänzlich in Zweifel gezogen [WL85]. Das daraus abgeleitete Endergebnis (8.7) mit (8.14) und (8.10) für die Zerfallsrate kann aber mit verschiedenen anderen Methoden verifiziert werden. In [Ing88, HIT93] wurde es ohne den Faktor $\sqrt{M_a/M_b}$ aus der quantenmechanischen Kramers-Gleichung (KG) (2.32) in lokal harmonischer Näherung abgeleitet. Ebenso kann demonstriert werden, dass das Endergebnis für die Rate auch aus der multidimensionalen quantenmechanischen “Transition State Theory” (TST) folgt (siehe z.B. [Wei93]).

8.2 Der Einfluss koordinatenabhängiger Trägheit

Bei aus dem CLM für dissipative Quantensysteme abgeleiteten Ratenformeln fehlt üblicherweise der Faktor $\sqrt{M_a/M_b}$, der aus der SPA und ihren Erweiterungen folgt. Im CLM wird fast immer $M = \text{const.}$ angenommen. Nur in [HTA96] wurde der Korrekturfaktor im Rahmen des CLM benutzt. Die tatsächlichen Rechnungen wurden jedoch auch dort mit konstanter Trägheit durchgeführt.

Im Kapitel 9 werden wichtige Konsequenzen koordinatenabhängiger Trägheit, die mit dem Faktor $\sqrt{M_a/M_b}$ berücksichtigt wird, für die thermische Kernspaltung diskutiert. Im Grenzfall sehr starker Dämpfung $\eta_b \gg 1$ (Smoluchowski-Limes) reduziert sich der nicht-exponentielle Anteil von (8.14) mit dem Grenzwertverhalten (2.48) des Kramers-Faktors unter Vernachlässigung von f_C auf

$$R_{\text{class}}^{\text{SPA}} \exp(\beta B^{\text{SPA}}) \longrightarrow \frac{\varpi_a}{2\pi} \sqrt{\frac{M_a}{M_b}} \frac{1}{2\eta_b} = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{C_a|C_b|}}{\gamma_b} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{C_a}{|C_b|}} \frac{1}{\tau_{\text{coll}}^b}. \quad (8.16)$$

Ohne den Faktor $\sqrt{M_a/M_b}$ würde die Trägheit nicht wie in den letzten beiden Versionen komplett aus dieser Gleichung für die Zerfallsrate herausfallen, sondern weiterhin die Dynamik beeinflussen. Dies wäre ein Widerspruch zur Smoluchowski-Gleichung (2.30)¹, in der weder eine Trägheit noch eine kinetische Energie auftritt. Das Resultat (8.16) kann auch direkt aus dieser Gleichung abgeleitet werden [HIRY01]. Da sie die Form einer Kontinuitätsgleichung aufweist, kann die Berechnung der Rate auch für $\gamma = \gamma(Q)$ völlig analog zum Standardfall $\gamma = \text{const}$ durchgeführt werden (siehe z.B. [Ris89]).

Eine Ratenformel mit der Struktur (8.14) wurde bereits in [Str73] abgeleitet. Allgemein kann die Rate aus dem Quotienten eines *stationären* Stroms über die Barriere $j(Q_b)$ und der Wahrscheinlichkeit $N(Q_a)$, das System in der Nähe des Minimums zu finden berechnet

¹Man beachte die dortige Bemerkung zur Gültigkeit dieser Gleichung.

werden (siehe Abb. 8.1 rechts):

$$R = \frac{j(Q_b)}{N(Q_a)} = \frac{\int \frac{dP}{2\pi\hbar} \frac{P}{M(Q_b)} f(Q_b, P)}{\int_{Q_a-\Delta}^{Q_a+\Delta} dQ \int \frac{dP}{2\pi\hbar} f(Q, P)} \quad (8.17)$$

Als Näherung für die Phasenraumdichte wurde in [Str73] die Lösung (A.23) der Kramers-Gleichung (KG) mit endlichem stationärem Strom im klassischen Limes benutzt. Die Abschätzung der Wahrscheinlichkeit, das System am Minimum zu finden, erfolgte durch Multiplizieren der zugehörigen Ortsraumdichte

$$n(Q, t) = \int \frac{dP}{2\pi\hbar} f(Q, P, t) \quad (8.18)$$

am Ort des Minimums mit einer effektiven Länge $\sqrt{2\pi\Sigma_{QQ}^{st,a}}$, die durch die Gleichgewichtsfluktuationen der Koordinate gegeben ist.

In [HIRY01] wurde der Faktor aus (8.17) und der klassischen KG (2.27) hergeleitet. Zur Auswertung der Integrale für $j(Q_b)$ und $N(Q_a)$ wurde dabei statt einer tatsächlich globalen Lösung $f_{\text{glob}}(Q, P)$ der KG mit stationärem Strom eine *Näherung* verwendet, die durch Aneinanderfügen der Lösungen (A.21) und (A.23) des stabilen und instabilen harmonischen Oszillators am Minimum und der Barriere von $V(Q)$ konstruiert wurde. Fordert man, dass die Ortsraumdichte (8.18) dabei an einem intermediären Punkt \bar{Q} mit $Q_a < \bar{Q} < Q_b$ stetig ist, folgt unter den üblichen Annahmen, die eine Sattelpunktsnäherung rechtfertigen, für die Rate ein Resultat der Form (8.14).

8.3 Ein Test der Ratenformel an einem eindimensionalen Modell

Im Abschnitt 6.2 wurde gezeigt, dass die freie Energie \mathcal{F}^{SPA} des Lipkin-Meshkov-Glick-Modells (LMGM) für $\kappa > 1$ bei tiefen Temperaturen eine Barriere ausbildet. Dennoch beschreibt das LMGM ein *gebundenes* System (siehe Abb. 6.3). Für dieses macht es allenfalls Sinn, wie beim Doppeltopf-Potential eine Rate für den Übergang von einem Minimum zum anderen zu berechnen. Eine Rate im Sinne der Spaltrate eines instabilen Systems kann man aus dem LMGM nicht erhalten. Daher werden in diesem Abschnitt Analoga der Ratenformeln (8.7) bis (8.10) an einem *eindimensionalen* Modell mit der Euklidischen Wirkung (5.49) für SPA und PSPA sowie das Variationsverfahren getestet. Zwar wurden in [Kle93, KK94, KM96] Erweiterungen des Feynman-Kleinert-Variationsverfahrens (FKV) [FK86] bei $T = 0$ auf Tunnelphänomene ohne Dissipation angewendet und bei eindimensionalen metastabilen Modellsystemen gute Übereinstimmung der Imaginärteile der Energieeigenwerte mit exakten Resultaten gefunden. Dazu müssen zusätzlich zum eigentlichen

FKV bei hohen Barrieren WKB und bei niedrigen Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie durchgeführt werden. Allerdings ist die in [KM96] angekündigte “unmittelbare Anwendung” auf dissipative Systeme bisher offenbar ausgeblieben. Meines Wissens wird in der vorliegenden Arbeit für dissipative Systeme zum ersten Mal ein Vergleich des Temperaturverhaltens der unter Verwendung des FKV berechneten Zerfallsrate mit in der Literatur vorhandenen Ergebnissen angestellt.

Im Folgenden soll ein Teilchen der Masse M im Potential

$$V(q) = \frac{M}{2} \varpi^2 q^2 \left(1 - \frac{q}{Q}\right) \quad (8.19)$$

studiert werden. Für dieses Problem wurde im Rahmen des CLM die Zerfallsrate im gesamten Temperaturbereich $T = 0 \dots \infty$ und für unterschiedlichste Dämpfungsstärken ausführlich untersucht [CL83, LO83, LO84, GWH84, GW84, GOW87]. Für die beiden Grenzfälle $\eta \ll 1$ und $\eta \gg 1$ der effektiven Dämpfungsstärke (2.40) konnten für Ohm’sche Dämpfung und $T \rightarrow 0$ sogar analytische Ergebnisse angegeben werden, die die volle Nichtlinearität des dynamischen Pfades enthalten, der die Euklidische Wirkung für $T < T_0$ minimiert (vgl. Bemerkungen im Abschnitt 5.7). Dieser Pfad beschreibt eine Bewegung im invertierten Potential $-V(q)$: Bei $T = 0$ startet das System zur (Imaginär-)Zeit $\tau = 0$ bei $q = 0$ und wird bei $q = Q$ reflektiert. Zur Zeit $\tau = \hbar\beta \rightarrow \infty$ kehrt das System nach $q = 0$ zurück. Aufgrund dieses Verhaltens wird dieser Pfad auch “*Bounce-Lösung*” genannt.

Die wichtigsten Formeln des FKV sind in den Abschnitten 5.6 und 6.1 zusammengestellt. Zur Übernahme der im Abschnitt 8.1 für ein wechselwirkendes Vielteilchen-System entwickelten Ratenformeln auf den hier diskutierten eindimensionalen Fall hat man das Potential $V(q)$ mit \mathcal{F}^{SPA} und dessen Steifheit $V''(q)$ mit C^{SPA} zu identifizieren:

$$R_{\text{class}}(\beta < \beta_0) = \frac{\sqrt{|V_b''|/M}}{2\pi} \left(\sqrt{1 + \eta^2} - \eta\right) \sqrt{\frac{V_a''}{|V_b''|}} \exp(-\beta B) \quad (8.20)$$

$$R_{\text{class}}(\beta > \beta_0) = \frac{1}{\hbar\beta} \sqrt{\frac{V_a''}{|V_b''|}} \exp(-\beta B) \quad (8.21)$$

$B = V_b - V_a$ ist hier wieder die (temperaturunabhängige) Barrierenhöhe. Für die Quantenkorrekturen (8.10) sind die im Abschnitt 6.1 angegebenen Formeln zu benutzen. Leider ist das FKV auf das Potential (8.19) in der hier vorgestellten Form nicht direkt anwendbar. Die Reihenentwicklung des verschmierten Potentials (6.5) enthält nur Beiträge gerader Ordnung, so dass sich die Anharmonizität des kubischen Potentials nicht bemerkbar macht. Es würde somit nur das gleiche Approximationsniveau wie mit der PSPA erreicht, auf die sich das FKV für harmonische Potentiale reduziert. Unter Umständen würde hier die Einführung eines zweiten Variationsparameters weiterhelfen, der die Position des Minimums des Variationsoszillators kontrolliert [KM96]. Dieser Ansatz wird hier nicht verfolgt, da es eine einfachere Möglichkeit gibt, sich Aufschluss über die Qualität der Ratenformel mit FKV zu verschaffen.

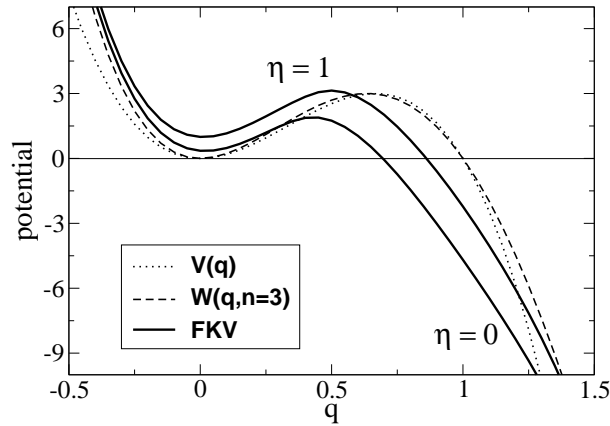


Abbildung 8.2: Die metastabilen Potentiale in einer Dimension. q ist in Einheiten von Q und die Potentiale sind in Einheiten von $\hbar\varpi$ angegeben. Die effektiven Potentiale $W^{\text{FKV}}(\beta, q)$ sind für $\beta = 2\beta_0$ und zwei verschiedene Dämpfungsstärken $\eta = 0$ und $\eta = 1$ angegeben.

Im Folgenden wird das Potential vierter Ordnung

$$W(q, n, C') = C' \frac{M}{2} \varpi^2 q^2 \left(1 - \frac{q}{Q}\right) \left(1 - \frac{q}{nQ}\right) \quad (8.22)$$

betrachtet, das zwar ein gebundenes System beschreibt, aber durch Wahl der Parameter n und C' so eingerichtet werden kann, dass es den Barrierenbereich von (8.19) in guter Näherung approximiert. $W(q, n, C')$ hat wie $V(q)$ ein Minimum an der Stelle $q = 0$ und eine Nullstelle bei $q = Q$. Damit ist die Breite der Barriere in beiden Fällen gleich. W hat eine zusätzliche Nullstelle bei $q = nQ$ und seine übrigen Extrema liegen bei $q_{\pm} = 3(n+1)/8 \cdot (1 \pm \sqrt{1 - 32n/9(n+1)^2})$. Durch die Wahl $C' = V(q = q_b = 2Q/3)/W(q = q_-, n, 1)$ bekommt man auch für die Barrierenhöhe $W(q_-) = V_b = 2/27 M\varpi^2 Q^2$ den gleichen Wert wie für $V(q)$, so dass der dominante Arrhenius-Faktor in beiden Fällen den gleichen Beitrag zur Rate liefert. Die für Tunnelprobleme wichtigsten Eigenschaften von $V(q)$ – Barrierenbreite und -höhe – werden von $W(q)$ also exakt reproduziert. Für $n \gg 1$ liegen auch die Barriertoppe an der selben Stelle. Abb. 8.2 zeigt die Barrierenregion von $V(q)$ und $W(q, n = 3)$. Das globale Minimum von $W(q, n = 3)$ ist nicht in Abb. 8.2 zu sehen. Es liegt bei $q_+ \approx 2.4Q$ und hat eine Tiefe $-W(q_+) \approx 42\hbar\varpi \gg V_b = 3\hbar\varpi$. Damit ist Rückfluss aufgrund thermischer Aktivierung, der für $W(q)$ im Prinzip existiert und für $V(q)$ gänzlich fehlt, stark unterdrückt. In der Barrierenregion nähert $W(q, n = 3)$ das metastabile Potential $V(q)$ hinreichend gut an, um als Ersatzpotential zur Behandlung der Zerfallsrate benutzt werden zu können.

In Abb. 8.2 ist auch das zu $W(q, n = 3)$ gehörige effektive klassische Potential $W^{\text{FKV}}(\beta, q)$ aus (6.3), das Quantenkorrekturen enthält, für die Dämpfungsstärken $\eta = 0$ und $\eta = 1$

bei $\beta = 2\beta_0$ dargestellt. Die ortsabhängige Verschmierungsbreite (6.4), mit der $W(q)$ dabei ausgeschmiert wird, ist an der Barriere am größten ($a(2\beta_0, q_b) \approx 0.6Q$) und sonst überall klein (z.B. $a(2\beta_0, 0) \approx 0.1Q$). Höhe und Steifheit der Barriere von $W^{\text{FKV}}(\beta, q)$ sind daher *kleiner* als die von $W(q, n = 3)$ und $V(q)$.

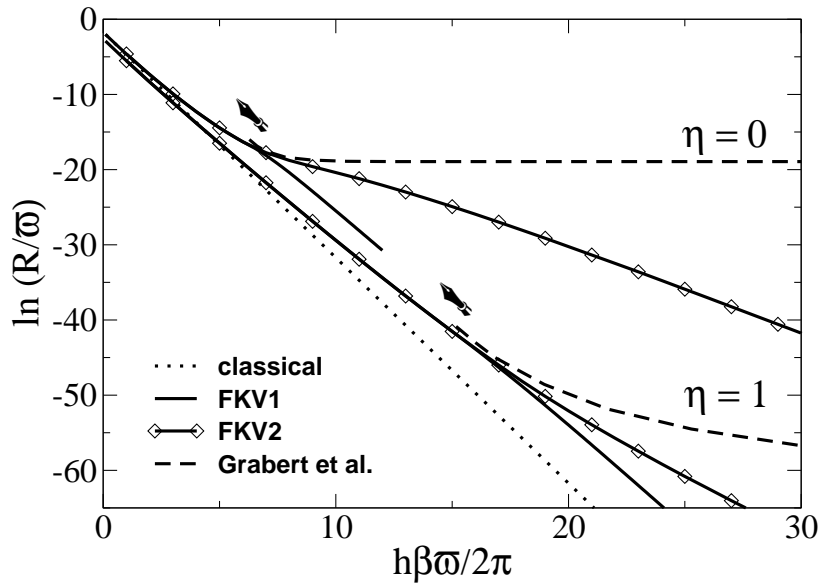


Abbildung 8.3: Der Logarithmus der Zerfallsrate als Funktion der inversen Temperatur. Das FKV ist im “Crossover”-Bereich eine brauchbare Näherung. Bei sehr tiefen Temperaturen ist keines der auf dem FKV basierenden Verfahren (für Einzelheiten siehe Text) in der Lage, das Quantentunneln korrekt zu beschreiben. Die Rate wird dramatisch unterschätzt. Die Pfeile deuten auf die inverse “Crossover”-Temperatur β_0 , an der die PSPA zusammenbricht.

In Abb. 8.3 ist die β -Abhängigkeit der Ratenformeln bei zwei verschiedenen Dämpfungsstärken in logarithmischer Darstellung gezeigt. Dabei werden einerseits für den klassischen Anteil die Formeln (8.20) und (8.21) mit dem Ersatzpotential $W(q, n = 3)$ statt $V(q)$ verwendet und die in (8.7) eingehenden Quantenkorrekturen mit (8.10) und (7.20) berechnet. Der kleine Unterschied im klassischen Anteil der Rate, der von der Benutzung des Ersatzpotentials $W(q, n = 3)$ herrührt, ist auf der verwendeten Skala nicht sichtbar. Diese Näherung wird hier als “FKV1” bezeichnet und ist in der Abbildung als durchgezogene Linie eingetragen. Andererseits wird die Sattelpunktsnäherung direkt auf das Potential

$W^{\text{FKV}}(\beta, q)$ angewendet. Die Rate wird bei diesem Zugang aus den Formeln

$$R(\beta < \beta_0) = \frac{\sqrt{|(W_b^{\text{FKV}})''|/M}}{2\pi} \left(\sqrt{1 + \eta^2} - \eta \right) \sqrt{\frac{(W_a^{\text{FKV}})''}{|(W_b^{\text{FKV}})''|}} \exp(-\beta B^{\text{FKV}}) \quad (8.23)$$

$$R(\beta > \beta_0) = \frac{1}{\hbar\beta} \sqrt{\frac{(W_a^{\text{FKV}})''}{|(W_b^{\text{FKV}})''|}} \exp(-\beta B^{\text{FKV}}) \quad (8.24)$$

berechnet, wo $B^{\text{FKV}} = W_b^{\text{FKV}} - W_a^{\text{FKV}} < B$ die (temperaturabhängige) Barrierenhöhe des effektiven klassischen Potentials ist (vgl. Abb. 8.2). Diese Näherung wird hier ‘‘FKV2’’ genannt und ist in Abb. 8.3 als durchgezogene Linie mit Symbolen eingezeichnet. Man beachte, dass im Fall von FKV2 Quanteneffekte nicht über einen Korrekturfaktor (8.10) eingehen, sondern bereits im Potential $W^{\text{FKV}}(\beta, q)$ stecken. Ebenfalls in Abb. 8.3 eingetragen ist (für alle β) die klassische Rate (8.21), die der SPA entspricht ($\zeta^{\text{SPA}} \equiv 1$). Für tiefe Temperaturen $\beta > \beta_0$ ist auch das von H. Grabert, P. Olschowski und U. Weiss im Rahmen der exakten numerischen Behandlung der dynamischen ‘‘Bounce’’-Lösung gefundene Resultat gezeigt (gestrichelt). Die dazu benötigten Größen wurden aus Tab. I und II von [GOW87] entnommen.

Die klassische Rate zeigt das rein exponentielle Verhalten des Arrhenius-Faktors und die PSPA ist formal nur für $\beta < \beta_0$ anwendbar. Die inverse ‘‘Crossover’’-Temperatur, an der die Rate der PSPA divergiert (vgl. (8.13)) ist für beide Dämpfungsstärken durch einen Pfeil markiert. Für FKV1 und FKV2 gibt es keine Temperatur, an der die Näherung zusammenbricht. Für hohe Temperaturen und im ‘‘Crossover’’-Bereich selbst geben sie die exakte Rechnung sehr gut wieder. Für tiefe Temperaturen ($\beta \gg \beta_0$) liefern sie für die Rate jedoch sehr schlechte Ergebnisse. Statt für $\beta \rightarrow \infty$ wie die Rate der ‘‘Bounce’’-Lösung gegen einen endlichen Wert zu konvergieren, ähnelt das Verhalten qualitativ demjenigen der klassischen Rate und fällt exponentiell ab. FKV2 enthält mehr Information über die Quanteneffekte und unterschätzt die Rate bei tiefen Temperaturen daher weniger dramatisch als FKV1. Insbesondere im ‘‘Crossover’’-Bereich bei $\eta = 0$ ist dieser Effekt nicht unwesentlich.

Es besteht die Möglichkeit, dass die Ergebnisse, die das FKV bei tiefen Temperaturen für die Rate liefert, durch numerisches Ausführen des q_0 -Integrals in (5.10) bzw. (5.51) weiter verbessert werden können. Auch hier muss an der Barriere die besprochene Deformation der Integrationskontur vorgenommen werden. Bei tiefen Temperaturen gilt unter Umständen die der Sattelpunktsnäherung zugrunde liegende Annahme, dass $\ln \zeta^{\text{FKV}}(\beta, q_0)$ wesentlich schwächer veränderlich ist als $\beta W(q_0)$ nicht mehr. Die Struktur von $W^{\text{FKV}}(\beta, q_0)$ kann folglich erheblich von $W(q_0)$ abweichen. Andererseits wäre es zuviel verlangt, auch bei sehr tiefen Temperaturen vom FKV noch brauchbare Ergebnisse zu erwarten. Wie schon im Abschnitt 5.7 angemerkt, wird auch beim FKV vom Hochtemperatur-Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ gestartet und versucht, die Quantenfluktuationen um die statischen Pfade q_0 mithilfe des ausgeschmierten Potentials $W^{\text{FKV}}(\beta, q_0)$ in einer semiklassischen Näherung zu berücksichtigen. Tatsächlich wird im Bereich $\beta \geq \beta_0$ jedoch die Euklidische Wirkung der *dynamischen* ‘‘Bounce’’-Lösung $q_B(\tau)$ kleiner als diejenige des *statischen* Pfades $q(\tau) \equiv q_b$. Daher darf die

in den gestrichelten Kurven von Abb. 8.3 berücksichtigte “Bounce”-Lösung als dominanter Beitrag bei sehr tiefen Temperaturen nicht länger vernachlässigt werden.

Für die Anwendung auf wechselwirkende Vielteilchen-Systeme, wie sie in der Kernphysik vorliegen, bedeutet die Tatsache, dass das FKV bei Temperaturen $T \ll T_0$ keine brauchbare Abschätzung für die Rate mehr liefert *nicht*, dass mit der Anwendung des Variationsverfahrens aus Abschnitt 5.6 zur Berechnung der Rate kein Fortschritt erzielt worden wäre. Bisher konnten Quantenkorrekturen zur Zerfallsrate durch thermische Aktivierung unter Verwendung von imaginärer Zeit nur oberhalb der “Crossover”-Temperatur $T_0 = 1/\beta_0$ abgeschätzt werden [FT92, HI99]. Im Realzeit-Formalismus war die Anwendbarkeit sogar auf den Bereich $T > T_c > T_0$ beschränkt [HIT93]. Das Variationsverfahren liefert nun eine praktisch anwendbare Methode, die es (i) ermöglicht, mikroskopischen Input für die Transportkoeffizienten zu verwenden, und die (ii) im “Crossover”-Bereich $T \approx T_0$ noch brauchbare Resultate für die Rate liefert.

Kurzzusammenfassung

Im Kapitel 8 konnte für metastabile *wechselwirkende Vielteilchen-Systeme* für die Zerfallsrate die Formel (8.7) abgeleitet werden. Wie die bereits bekannte Formel (2.53) für eindimensionale Systeme faktorisiert sie in einen klassischen Anteil und Quantenkorrekturen. Für den klassischen Anteil erhält man ober- und unterhalb der “Crossover”-Temperatur T_0 die Formeln (8.8) und (8.9). Für die Quantenkorrekturen (8.10) zur reinen thermischen Aktivierung, die bei Kernen für $T \lesssim 2$ MeV die Rate erhöhen, kann man in ihrem jeweiligen Gültigkeitsbereich die verschiedenen in den Kapiteln 5 und 7 entwickelten Näherungen verwenden.

Der hier entwickelte Quantenkorrekturfaktor zeichnet sich im Fall von koordinatenabhängigen Transportkoeffizienten gegenüber der Verallgemeinerung des CLM (8.13) dadurch aus, dass keine zusätzlichen Annahmen oder Näherungen unternommen werden müssen, um Konvergenz zu garantieren. Zudem tritt mit $\sqrt{M_a/M_b}$ eine klassische Korrektur auf, die den Effekt koordinatenabhängiger Trägheit berücksichtigt. Sie sorgt dafür, dass die Trägheit die Dynamik im Smoluchowski-Grenzfall nicht mehr beeinflusst.

Im Abschnitt 8.3 wurde die aus dem Variationsverfahren (Abschnitt 5.6) folgende Rate an einem eindimensionalen Modell in einem weiten Temperaturbereich mit einer Rechnung verglichen, die die dynamische “Bounce”-Lösung exakt berücksichtigt. Das Ergebnis ist in Abb. 8.3 dargestellt. Im “Crossover”-Bereich, wo die PSPA schlechte Ergebnisse liefert ($\beta \lesssim \beta_0$) bzw. nicht mehr anwendbar ist ($\beta \gtrsim \beta_0$), erweist sich das Variationsverfahren als sehr gute Näherung. Bei sehr tiefen Temperaturen liefert die “Bounce”-Lösung den maßgeblichen Beitrag zur Zerfallsrate. Dieser kann mit dem auf einer Entwicklung um statische Pfade aufbauenden Variationsverfahren nicht beschrieben werden.

Kapitel 9

Anwendung der Ratenformel auf die thermische Kernspaltung

Im vorhergehenden Kapitel wurden Ratenformeln für den Zerfall metastabiler Vielteilchensysteme unter Berücksichtigung dissipativer Effekte abgeleitet. Hier wird nun darauf eingegangen, wie man mit deren Hilfe auf die Stärke der Dämpfung der kollektiven Dynamik zurückschließen kann. Dazu wird experimentell bei der Spaltung von Atomkernen bei endlicher Temperatur die Multiplizität leichter Teilchen betrachtet, d.h. deren je Spaltereignis evaporierte Anzahl [HHR89, HR92, TB93]:

$$\nu_i = \frac{\Gamma_i}{\Gamma_{\text{fis}}} \quad (9.1)$$

Der Index i steht hier für die Art der gemessenen Teilchen, z.B. $i = \gamma, n$. Die Breiten Γ_i werden im Rahmen des “statistischen Modells” berechnet. Im Code CASCADE [Pü77] und Fortentwicklungen (siehe z.B. [BHM⁺91]) wird dabei für die Neutronenabdampfung eine Formel verwendet, die unter starken Annahmen zu

$$\Gamma_n = \hbar R_n \sim T^2 \exp(-S_n/T) \quad (9.2)$$

vereinfacht werden kann [SJ87]. S_n ist dabei die Neutronen-Separationsenergie. Benutzt man für die Spaltrate R_{fis} die Formel (2.43), so stellt man fest, dass bei nicht zu kleinen thermischen Anregungen die gemessene Multiplizität von der Vorhersage (9.1) abweicht: Es werden pro Spaltung *mehr* Neutronen gemessen. Dies kann durch die Tatsache erklärt werden, dass es sich bei Kernspaltung um eine *gedämpfte* Mode handelt. In diesem Fall muss zur Berechnung von R_{fis} statt der Formel (2.43) des statistischen Modells die Formel (8.8) oder (8.14) herangezogen werden, bei der die Rate gegenüber dem ungedämpften Fall reduziert ist. Aus dem Vergleich mit der experimentell bestimmten Neutronen-Multiplizität kann nun versucht werden, Kenntnis über die Größenordnung der Dämpfung zu erhalten. Im Folgenden wird gezeigt, dass dabei jedoch *nicht* der gesamte Unterschied der effektiven

Dämpfung η_b allein zugeschrieben werden darf. Vielmehr erhält man Aufschluss über eine bestimmte *Kombination* von Transportkoeffizienten.

9.1 Der “onset of dissipation”

Aus der Auswertung der Neutronen-Multiplizität wird der Rückschluss gezogen, dass die Dämpfung der kollektiven Kernbewegung bei kleinen thermischen Anregungen klein ist und mit der Temperatur ansteigt [HBD⁺94, PT94, BBD⁺99, DSM⁺00, RK01]. In [TB93] wurde in einer systematischen Studie festgestellt, dass bei einer Vielzahl spaltender Systeme die Multiplizität vor der Spaltung abgedampfter leichter Teilchen (Neutronen, geladene Teilchen und γ 's) nur unterhalb einer Schwellentemperatur T_{thresh} mit der Vorhersage des statistischen Modells übereinstimmt. Für den Massenbereich $A = 140 \dots 260$ wurde außerdem gefunden (vgl. Fig. 4 von [TB93]), dass das Verhältnis dieser Schwellentemperatur zur (temperaturabhängigen) Barrierenhöhe fast nicht von A abhängt:

$$\left. \frac{T}{2B(T)} \right|_{\text{thresh}} \simeq 0.13 \quad (9.3)$$

Die Division durch den Faktor 2 erweist sich dabei als für das weitere Vorgehen günstig. Für die Schwellentemperatur von ^{224}Th werden in Tab. I von [TB93] zwei im Rahmen der Fehlergrenzen übereinstimmende Werte angegeben:

$$T_{\text{thresh}} = 1.08 \pm 0.08 \text{ MeV [HR92]} \quad \text{bzw.} \quad T_{\text{thresh}} = 1.09 \dots 1.22 \text{ MeV [TCH⁺87]} \quad (9.4)$$

Zur Interpretation des Verhaltens bei T_{thresh} mit der hier abgeleiteten Formel (8.14) [HIRY01] muss kurz rekapituliert werden, unter welchen Umständen diese zur Berechnung der Zerfallsrate herangezogen werden darf:

- Die *Temperatur* des Systems muss am Minimum und an der Barriere gleich sein.
- Die *Barriere* muss hinreichend ausgeprägt sein, dass eine Sattelpunktsnäherung gerechtfertigt ist (vgl. Abschnitt 8.1). Insbesondere bedeutet dies, dass die Barrierenhöhe groß gegen die Temperatur ist: $B \gg T$.

Im Fall von Kernspaltung nimmt die Barrierenhöhe mit ansteigender Temperatur ab. Daher liefert diese Bedingung eine *obere Grenztemperatur* der Anwendbarkeit. Für den Kern ^{224}Th gilt im Tröpfchenmodell $B = 6.2 \text{ MeV}$ bei $T = 0$ und $B = 2.1 \text{ MeV}$ bei $T = 4 \text{ MeV}$. Bei $T = 3 \text{ MeV}$ gilt noch $B/T \approx 1.3$ und die Annahme über eine “hohe” Barriere ist einigermaßen gerechtfertigt.

- Die effektive Dämpfung muss stark genug sein, dass am Minimum thermisches Gleichgewicht angenommen werden kann: $\eta_b \geq T/2B$.

Unter Verwendung der effektiven Dämpfungsstärke des mikroskopischen Modells aus Kapitel 3 und der Barrierenhöhe des Tröpfchenmodells ist diese Bedingung bei ^{224}Th für $T \geq 0.5$ MeV erfüllt. Hier verschwinden gerade die Paarungskorrelationen, welche die Dämpfung erheblich verringern (vgl. (3.3) und [IH99, HI99]). Unterhalb dieser *unteren Grenztemperatur* muss zur Berechnung der Rate die Kramers’sche Formel für schwache Dämpfung (2.44) benutzt werden.

Das universelle Verhältnis (9.3), das die Schwelle der Abweichung der experimentellen Daten von der Vorhersage des statistischen Modells beschreibt, liegt klar unterhalb der bei T_{thresh} aus (9.4) im mikroskopischen Modell für die Transportkoeffizienten von ^{224}Th (siehe Kapitel 3) angenommenen Dämpfung von $\eta_b = 0.3 \dots 0.4$ (vgl. Abb. 3.2 rechts unten), so dass das Phänomen tatsächlich mit der Raten-Formel für moderate und hohe Dämpfung (8.14) interpretiert werden muss.

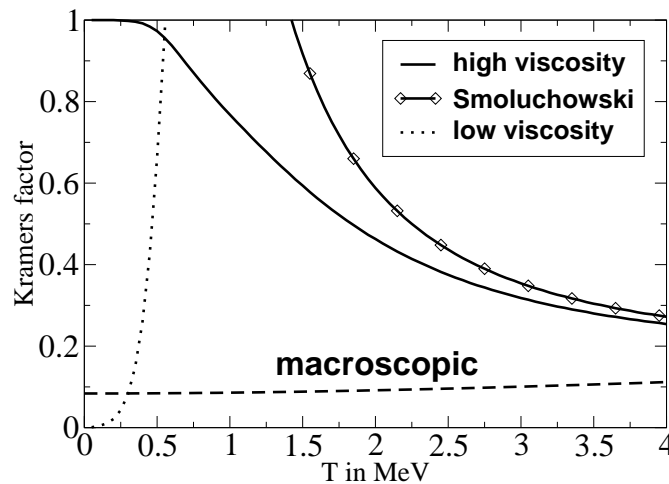


Abbildung 9.1: Die normierte Rate $R_{\text{class}}(\eta_b)/R_{\text{class}}(\eta_b = 0)$ als Funktion der Temperatur für die mikroskopischen Transportkoeffizienten. Ebenfalls eingezeichnet ist die Rate für die makroskopischen Transportkoeffizienten.

In Abb. 9.1 ist die normierte Rate $R_{\text{class}}(\eta_b)/R_{\text{class}}(\eta_b = 0)$ in verschiedenen Näherungen aufgetragen. Bei $T = 0.5 \dots 1$ MeV beginnt die mit (8.14) mit den Transportkoeffizienten des mikroskopischen Modells berechnete Rate aufgrund zunehmender Dämpfung abzunehmen. Dieses Einsetzen der Reibung (“*onset of dissipation*” [TB93]) ereignet sich im gleichen Temperaturbereich, in dem die Paarkorrelationen verschwinden und ist mit den in (9.4) angegebenen Temperaturen einigermaßen verträglich. Ebenfalls in Abb. 9.1 eingezeichnet ist die normierte Rate für das makroskopische Modell für die Transportkoeffizienten. Wie man aus Abb. 3.2 rechts unten entnehmen kann, ist die Dämpfung hier immer sehr stark

und nur schwach temperaturabhängig. Daher ist die Rate gegenüber dem mikroskopischen Modell immer stark vermindert und nahezu unabhängig von der Temperatur. Ein “onset of dissipation” ist *nicht* feststellbar. Aus Abb. 9.1 kann außerdem herausgelesen werden, dass oberhalb von $T \gtrsim 2.5$ MeV der Smoluchowski-Grenzfall (8.16) auch für mikroskopische Transportkoeffizienten anwendbar wird.

9.2 Ein Vergleich mit dem statistischen Modell

Sowohl die Formel für die Rate im Fall von moderater und hoher Dämpfung (8.8) als auch die Ratenformel des statistischen Modells (2.43) enthalten den Arrhenius-Faktor $\exp(-B/T)$. Zum Vergleich beider Formeln eignet sich daher das Verhältnis

$$\frac{R_{\text{class}}}{R_{\text{stat}}} = \frac{\hbar \varpi_b}{T} \sqrt{\frac{C_a}{|C_b|}} \left(\sqrt{1 + \eta_b^2} - \eta_b \right). \quad (9.5)$$

Im überdämpften Grenzfall $\eta_b \gg 1$ reduziert sich dies mit (8.16) zu

$$\frac{R_{\text{class}}^{\text{Smol}}}{R_{\text{stat}}} = \frac{\hbar}{T} \sqrt{\frac{C_a}{|C_b|}} \frac{\varpi_b}{2\eta_b} = \frac{\hbar}{T} \sqrt{\frac{C_a}{|C_b|}} \frac{1}{\tau_{\text{coll}}^b}. \quad (9.6)$$

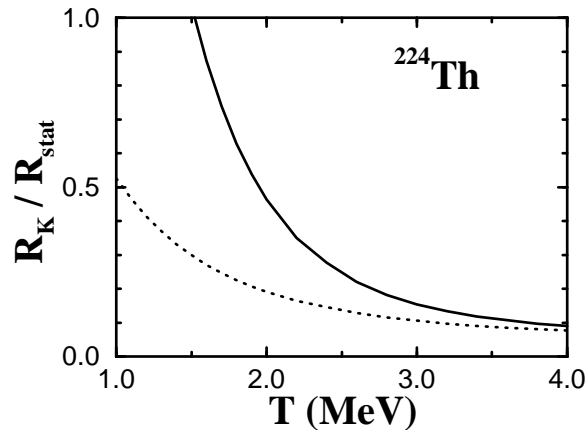


Abbildung 9.2: Das Verhältnis (9.6) von Kramers Rate im überdämpften Fall zu derjenigen des statistischen Modells. Bei der durchgezogenen Kurve sind die Steifheiten des Tröpfchenmodells inklusive Temperaturabhängigkeit genommen, während bei der gepunkteten Linie die Resultate bei $T \rightarrow \infty$ benutzt wurden.

In Abb. 9.2 ist gezeigt, dass das Verhältnis (9.6) als Funktion der Temperatur deutlich von Eins abweicht. Allerdings ist für diese Abweichung *nicht* das Temperaturverhalten des Parameters η alleine verantwortlich. Die Temperaturabhängigkeit des Verhältnisses der Steifheiten spielt eine wesentliche Rolle. Zur Illustration ist als gepunktete Linie das selbe Verhältnis aufgetragen, wo allerdings für die Steifheiten $C_a(T)$ und $C_b(T)$ statt ihres temperaturabhängigen Tröpfchenmodell-Wertes nur die Resultate $C_a^{\text{LDM}}(T \rightarrow \infty)$ und $C_b^{\text{LDM}}(T \rightarrow \infty)$ bei hoher thermischer Anregung genommen sind. Der Unterschied zwischen beiden Kurven kann daher alleine dem Temperaturverhalten der Steifheiten zugeschrieben werden.

In [BBD⁺99] wurde die effektive Dämpfungsstärke η_b (dort mit γ bezeichnet) verschiedener Kerne experimentell bestimmt. Die Dynamik ist für niedrige thermische Anregungen unterdämpft $\eta_b < 1$ und für hohe Anregungen stark überdämpft $\eta_b \gg 1$. Der Übergang erfolgt bei Anregungsenergien, die $T \approx 2$ MeV entsprechen (vgl. Abb. 9 von [BBD⁺99]). Dieses qualitative Verhalten bestätigt in gewisser Weise das Ergebnis der mikroskopischen Rechnungen aus Abb. 3.2 rechts unten. Für die zwei Thorium Isotope ^{216}Th und ^{224}Th mit Neutronenzahl $N = 126$ bzw. $N = 134$ wurde ein quantitativ stark unterschiedliches Verhalten von η_b mit der Anregungsenergie festgestellt: Der Anstieg der effektiven Dämpfung mit E^* ist bei ^{224}Th wesentlich stärker. Es ist anzuzweifeln [HIRY01], dass ein so unterschiedliches Verhalten zweier Isotope auf den einzigen Parameter η_b zurückgeführt werden kann. Sicherlich kann der Effekt nicht in einem makroskopischen Bild erklärt werden. Vielmehr sind zur Interpretation die *Schaleneffekte* wichtig. ^{216}Th hat mit $N = 126$ eine abgeschlossene Neutronenschale und es ist zu erwarten, dass die Steifheiten beider Isotope insbesondere am Minimum unterschiedlich sind.

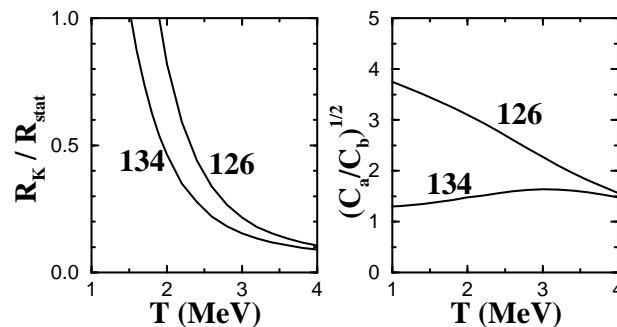


Abbildung 9.3: Ein Vergleich zweier verschiedener Thorium-Isotope $^{216}_{90}\text{Th}_{126}$ und $^{224}_{90}\text{Th}_{134}$. Links: Verhältnis (9.5) der Rate zu der des statistischen Modells. Rechts: Einfluss der Schalenstruktur durch das Verhältnis der Steifheiten.

In Abb. 9.3 ist links das Verhältnis (9.5) für eine Modellrechnung für diese beiden Isotope gezeigt. Rechts ist der Faktor $\sqrt{C_a/|C_b|}$ für beide Isotope in Abhängigkeit von T aufgetragen. Während der Unterschied zwischen beiden Isotopen bei hohen Anregungen

verschwindet, ergibt sich bei tiefen Temperaturen ein Faktor 3, der direkt in die Verhältnisse (9.5) bzw. (9.6) eingeht. Ein kleinerer Wert von $\sqrt{C_a/C_b}$ wirkt daher wie ein größeres η_b . Wenngleich dieser Effekt die unterschiedliche Dämpfung der beiden Isotope in [BBD⁺99] nicht quantitativ erklären kann, geht er doch qualitativ in die richtige Richtung.

Kurzzusammenfassung

Mithilfe der temperaturabhängigen mikroskopischen Transportkoeffizienten aus Kapitel 3 und der in der vorliegenden Arbeit abgeleiteten Ratenformeln für moderate und hohe Dämpfung (8.8) bzw. (8.14) kann im Gegensatz zum makroskopischen Modell das Phänomen des “onset of dissipation” bei der thermischen Kernspaltung qualitativ erklärt werden. Der Unterschied zwischen experimentellen Multiplizitäten leichter Teilchen und den Vorhersagen des statistischen Modells darf jedoch *nicht* der effektiven Dämpfung η_b alleine zugeschrieben werden. Auch die Steifheiten spielen eine wichtige Rolle (siehe Abb. 9.2 und 9.3).

Kapitel 10

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit ist ein wichtiger Schritt zur theoretischen Beschreibung des “*dissipativen Tunnelns*” bei der kollektiven Kernbewegung großer Amplitude gelungen. Zu diesem Zweck wurde im Kapitel 5 vom Formalismus der “Static Path Approximation” (SPA) [MSD72] ausgegangen. Diese und die “Perturbed Static Path Approximation” (PSPA) [PBB91, AA97, RR98] wurden bisher unter Vernachlässigung der Restwechselwirkung unter anderem zur Berechnung der Niveaudichte *wechselwirkender Vielteilchen-Systeme* verwendet. Neben der Berücksichtigung von Relaxationsphänomenen in diesem Formalismus hat die vorliegende Arbeit als neue Anwendung vor allem die Möglichkeit zur Berechnung von Zerfallsraten metastabiler Vielteilchen-Systeme eröffnet.

Mithilfe von Funktionalintegralen zur Berechnung der Zustandssumme von Vielteilchen-Systemen können mit dem gewählten Formalismus kollektive Koordinaten selbstkonsistent eingeführt werden. Bisher war dabei mit der PSPA die Behandlung von Quanteneffekten nur auf dem Niveau der lokalen RPA möglich (siehe Abschnitt 5.3). Infolge dieser vereinfachten Berücksichtigung von Quanteneffekten bricht bei Systemen mit Instabilitäten wie sie z.B. im Bereich von Barrieren auftreten, die PSPA an der “Crossover”-Temperatur T_0 zusammen. Hier werden die *Quantenfluktuationen* so groß, dass eine harmonische Näherung nicht länger gerechtfertigt ist und *Anharmonizitäten* berücksichtigt werden müssen. Einer der Hauptbeiträge dieser Arbeit besteht in der Weiterentwicklung der PSPA, so dass die Beschränkung auf $T > T_0$ fallengelassen werden kann.

Dieser Schritt ist insbesondere dann von Bedeutung, wenn die Untersuchung *tiefer Temperaturen* gewünscht ist. Beispielsweise ist die kritische Temperatur T_{crit} des *Phasenübergangs* vom sphärischen zum deformierten Kern bei Verwendung der Quadrupol-Quadrupol-Wechselwirkung üblicherweise von der gleichen Größenordnung wie T_0 . Die PSPA liefert aber bereits in einem Bereich oberhalb von T_0 nur noch eine schlechte Näherung (siehe Kapitel 6). Verwendet man die Quadrupol-plus-Pairing-Wechselwirkung, so findet der Phasenübergang zu gepaarten Zuständen bei noch deutlich tieferen Temperaturen statt.

Zum detaillierten Studium der genannten Phasenübergänge ist daher eine Theorie hilfreich, die bei $T \approx T_0$ verbesserte Resultate liefert und den Bereich $T < T_0$ zugänglich macht.

Zu deren Ableitung wurden in der Entwicklung der Euklidischen Wirkung (5.16) des Imaginärzeit-Funktionalintegrals um statische Pfade q_0 Terme berücksichtigt, die über die zweite Ordnung in den Störungen der statischen Pfade hinausgehen. Die Koeffizienten der Anharmonizitäten können dabei durch Einteilchen-Green-Funktionen ausgedrückt werden (siehe Abschnitt 5.2 und Anhang B). In der vorliegenden Arbeit wurden zwei verbesserte Methoden zur näherungsweisen Berechnung der Zustandssumme vorgeschlagen (siehe Tab. 5.1):

- Bei der Erweiterung der PSPA zur *ePSPA* [RA02] (siehe Abschnitt 5.4) beschränkt man sich auf diejenigen Entwicklungskoeffizienten, die unbedingt notwendig sind, um für die bei $T = T_0$ in zweiter Ordnung pathologischen Fluktuationsmoden die Anharmonizitäten dritter und vierter Ordnung zu berücksichtigen. Die neu entwickelte Näherung verhält sich im “Crossover”-Bereich $T \approx T_0$ regulär und ist für $T > T_0/2$ anwendbar. Die Beschränkung auf die wichtigsten anharmonischen Entwicklungsterme hat den Vorteil, dass die *ePSPA* nicht wesentlich rechenzeitintensiver ist, als die gewöhnliche PSPA.
- Die Idee für das *Variationsverfahren* [RH04b] (siehe Abschnitt 5.6) wurde aus einer Methode [GT85, GT86, FK86] übernommen, die bisher nur zur Berechnung der Zustandssumme eindimensionaler Systeme angewandt wurde. Dabei wird zur Auswertung des Funktionalintegrals für die Zustandssumme des Vielteilchen-Systems ein von freien Parametern abhängiges *harmonisches Referenz-System* eingeführt, das exakt ausintegriert werden kann. Die Parameter werden so bestimmt, dass die *freie Energie* des Vielteilchen-Systems inklusive der Anharmonizitäten *minimiert* wird. Formal ist das Variationsverfahren im gesamten Temperaturbereich $T > 0$ anwendbar. Allerdings ist es wesentlich rechenzeitintensiver als PSPA oder *ePSPA*: Anstelle von N Entwicklungskoeffizienten müssen bei Beschränkung auf Anharmonizitäten $2n$ -ter Ordnung N^n Koeffizienten berechnet werden.

Die in der vorliegenden Arbeit vorgeschlagenen Weiterentwicklungen sind nicht auf die Kernphysik beschränkt. Beispielsweise ist eine Anwendung auf supraleitende Metallcluster denkbar.

Die Qualität der verschiedenen vorgeschlagenen Näherungen wurde im Kapitel 6 getestet und mit SPA und PSPA verglichen. Neben dem eindimensionalen Doppelpf (Abschnitt 6.1) wurde dazu im Abschnitt 6.2 mit dem Lipkin-Meshkov-Glick-Modell (LMGM) ein exakt lösbares Vielteilchen-Modell herangezogen. Das hier neu entwickelte Variationsverfahren liefert für die untersuchten Größen (freie und innere Energie, spezifische Wärme und Niveaudichte) des LMGM verbesserte Resultate. Vor allem bei der freien und der inneren Energie (siehe Abb. 6.4 und 6.7 oben) lohnt sich der vermehrte Rechenaufwand des Variationsverfahrens.

Im Kapitel 7 wurde die im Modell unabhängiger Teilchen vernachlässigte *Zweiteilchen-Restwechselwirkung* mithilfe eines endlichen Imaginärteils der Selbstenergie (2.20) der Einteilchen-Zustände berücksichtigt. Als weiteres wichtiges Ergebnis dieser Arbeit konnten aus dem “Anziehen” der Einteilchen-Green-Funktionen mithilfe der Ersetzung (2.24) zwei wesentliche Implikationen abgeleitet werden:

- Aus der nun *kontinuierlichen* dissipativen Response-Funktion können durch Anpassen der Response-Funktion eines gedämpften harmonischen Oszillators an die energetisch niedrigste Mode mittels (2.26) die *Transportkoeffizienten* für die Trägheit M , Reibung γ und Steifheit C der lokal harmonischen Bewegung extrahiert werden. Sie hängen wie die Response-Funktion selbst von der Temperatur und der kollektiven Koordinate ab. Die Reduktion auf eine einzige Mode vereinfacht zudem die Durchführung des vorgeschlagenen Variationsverfahrens erheblich, das praktisch umso schwerer anzuwenden ist, je mehr nichtentartete Lösungen die Säkulargleichung für die Kollektivfrequenzen hat.
- Durch die Berücksichtigung der Restwechselwirkung erfahren auch die *Anharmonizitäten* eine Modifikation gegenüber dem Fall des Modells unabhängiger Teilchen. Dieser Effekt tritt im – für kernphysikalische Probleme zu einfachen – Caldeira-Leggett-Modell (CLM) für dissipative Quantensysteme nicht auf. Dort beeinflussen sich die konservativen und die dissipativen Kräfte nicht gegenseitig. Bei Atomkernen muss hingegen *Selbstkonsistenz* zwischen den kollektiven und den nukleonischen Freiheitsgraden gefordert werden. Dies führt letztlich zu einer *Verkoppelung* der beiden Kräfte.

Im Kapitel 8 wurde aus dem Imaginärteil der freien Energie durch eine Sattelpunktsnäherung an das zur Berechnung der Zustandssumme notwendige Integral über die kollektive Koordinate die *Zerfallsrate metastabiler Zustände* bei endlicher Temperatur abgeleitet. Neben dem *klassischen Anteil*, der den Zerfall infolge thermischer Aktivierung beschreibt, enthält die gefundene Rate (8.7) auch *Quantenkorrekturen*, die im Bereich $T \lesssim 2$ MeV die Rate erhöhen. Bisher hatte die Berechnung der Zerfallsrate wechselwirkender Vielteilchen-Systeme bei endlicher Temperatur zwei wesentliche Beschränkungen: Entweder musste das CLM benutzt werden, das zur Beschreibung von kollektiver Kernbewegung nicht anwendbar ist (siehe Abschnitt 2.6). Bei Verwendung der lokal harmonischen Näherung (LHA, siehe Abschnitt 2.3.2) war die Anwendbarkeit auf den Bereich $T > T_c > T_0$ beschränkt.

Mit den in dieser Arbeit vorangetriebenen Entwicklungen können die Transportkoeffizienten für die lokale mittlere Bewegung an der Barriere und am Minimum des Potentials des metastabilen Systems aus einer *mikroskopischen Theorie* entnommen werden. Mithilfe des Variationsverfahrens können nun zudem *Quantenkorrekturen* formal bis herab zu $T = 0$ angegeben werden. Im “Crossover”-Bereich $T \approx T_0 < T_c$ zeigt der Vergleich mit exakten Rechnungen wesentliche Verbesserungen gegenüber der SPA und der PSPA (siehe Abb. 8.3). Allerdings liefert auch das Variationsverfahren im Tieftemperatur-Bereich

$T \ll T_0$ keine vernünftigen Ergebnisse mehr. Hier müssen die im Abschnitt 5.7 besprochenen dynamischen Lösungen berücksichtigt werden, die die Euklidische Wirkung minimieren. Im Ausblick wird kurz auf ein dazu mögliches Vorgehen eingegangen. Ein weiterer Vorteil der in dieser Arbeit abgeleiteten Form des Quantenkorrekturfaktors (z.B. (8.11) für die PSPA) besteht darin, dass er im Gegensatz zu direkten Verallgemeinerungen des CLM auch im Fall koordinatenabhängiger Transportkoeffizienten keine zusätzlichen Annahmen notwendig sind, um *Konvergenz* zu garantieren.

Neben den Quantenkorrekturen wurde mit den auf der SPA aufbauenden Näherungen der Korrekturfaktor $\sqrt{M_a/M_b}$ zur Zerfallsrate gefunden, der für nicht-konstante Trägheit das Verhältnis der Werte am Minimum und der Barriere berücksichtigt. Er sorgt dafür, dass die Trägheit und die kinetische Energie – wie man das intuitiv erwartet – im *überdämpften Grenzfall* keine Rolle mehr spielen (siehe Abschnitt 8.2).

Eine Anwendung der in dieser Arbeit gefundenen Ratenformeln auf den Prozess der *thermischen Kernspaltung* ist im Kapitel 9 erfolgt. Unter Verwendung des mikroskopischen Modells der Transportkoeffizienten (Theorie des linearen Response) aus Kapitel 3 gelang eine qualitative Erklärung [HIRY01] des Phänomens des “*onset of dissipation*” [TB93], bei Temperaturen $T \approx 0.5 \dots 1$ MeV (vgl. Abb. 9.1). Es stellt sich heraus, dass aus der Abweichung der experimentell gemessenen Multiplizitäten leichter Teilchen von der Vorhersage des statistischen Modells *nicht* auf den Parameter der effektiven Dämpfung (2.40) alleine zurückgeschlossen werden darf. Man erhält vielmehr Information über eine *Kombination von Transportkoeffizienten*, in der das Verhältnis $\sqrt{C_a/|C_b|}$ der Steifheiten am Minimum und der Barriere eine wichtige Rolle spielen kann (siehe (9.6) und Abb. 9.2).

Die Verwendung mikroskopischer Transportkoeffizienten ist nicht nur bei der Kernspaltung wichtig. Auch beim in gewisser Hinsicht inversen Prozess der *Bildung von Compoundkernen* ergeben sich im mikroskopischen Modell aus Kapitel 3 und unter Berücksichtigung von Quantenfluktuationen Korrekturen. Diese wurden im Kapitel 4 untersucht. Es stellt sich heraus, dass die *Quanteneffekte* der nukleonischen Bewegung, die in die Transportkoeffizienten für die mittlere Bewegung eingehen und die Dämpfung gegenüber makroskopischen Modellen wesentlich vermindern (siehe Abschnitt 3.2), einen größeren Einfluss auf die Bildungswahrscheinlichkeit haben, als die Quanteneffekte der Kollektivbewegung selbst. Letztere kommen durch das Fluktuations-Dissipations-Theorem (3.8) ins Spiel und sind nur bei tiefen Temperaturen wichtig.

Ausblick

Bei sehr tiefen Temperaturen $T \ll T_0$ muss zur Berechnung der Zustandssumme und der Zerfallsrate von metastabilen Vielteilchen-Systemen die *volle Nichtlinearität* der im Abschnitt 5.7 beschriebenen dynamischen Lösung berücksichtigt werden. Dies kann durch selbstkonsistentes Lösen der Imaginärzeit-TDHF-Gleichungen (5.63) geschehen. Dabei sollte die Berücksichtigung von Dissipation durch das ‐Anziehen‐ der Einteilchen-Green-Funktionen wie im Kapitel 7 beschrieben möglich sein. In der Fourier-transformierten Darstellung der TDHF-Gleichung (5.64) muss dazu die Ersetzung (2.24) vorgenommen werden.

Bei der Ableitung der Transportkoeffizienten aus der kontinuierlichen Response-Funktion mit (2.26) muss man sich derzeit auf die energetisch niedrigste Mode beschränken. Durch Verwendung einer Summe von Oszillator-Response-Funktionen der Art (2.25) sollte die Berücksichtigung mehrerer kollektiver Moden möglich sein. Es wäre detailliert zu untersuchen, wie sich dadurch die Kollektivfrequenzen ändern und welche Modifikationen im Variationsverfahren vorzunehmen sind. Eventuell kann man aus derartigen Überlegungen eine physikalisch motivierte Aussage darüber treffen, wie viele Moden tatsächlich zu berücksichtigen sind.

Bei der Einführung der kollektiven Koordinate $q(\tau)$ über die Hubbard-Startonovich-Transformation (HST, siehe Abschnitt 5.1) tritt in der Euklidischen Wirkung kein Term auf, der $\dot{q}^2(\tau)$ enthält und der kinetischen Energie des Feynman-Pfadintegrals entspricht. Trägheit und Steifheit der kollektiven Moden konnten im Abschnitt 7.1 nur nach Anpassen der Oszillator-Response-Funktion bestimmt werden. Es bleibt zu untersuchen, wie die HST so modifiziert werden kann, dass in der Euklidischen Wirkung direkt eine kinetische Energie auftritt.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denjenigen bedanken, die zum Gelingen der vorliegenden Arbeit beigetragen haben.

Besonders hervorheben will ich dabei Helmut Hofmann, der die Arbeit während der gesamten Zeit mit großem Interesse betreut und auf allen behandelten Gebieten zahllose wertvolle Anregungen geliefert hat. Für sein hohes Engagement möchte ich mich herzlich bei ihm bedanken.

Fedor Ivanyuk verdanke ich viele Diskussionen über die Berechnung von Transportkoeffizienten mittels der Theorie des linearen Response. Außerdem möchte ich ihm für sein Interesse an meiner Arbeit sowie das freundliche Überlassen von Daten danken.

Von Joachim Ankerhold habe ich vieles über semiklassische Entwicklungen und dissipative Quantensysteme gelernt. Ich möchte ihm an dieser Stelle für diese Diskussionen danken.

Steffen Prohaska hat eine frühe Version dieser Arbeit gelesen. Hoffentlich ist es gelungen, seine vielen Fragen eines Nicht-Kernphysikers in der endgültigen Version vorwegzunehmen und die Arbeit für ein breiteres Publikum verständlich zu machen. In jedem Fall gebührt ihm für sein Engagement Dank.

Anhang A

Die Kramers-Gleichung in dimensionslosen Koordinaten

Im Hauptteil dieser Arbeit wird an mehreren Stellen das Modell des stabilen und instabilen harmonischen Oszillators verwendet. Dabei ist es häufig günstig, mit

$$\mathcal{Q} \longrightarrow q = \sqrt{\frac{|C|}{\hbar\varpi}} \mathcal{Q} \quad \text{und} \quad P \longrightarrow p = \sqrt{\frac{\hbar}{M\varpi}} P \quad (2.35)$$

dimensionslose Koordinaten q und die dazu konjugierten Impulse p mit Dimension \hbar zu verwenden. In diesem Anhang werden Ergebnisse aus den Kapiteln 2.2, 3.3 und 3.4 von [Hof97] in diesen Koordinaten zusammengestellt.

A.1 Die Mittlere Bewegung

Aus der transformierten Kramers-Gleichung (KG)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(q, p, t) = & \left[-\frac{\varpi p}{\hbar} \frac{\partial}{\partial q} + \text{sgn}C \hbar\varpi q \frac{\partial}{\partial p} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial p} \frac{p}{\tau_{\text{kin}}} + d_{qp} \frac{\partial^2}{\partial q \partial p} + d_{pp} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] f(q, p, t) \end{aligned} \quad (2.36)$$

können leicht die Bewegungsgleichungen für die mittlere Bewegung des gedämpften harmonischen Oszillators abgeleitet werden. Sie lauten

$$\frac{dq_c(t)}{dt} = \frac{\varpi p_c(t)}{\hbar} \quad (A.1)$$

$$\frac{1}{\hbar} \frac{dp_c(t)}{dt} = -\text{sgn}C \varpi q_c(t) - \frac{1}{\tau_{\text{kin}}} \frac{p_c(t)}{\hbar} \quad (A.2)$$

bzw. als Gleichung für q_c alleine:

$$\frac{d^2 q_c(t)}{dt^2} + \frac{1}{\tau_{\text{kin}}} \frac{dq_c(t)}{dt} + \text{sgn}C \varpi^2 q_c(t) = 0 \quad (\text{A.3})$$

Die Lösungen dieser Bewegungsgleichungen mit den Anfangswerten $q_0 = q_c(t_0)$ und $p_0 = p_c(t_0)$ lauten:

$$\begin{aligned} q_c(t) &= \frac{1}{2\mathcal{E}} (i\varpi p_0/\hbar - q_0\omega^-) \exp(-i\omega^+(t-t_0)) \\ &\quad - \frac{1}{2\mathcal{E}} (i\varpi p_0/\hbar - q_0\omega^+) \exp(-i\omega^-(t-t_0)) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Die Definition der Frequenzen ω_{\pm} der Kollektivbewegung in (7.6) und von $\mathcal{E} = \varpi \sqrt{\text{sgn}C - \eta^2} = (\omega^+ - \omega^-)/2$ werden von der Transformation (2.35) nicht berührt.

A.2 Die Fluktuationen

A.2.1 Die zeitabhängigen Fluktuationen

Die Transformation (2.35) überträgt sich auf die Fluktuationen folgendermaßen:

$$\Sigma_{QQ} \longrightarrow \sigma_{qq} = \frac{|C|}{\hbar\varpi} \Sigma_{QQ} \quad \text{und} \quad \Sigma_{PP} \longrightarrow \sigma_{pp} = \frac{\hbar}{M\varpi} \Sigma_{PP}, \quad (\text{A.5})$$

Die Gleichung (2.36) liefert für die Fluktuationen die Bewegungsgleichungen

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{d\sigma_{pp}(t)}{dt} + 2\text{sgn}C \varpi \frac{\sigma_{qp}(t)}{\hbar} + \frac{2}{\tau_{\text{kin}}} \frac{\sigma_{pp}(t)}{\hbar^2} = 2 \frac{d_{pp}}{\hbar^2} \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{1}{\hbar} \frac{d\sigma_{qp}(t)}{dt} - \varpi \left(\frac{\sigma_{pp}(t)}{\hbar^2} - \text{sgn}C \sigma_{qq}(t) \right) + \frac{1}{\tau_{\text{kin}}} \frac{\sigma_{qp}(t)}{\hbar} = \frac{d_{qp}}{\hbar} \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{d\sigma_{qq}(t)}{dt} - 2\varpi \frac{\sigma_{qp}(t)}{\hbar} = \frac{d_{qq}}{\hbar} \equiv 0. \quad (\text{A.8})$$

Der Zusammenhang zwischen den Diffusionskoeffizienten und den stationären Fluktuationen ist in den transformierten Koordinaten durch (3.6), (3.7) und (3.9) gegeben. Mit den Abweichungen der zeitabhängigen Fluktuationen von den stationären Fluktuationen

$$\Delta\sigma_{\mu\nu}(t) = \sigma_{\mu\nu}(t) - \sigma_{\mu\nu}^{st} \quad \text{mit} \quad \mu, \nu = p, q \quad (\text{A.9})$$

und

$$A_1 = \frac{i\omega^-}{(\omega^+ - \omega^-)^2} \left[\Delta\sigma_{pp}(t_0)/\hbar^2 + 2 \frac{i\omega^+}{\varpi} \Delta\sigma_{qp}(t_0)/\hbar + \left(\frac{i\omega^+}{\varpi} \right)^2 \Delta\sigma_{qq}(t_0) \right] \quad (\text{A.10})$$

$$A_2 = \frac{i\omega^+}{(\omega^+ - \omega^-)^2} \left[\Delta\sigma_{pp}(t_0)/\hbar^2 + 2 \frac{i\omega^-}{\varpi} \Delta\sigma_{qp}(t_0)/\hbar + \left(\frac{i\omega^-}{\varpi} \right)^2 \Delta\sigma_{qq}(t_0) \right] \quad (\text{A.11})$$

$$A_3 = \frac{i\omega^+ + i\omega^-}{(\omega^+ - \omega^-)^2} \left[\Delta\sigma_{pp}(t_0)/\hbar^2 + \frac{i\omega^- + i\omega^+}{\varpi} \Delta\sigma_{qp}(t_0)/\hbar + \frac{i\omega^- i\omega^+}{\varpi^2} \Delta\sigma_{qq}(t_0) \right] \quad (\text{A.12})$$

lautet die Lösung der Bewegungsgleichungen für die Fluktuationen:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Delta\sigma_{pp}(t)/\hbar^2 \\ \Delta\sigma_{qp}(t)/\hbar \\ \Delta\sigma_{qq}(t) \end{pmatrix} &= A_1 \begin{pmatrix} -i\omega^- \\ \varpi \\ i\varpi^2/\omega^- \end{pmatrix} \exp(-2i\omega^-(t-t_0)) \\ &+ A_2 \begin{pmatrix} -i\omega^+ \\ \varpi \\ i\varpi^2/\omega^+ \end{pmatrix} \exp(-2i\omega^+(t-t_0)) \\ &+ A_3 \begin{pmatrix} \text{sgn}C \varpi/\eta \\ -\varpi \\ \varpi/\eta \end{pmatrix} \exp(-i(\omega^- + \omega^+)(t-t_0)) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

A.2.2 Die stationären Fluktuationen

Für die stationären Fluktuationen des stabilen ($C > 0$) oder instabilen ($C < 0$) gedämpften Oszillators mit Frequenz ϖ und kinetischer Relaxationszeit τ_{kin} ergibt sich aus dem Fluktuations-Dissipations-Theorem

$$\sigma_{\mu\nu}^{st} = \hbar \int \frac{d\omega}{2\pi} \coth \frac{\hbar\omega}{2T} \chi''_{\mu\nu}(\omega) \quad (\text{3.8})$$

der folgende Zusammenhang [HK98]:

$$\frac{\sigma_{pp}^{st}}{\hbar^2} = \text{sgn}C \sigma_{qq}^{st} + \frac{\varpi_D}{\pi \tau_{\text{kin}} \varpi} \times \quad (\text{A.14})$$

$$\sum_{j=1}^3 \frac{-i\omega^{(j)}}{(\omega^{(j)} - \omega^{(j+1)})(\omega^{(j)} - \omega^{(j+2)})} \Psi \left(1 + i \frac{\hbar\omega^{(j)}}{2\pi T} \right) \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{qp}^{st} &= 0 \\ \text{sgn}C \sigma_{qq}^{st} &= \frac{T}{\hbar\varpi} \left(1 + \text{sgn}C \frac{\hbar\varpi^2}{\pi T} \times \right. \\ &\quad \left. \sum_{j=1}^3 \frac{\varpi_D - i\omega^{(j)}}{(\omega^{(j)} - \omega^{(j+1)})(\omega^{(j)} - \omega^{(j+2)})} \Psi \left(1 + i \frac{\hbar\omega^{(j)}}{2\pi T} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Hier ist $\Psi(z) = d\ln\Gamma(z)/dz$ die Digamma-Funktion. $\varpi_D \gg \varpi$ ist die Drude-Frequenz, bei der das ω -Integral in (3.8) im Fall von σ_{pp}^{st} regularisiert werden muss. In dieser Arbeit wurde für konkrete Rechnungen durchwegs $\varpi_D = 10 \text{ MeV}/\hbar \gg \varpi \approx 1 \text{ MeV}/\hbar$ gewählt. Die Frequenzen $\omega^{(j)}$ sind die drei Lösungen der kubischen Gleichung

$$\text{sgn}C \varpi^2 - i\omega \left(\text{sgn}C \frac{\varpi^2}{\varpi_D} + \frac{1}{\tau_{\text{kin}}} \right) - \omega^2 + i \frac{\omega^3}{\varpi_D} = 0. \quad (\text{A.17})$$

Es gilt Periodizität: $\omega^{(j+3)} \equiv \omega^{(j)}$:

A.3 Die Gauß-Lösungen

Mit der Matrix

$$\mathcal{A}(t) = \begin{pmatrix} \sigma_{pp}(t) & \sigma_{qp}(t) \\ \sigma_{qp}(t) & \sigma_{qq}(t) \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

sind die zeitabhängigen Gauß-Funktionen

$$f_G(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\det \mathcal{A}(t)}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} p - p_c(t) \\ q - q_c(t) \end{pmatrix}^T \mathcal{A}^{-1}(t) \begin{pmatrix} p - p_c(t) \\ q - q_c(t) \end{pmatrix} \right\} \quad (\text{A.19})$$

Lösungen der Kramers-Gleichung (2.36). Dies kann man durch explizites Nachrechnen verifizieren. Die mittleren Trajektorien $q_c(t)$ sind dabei in (A.4) explizit angegeben. Die mittleren Impulse $p_c(t)$ können daraus mit der Bewegungsgleichung (A.1) abgeleitet werden. Die Lösungen für die Fluktuationen $\sigma_{\mu\nu}(t) = \Delta\sigma_{\mu\nu}(t) + \sigma_{\mu\nu}^{st}$ sind in (A.13) zusammengestellt. Für die Determinante muss gelten:

$$\det \mathcal{A}(t) = \sigma_{pp}(t)\sigma_{qq}(t) - \sigma_{qp}^2(t) > 0 \quad (\text{A.20})$$

Um im quantenmechanischen Fall die Unschärferelation zu befriedigen, muss die schärfere Bedingung (4.11) erfüllt sein.

A.4 Die Stationären Lösungen

Im Fall des stabilen Oszillators $C_a > 0$ streben die Lösungen (A.19) für große Zeiten $t - t_0 \gg \tau_a = 1/(\varpi_a \eta_a)$ (vgl. (A.4), (A.13) und (7.6)) gegen die Gleichgewichts-Lösung

$$f_a(q, p) \sim \exp \left(-\frac{p^2}{2\sigma_{pp}^{st,a}} - \frac{q^2}{2\sigma_{qq}^{st,a}} \right). \quad (\text{A.21})$$

Quanteneffekte finden in (A.21) über die Gleichgewichts-Fluktuationen für den Impuls $\sigma_{pp}^{st,a}$ und die Koordinate $\sigma_{qq}^{st,a}$ aus Abschnitt A.2.2 Eingang.

Für den instabilen Oszillator $C_b < 0$ gibt es keine Gleichgewichts-Lösung. Man kann allerdings (A.21) analytisch fortsetzen und erhält eine nicht normierbare *stationäre* Lösung von (2.36):

$$f_b(q, p) \sim \exp\left(-\frac{p^2}{2\sigma_{pp}^{st,b}} + \frac{q^2}{-2\sigma_{qq}^{st,b}}\right) \quad (\text{A.22})$$

Man beachte, dass für $C_b < 0$ gilt: $\sigma_{qq}^{st,b} < 0$ (siehe (A.16)). Darüber hinaus kann man im instabilen Fall eine stationäre Lösung mit einem *endlichen Strom* finden. H.A. Kramers' klassische Lösung mit dieser Eigenschaft [Kra40] wurde im Zusammenhang mit Pfadintegralen von G.-L. Ingold auf den quantenmechanischen Fall verallgemeinert [Ing88]. Die erste Anwendung mit der KG (2.32) erfolgte in [HI91] zur Berechnung der "saddle-to-scission-time" bei der Kernspaltung und in [HIT93] zur Ableitung der Spaltrate mit Quantenkorrekturen. Die stationäre "Kramers-Ingold-Lösung" der Gleichung (2.36) lautet

$$f_b^{\text{KI}}(q, p) = f_b(q, p) \cdot g(q, p) , \quad (\text{A.23})$$

wobei der Faktor $g(q, p)$ mit

$$s = \frac{p}{\sqrt{\sigma_{pp}^{st,b}}} - \alpha \frac{q}{\sqrt{-\sigma_{qq}^{st,b}}} \quad (\text{A.24})$$

und

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \eta_b^2} - \eta_b} \sqrt{\frac{\sigma_{pp}^{st,b}/\hbar^2}{-\sigma_{qq}^{st,b}}} . \quad (\text{A.25})$$

folgendermaßen gegeben ist:

$$g(q, p) = \int_{-\infty}^s \frac{du}{\sqrt{2\pi(\alpha^2 - 1)}} \exp\left(-\frac{u^2}{2(\alpha^2 - 1)}\right) \quad (\text{A.26})$$

Liegt der Scheitel des instabilen Oszillators nicht bei der Energie $E = 0$, so erhält (A.23) einen zusätzlichen Faktor $\exp(-E/T)$.

Anhang B

Die Koeffizienten der Euklidischen Wirkung

Im Abschnitt 5.2 wurde die Berechnung der Koeffizienten (5.17) bis (5.19) der Entwicklung (5.16) der Euklidischen Wirkung am Beispiel *eines* Beitrags zu (5.19) vorgeführt. Hier werden für alle Koeffizienten die Endergebnisse zusammengestellt. Für die Einteilchen-Green-Funktionen $g_i(z)$ ist dabei im IPM die ungestörte Form (2.15) und im Fall mit Restwechselwirkung (2.18) einzusetzen. Die Abhängigkeiten der Matrixelemente $F_{ik} = F_{ik}(q_0)$, Einteilchen-Energien $\hbar\omega_i(q_0) = \epsilon_i(q_0) - \mu$ und Fermi-Besetzungszahlen $n_i = n(\epsilon_i(q_0))$ von der inversen Temperatur $\beta = 1/T$ und der kollektiven Koordinate q_0 werden dabei der Übersichtlichkeit halber unterdrückt.

B.1 Die Zweite Ordnung

In zweiter Ordnung ergibt sich der Zusammenhang

$$\begin{aligned}\lambda_{rs} &= \frac{1}{2} \left(1 + |k| \sum_{i,k} |F_{ik}|^2 (n_i g_k(\omega_i + i\nu_r) + n_k g_i(\omega_k - i\nu_r)) \right) \delta_{r,-s} \\ &= \frac{1}{2} (1 + k \chi(i\nu_r)) \delta_{r,-s} = \frac{1}{2} \lambda_r \delta_{r,-s}\end{aligned}\tag{B.1}$$

mit der FF-Response-Funktion (2.12), der in [RH01] ohne Benutzen der spektralen Darstellung abgeleitet wurde.

B.2 Die Dritte Ordnung

Die dritte Ordnung hat zwei Beiträge

$$\rho_{rst} = \frac{|k|}{3!} \left(A_{rst}^{(3)} + B_{rst}^{(3)} \right) \delta_{r+s,-t} \quad (\text{B.2})$$

wobei

$$A_{rst}^{(3)} = \sum_{i,k,m} F_{im} F_{ki} F_{mk} \left\{ n_i g_m(\omega_i + i\nu_r) g_k(\omega_i - i\nu_s) \right. \\ \left. + n_k g_i(\omega_k + i\nu_s) g_m(\omega_k - i\nu_t) \right. \\ \left. + n_m g_i(\omega_m - i\nu_r) g_k(\omega_m + i\nu_t) \right\} \quad (\text{B.3})$$

$$B_{rst}^{(3)} = \sum_{i,k,m} F_{ik} F_{km} F_{mi} \left\{ n_i g_k(\omega_i + i\nu_r) g_m(\omega_i - i\nu_t) \right. \\ \left. + n_k g_i(\omega_k - i\nu_r) g_m(\omega_k + i\nu_s) \right. \\ \left. + n_m g_i(\omega_m + i\nu_t) g_k(\omega_m - i\nu_s) \right\} \quad (\text{B.4})$$

B.3 Die Vierte Ordnung

In vierter Ordnung tragen sechs Terme bei

$$\sigma_{rstu} = \frac{|k|}{4!} \left(B_{rstu}^{(4)} + C_{rstu}^{(4)} + D_{rstu}^{(4)} + F_{rstu}^{(4)} + H_{rstu}^{(4)} + I_{rstu}^{(4)} \right) \delta_{r+s+t,-u} \quad (\text{B.5})$$

mit

$$B_{rstu}^{(4)} = \sum_{i,k,m,o} F_{im} F_{ki} F_{mo} F_{ok} \\ \times \left\{ n_i g_m(\omega_i + i\nu_r) g_k(\omega_i - i\nu_s) g_o(\omega_i + i\nu_{s+t}) \right. \\ \left. + n_k g_i(\omega_k + i\nu_s) g_m(\omega_k + i\nu_{r+s}) g_o(\omega_k - i\nu_u) \right. \\ \left. + n_m g_i(\omega_m - i\nu_r) g_k(\omega_m - i\nu_{r+s}) g_o(\omega_m + i\nu_t) \right. \\ \left. + n_o g_i(\omega_o - i\nu_{r+t}) g_m(\omega_o - i\nu_t) g_k(\omega_o + i\nu_u) \right\} \quad (\text{B.6})$$

$$C_{rstu}^{(4)} = \sum_{i,k,m,o} F_{io} F_{ki} F_{mk} F_{om} \\ \times \left\{ n_i g_o(\omega_i + i\nu_r) g_k(\omega_i - i\nu_s) g_m(\omega_i - i\nu_{s+t}) \right. \\ \left. + n_k g_i(\omega_k + i\nu_s) g_o(\omega_k + i\nu_{r+s}) g_m(\omega_k - i\nu_t) \right. \\ \left. + n_m g_i(\omega_m + i\nu_{s+t}) g_o(\omega_m - i\nu_u) g_k(\omega_m + i\nu_t) \right. \\ \left. + n_o g_i(\omega_o - i\nu_r) g_k(\omega_o - i\nu_{r+s}) g_m(\omega_o + i\nu_u) \right\} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned}
D_{rstu}^{(4)} &= \sum_{i,k,m,o} F_{ik} F_{ko} F_{mi} F_{om} \\
&\times \{n_i g_k(\omega_i + i\nu_r) g_o(\omega_i + i\nu_{r+s}) g_m(\omega_i - i\nu_t) \\
&\quad + n_k g_i(\omega_k - i\nu_r) g_o(\omega_k + i\nu_s) g_m(\omega_k - i\nu_{r+t}) \\
&\quad + n_m g_i(\omega_m + i\nu_t) g_k(\omega_m + i\nu_{r+t}) g_o(\omega_m - i\nu_u) \\
&\quad + n_o g_i(\omega_o - i\nu_{r+s}) g_k(\omega_o - i\nu_s) g_m(\omega_o + i\nu_u)\}
\end{aligned} \tag{B.8}$$

$$\begin{aligned}
F_{rstu}^{(4)} &= \sum_{i,k,m,o} F_{io} F_{km} F_{mi} F_{ok} \\
&\times \{n_i g_o(\omega_i + i\nu_r) g_m(\omega_i - i\nu_t) g_k(\omega_i - i\nu_{s+t}) \\
&\quad + n_k g_i(\omega_k + i\nu_{s+t}) g_o(\omega_k - i\nu_u) g_m(\omega_k + i\nu_s) \\
&\quad + n_m g_i(\omega_m + i\nu_t) g_o(\omega_m + i\nu_{r+t}) g_k(\omega_m - i\nu_s) \\
&\quad + n_o g_i(\omega_o - i\nu_r) g_m(\omega_o - i\nu_{r+t}) g_k(\omega_o + i\nu_u)\}
\end{aligned} \tag{B.9}$$

$$\begin{aligned}
H_{rstu}^{(4)} &= \sum_{i,k,m,o} F_{ik} F_{km} F_{mo} F_{oi} \\
&\times \{n_i g_k(\omega_i + i\nu_r) g_m(\omega_i + i\nu_{r+s}) g_o(\omega_i - i\nu_u) \\
&\quad + n_k g_i(\omega_k - i\nu_r) g_o(\omega_k + i\nu_{s+t}) g_m(\omega_k + i\nu_s) \\
&\quad + n_m g_i(\omega_m - i\nu_{r+s}) g_k(\omega_m - i\nu_s) g_o(\omega_m + i\nu_t) \\
&\quad + n_o g_i(\omega_o + i\nu_u) g_k(\omega_o - i\nu_{s+t}) g_m(\omega_o - i\nu_t)\}
\end{aligned} \tag{B.10}$$

$$\begin{aligned}
I_{rstu}^{(4)} &= \sum_{i,k,m,o} F_{im} F_{ko} F_{mk} F_{oi} \\
&\times \{n_i g_m(\omega_i + i\nu_r) g_k(\omega_i + i\nu_{r+t}) g_o(\omega_i - i\nu_u) \\
&\quad + n_k g_i(\omega_k - i\nu_{r+t}) g_m(\omega_k - i\nu_t) g_o(\omega_k + i\nu_s) \\
&\quad + n_m g_i(\omega_m - i\nu_r) g_o(\omega_m + i\nu_{s+t}) g_k(\omega_m + i\nu_t) \\
&\quad + n_o g_i(\omega_o + i\nu_u) g_m(\omega_o - i\nu_{s+t}) g_k(\omega_o - i\nu_s)\}
\end{aligned} \tag{B.11}$$

Der Beitrag $C_{rstu}^{(4)}$ wurde im Abschnitt 5.2 explizit hergeleitet.

Anhang C

Wichtige Eigenschaften des Lipkin-Meshkov-Glick-Modells

Im Kapitel 5 dieser Arbeit werden Näherungsverfahren zur Approximation der Zustandssumme von wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen entwickelt. Um die Güte der jeweiligen Verfahren testen zu können, ist es günstig, ein exakt lösbares Modell für solche Systeme heranzuziehen. Für das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell (LMGM) [LMG65] kann wegen der ihm zugrunde liegenden $SU(2)$ -Symmetrie die Lösung exakt angegeben werden.

Zur Motivation des Hamilton-Operators des LMGM geht man von folgender Vorstellung aus: Eine Anzahl von A Fermionen sei in ein System aus zwei g -fach entarteten Niveaus mit Niveauabstand 2ϵ verteilt, die durch die Quantenzahlen $p\sigma$ mit $\sigma = \pm$ charakterisiert sind:

$$\hat{H} = \epsilon \sum_{p\sigma} \sigma \hat{a}_{p\sigma}^\dagger \hat{a}_{p\sigma} \quad (\text{C.1})$$

Die Teilchenzahl kann also in den Grenzen $0 \leq A \leq 2g$ variieren. Es gebe zwei Arten von Zweiteilchen-Wechselwirkung zwischen Zuständen mit gleichem p und verschiedenem σ . Mit der Stärke k_V können zwei Teilchen aus dem gleichen Niveau in das andere gestreut werden:

$$\hat{V}_V = \frac{k_V}{2} \sum_{pq\sigma} \hat{a}_{p\sigma}^\dagger \hat{a}_{q\sigma}^\dagger \hat{a}_{q-\sigma} \hat{a}_{p-\sigma} \quad (\text{C.2})$$

Streuung von jeweils einem Teilchen in das höhere Niveau und einem in das niedrigere soll mit Stärke k_W erfolgen:

$$\hat{V}_W = \frac{k_W}{2} \sum_{pq\sigma} \hat{a}_{p\sigma}^\dagger \hat{a}_{q-\sigma}^\dagger \hat{a}_{q\sigma} \hat{a}_{p-\sigma} \quad (\text{C.3})$$

Der gesamte Hamilton-Operator kann unter Verwendung der Quasi-Spin-Operatoren

$$\hat{J}_+ = \sum_p \hat{a}_{p+}^\dagger \hat{a}_{p-} , \quad \hat{J}_- = \sum_p \hat{a}_{p-}^\dagger \hat{a}_{p+} , \quad \hat{J}_z = \frac{1}{2} \sum_{p\sigma} \sigma \hat{a}_{p\sigma}^\dagger \hat{a}_{p\sigma} \quad (\text{C.4})$$

in der Form

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \hat{V}_V + \hat{V}_W = 2\epsilon\hat{J}_z + \frac{k_V}{2}(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2) + \frac{k_W}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) \quad (\text{C.5})$$

geschrieben werden. Es gibt zwei einfache Spezialfälle dieses Hamilton-Operators, die mit $2\hat{J}_x = \hat{J}_+ + \hat{J}_-$ und $2i\hat{J}_y = \hat{J}_+ - \hat{J}_-$ folgendermaßen dargestellt werden können. Mit $k_W = 0$ erhält man

$$\hat{\mathcal{H}} = 2\epsilon\hat{J}_z + 2k_V(\hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2), \quad (\text{C.6})$$

während $k_V = k_W = k$ auf

$$\hat{\mathcal{H}} = 2\epsilon\hat{J}_z + 2k\hat{J}_x^2 \quad (\text{6.7})$$

führt. In dieser Arbeit wird nur der letzte Fall zu Testzwecken herangezogen, da er mit $\hat{H} = 2\epsilon\hat{J}_z$ und $\hat{F} = 2\hat{J}_x$ die einfache Struktur (5.2) mit nur einem separablen Term aufweist.

Der statische “mean-field”-Hamilton-Operator (5.12) für (6.7) lautet

$$\hat{\mathcal{H}}_0(q_0) = 2\epsilon\hat{J}_z + 2q_0\hat{J}_x \quad (\text{6.10})$$

und hat wie der ungestörte Anteil $2\epsilon\hat{J}_z$ ebenfalls g -fach entartete Niveaus:

$$\epsilon_{\pm}(q_0) = \pm\epsilon(q_0) = \pm\sqrt{\epsilon^2 + q_0^2} \quad (\text{C.7})$$

In der Basis der Eigenzustände von (6.10) sind die Operatoren \hat{J}_x und \hat{J}_z diagonal mit den 2×2 -Blöcken

$$\langle p\sigma | 2\hat{J}_x | q\tau \rangle = \begin{pmatrix} q_0/\epsilon(q_0) & \epsilon/\epsilon(q_0) \\ \epsilon/\epsilon(q_0) & -q_0/\epsilon(q_0) \end{pmatrix}_{\sigma\tau} \delta_{pq} \quad (\text{C.8})$$

$$\langle p\sigma | 2\hat{J}_z | q\tau \rangle = \begin{pmatrix} \epsilon/\epsilon(q_0) & -q_0/\epsilon(q_0) \\ -q_0/\epsilon(q_0) & -\epsilon/\epsilon(q_0) \end{pmatrix}_{\sigma\tau} \delta_{pq} \quad (\text{C.9})$$

auf der Diagonale.

Anhang D

Mathematischer Anhang

In diesem Anhang werden einige Nebenrechnungen und mathematische Formeln zusammengestellt.

D.1 Die Beiträge zum Variationsverfahren

D.1.1 Die Zweite Ordnung

Mit der in (5.58) eingeführten Abkürzung Π_r ergibt sich der Beitrag zweiter Ordnung zum Erwartungswert $\langle s_E - s_\Omega^{q_0} \rangle_\Omega^{q_0}$ als

$$\begin{aligned} & \langle s_E^{\text{PSPA}} - s_\Omega^{q_0} \rangle_\Omega^{q_0} \\ &= \frac{1}{\zeta_\Omega^{q_0}} \int \prod_{s>0} \frac{\beta}{\pi|k|} d\text{Re}(q_s) d\text{Im}(q_s) \exp \left(-\frac{\beta}{|k|} \sum_{s>0} \lambda_s \cdot (\text{Re}^2(q_s) + \text{Im}^2(q_s)) \right) \times \\ & \quad \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r>0} \frac{\Pi_r}{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)} (\text{Re}^2(q_r) + \text{Im}^2(q_r)) \\ &= \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r>0} \frac{\Pi_r}{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)} \frac{\prod_\mu (\nu_r^2 + \Omega_\mu^2)}{\prod'_{k>l} (\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)} \times \\ & \quad \int \frac{\beta}{\pi|k|} d\text{Re}(q_r) d\text{Im}(q_r) \exp \left(-\frac{\beta}{|k|} \lambda_r \cdot (\text{Re}^2(q_r) + \text{Im}^2(q_r)) \right) (\text{Re}^2(q_r) + \text{Im}^2(q_r)) \\ &= \hbar \sum_{r>0} \frac{\Pi_r}{\prod_\mu (\nu_r^2 + \Omega_\mu^2)}. \end{aligned} \tag{D.1}$$

Im zweiten Schritt werden alle Gauß'schen Integrale mit $s \neq r$ ausgeführt und die Definition (5.34) für λ_s benutzt. Im dritten Schritt werden die verbleibenden nicht-Gauß'schen

Integrale ausgewertet. Man beachte, dass die Summe im Endergebnis konvergiert, da der Nenner zwei Ordnungen höher in $\nu_r = (2\pi/\hbar\beta)r$ ist als der Zähler.

D.1.2 Die Vierte Ordnung

Aufgrund von Symmetrieüberlegungen lautet der alleine beitragende Term

$$\begin{aligned}
& \langle \delta_{S_E}^{(4)} \rangle_{\Omega}^{q_0} \\
&= \frac{1}{\zeta_{\Omega}^{q_0}} \frac{\hbar\beta}{|k|} \int \prod_{t>0} \frac{\beta}{\pi|k|} d\text{Re}(q_t) d\text{Im}(q_t) \exp\left(-\frac{\beta}{|k|} \sum_{t>0} \lambda_t \cdot (\text{Re}^2(q_t) + \text{Im}^2(q_t))\right) \times \\
& \quad \sum_{r,s>0} \sigma_{rs-r-s} (\text{Re}^2(q_r) + \text{Im}^2(q_r)) (\text{Re}^2(q_s) + \text{Im}^2(q_s)) \\
&= \frac{\hbar\beta}{|k|} \sum_{r,s>0} \sigma_{rs-r-s} \frac{\prod_{\mu}(\nu_r^2 + \Omega_{\mu}^2)}{\prod'_{k>l}(\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)} \frac{\prod_{\mu}(\nu_s^2 + \Omega_{\mu}^2)}{\prod'_{k>l}(\nu_s^2 + \omega_{kl}^2)} \times \\
& \quad \int \frac{\beta}{\pi|k|} d\text{Re}(q_r) d\text{Im}(q_r) \exp\left(-\frac{\beta}{|k|} \lambda_r \cdot (\text{Re}^2(q_r) + \text{Im}^2(q_r))\right) (\text{Re}^2(q_r) + \text{Im}^2(q_r)) \\
& \quad \int \frac{\beta}{\pi|k|} d\text{Re}(q_s) d\text{Im}(q_s) \exp\left(-\frac{\hbar\beta}{|k|} \lambda_s \cdot (\text{Re}^2(q_s) + \text{Im}^2(q_s))\right) (\text{Re}^2(q_s) + \text{Im}^2(q_s)) \\
&= \frac{\hbar|k|}{\beta} \sum_{r,s>0} \sigma_{rs-r-s} \frac{\prod'_{k>l}(\nu_r^2 + \omega_{kl}^2)}{\prod_{\mu}(\nu_r^2 + \Omega_{\mu}^2)} \frac{\prod'_{k>l}(\nu_s^2 + \omega_{kl}^2)}{\prod_{\mu}(\nu_s^2 + \Omega_{\mu}^2)} \tag{D.2}
\end{aligned}$$

Der Spezialfall $r = s$ ist in (D.2) eingeschlossen. Man beachte, dass die Summe im Endergebnis für konstante Koeffizienten σ_{rs-r-s} nicht konvergieren würde. Hier sorgt das im Abschnitt 5.2 abgeleitete Verhalten $\sigma_{rs-r-s} \sim 1/r^2$ für Konvergenz.

D.2 Zur Fehlerfunktion

Die Fehlerfunktion und ihr Komplement sind für $z \in \mathbb{C}$ folgendermaßen definiert:

$$\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z du e^{-u^2} = 1 - \text{erfc}(z) \tag{D.3}$$

Für große $|z|$ gilt unter der Bedingung $|\arg(z)| < 3\pi/4$ folgende asymptotische Entwicklung [AS70]:

$$\sqrt{\pi}z e^{z^2} \text{erfc}(z) = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{(2m-1)!!}{(2z^2)^m} \tag{D.4}$$

D.3 Zur Konvergenz unendlicher Produkte rationaler Funktionen

Das unendliche Produkt

$$\prod_{r>1} A \frac{(r - a_1)(r - a_2) \dots (r - a_k)}{(r - b_1)(r - b_2) \dots (r - b_l)} = \prod_{r>1} f_r \quad (\text{D.5})$$

vom Index r abhängiger rationaler Funktionen f_r kann nur konvergieren, falls gilt $A = 1$ und $k = l$. Zusätzlich ist für absolute Konvergenz notwendig [WW92], dass gilt:

$$a_1 + \dots + a_k - b_1 - \dots - b_k = 0 \quad (\text{D.6})$$

Literaturverzeichnis

- [AA97] H. ATTIAS and Y. ALHASSID, The perturbed static path approximation at finite temperature: observables and strength functions, *Nucl. Phys. A* **625** (1997) 565.
- [AA98] B. K. AGRAWAL and A. ANSARI, Level density and level density parameter in medium heavy nuclei including thermal and quantal fluctuation effects, *Phys. Lett. B* **421** (1998) 13.
- [AARS96] Y. ABE, S. AYIK, P.-G. REINHARD, and E. SURAUD, On stochastic approaches to nuclear dynamics, *Phys. Rep.* **275** (1996) 49.
- [AASV98] G. ADAMIAN, N. ANTONENKO, W. SCHEID, and V. VOLKOV, Fusion cross sections for superheavy nuclei in the dinuclear system concept, *Nucl. Phys. A* **633** (1998) 409.
- [Abe02] Y. ABE, Reaction dynamics of synthesis of superheavy elements, *Eur. Phys. J. A* **13** (2002) 143.
- [ABGW00] Y. ABE, D. BOILLEY, B. G. GIRAUD, and T. WADA, Diffusion over a saddle with a Langevin equation, *Phys. Rev. E* **61** (2000) 1125.
- [ABLP88] P. ARVE, G. BERTSCH, B. LAURITZEN, and G. PUDDU, Static path approximation for the nuclear partition function, *Ann. Phys. (N.Y.)* **183** (1988) 309.
- [ACN⁺95] N. ANTONENKO, E. CHEREPANOV, A. NASIROV, V. PERMJAKOV, and V. VOLKOV, Compound nucleus formation in reactions between massive nuclei: Fusion barrier, *Phys. Rev. C* **51** (1995) 2635.
- [Aff81] I. AFFLECK, Quantum-statistical metastability, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981) 388.
- [AG95] J. ANKERHOLD and H. GRABERT, Dissipative quantum systems with a potential barrier. II. Dynamics near the barrier top, *Phys. Rev. E* **52** (1995) 4704.

- [AG97] J. ANKERHOLD and H. GRABERT, Dissipative quantum systems with a potential barrier. III. Steady state nonequilibrium flux and reaction rate, *Phys. Rev. E* **52** (1997) 1355.
- [AG00] J. ANKERHOLD and H. GRABERT, Semiclassical time evolution of the density matrix and tunneling, *Phys. Rev. E* **61** (2000) 3450.
- [AGI95] J. ANKERHOLD, H. GRABERT, and G.-L. INGOLD, Dissipative quantum systems with a potential barrier: General theory and the parabolic barrier, *Phys. Rev. E* **51** (1995) 4267.
- [AO03] Y. ARITOMO and M. OHTA, Analysis of fusion-fission process with neutron evaporation in superheavy mass region, *Phys. Atom. Nucl.* **6** (2003) 1.
- [AS70] M. ABRAMOWITZ and I. A. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, New York, 1970.
- [ASDS98] B. K. AGRAWAL, S. K. SAMADDAR, J. N. DE, and S. SHLOMO, Large-model-space calculation of the nuclear level density parameter at finite temperature, *Phys. Rev. C* **58** (1998) 3004.
- [AWOA99] Y. ARITOMO, T. WADA, M. OHTA, and Y. ABE, Fluctuation-dissipation model for synthesis of superheavy elements, *Phys. Rev. C* **59** (1999) 796.
- [AZ84] Y. ALHASSID and J. ZINGMAN, Approximation methods for the nuclear thermodynamic functions and their validity in a solvable model, *Phys. Rev. C* **30** (1984) 684.
- [BAB03] D. BOILLEY, Y. ABE, and J.-D. BAO, Inverse Kramers formula and fusion dynamics of heavy ions, *Eur. Phys. J. A* **18** (2003) 627.
- [BB02] J.-D. BAO and D. BOILLEY, Quantum propagator approach to heavy-ion fusion, *Nucl. Phys. A* **707** (2002) 47.
- [BBD⁺99] B. BACK, D. BLUMENTHAL, C. DAVIS, D. HENDERSON, R. HERMANN, D. HOFMAN, C. JIANG, H. PENTTILÄ, and A. WUOSMAA, Fission hindrance in hot ²¹⁶Th: Evaporation residue measurements, *Phys. Rev. C* **60** (1999) 044602.
- [BBN⁺78] J. BLOCKI, Y. BONEH, J. NIX, J. RANDRUP, M. ROBEL, A. SIERK, and W. SWIATECKI, One-body dissipation and the super-viscosity of nuclei, *Ann. Phys.* **113** (1978) 330.
- [BD98] F. BRAUN and J. v. DELFT, Fixed-*n* superconductivity: The crossover from the bulk to the few-elektron limit, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 4712.

- [BD99] F. BRAUN and J. v. DELFT, Superconductivity in ultrasmall metallic grains, *Phys. Rev.* **B 59** (1999) 9527.
- [BDJ⁺72] M. BRACK, J. DAMGAARD, A. JENSEN, H. PAULI, V. STRUTINSKY, and C. WONG, Funny hills: The shell-correction approach to nuclear shell effects and its application to the fission process, *Rev. Mod. Phys.* **44** (1972) 320.
- [BDRT97] F. BRAUN, J. v. DELFT, D. RALPH, and M. TINKHAM, Parametric breakdown of superconductivity in ultrasmall metallic grains, *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 921.
- [BGV76] D. BRINK, M. GIANNONI, and M. VENERONI, Derivation of an adiabatic time-dependent hartree-fock formalism from a variational principle, *Nucl. Phys.* **A 258** (1976) 237.
- [BHM⁺91] R. BUTSCH, D. HOFMANN, C. MONTROYA, P. PAUL, and M. THOENNESSEN, Time scales for fusion-fission and quasifission from giant dipole resonance decay, *Phys. Rev.* **C 44** (1991) 1515.
- [BK68] M. BARANGER and K. KUMAR, Nuclear deformations in the pairing-plus-quadrupole model – (IV). Theory of collective motion, *Nucl. Phys.* **A122** (1968) 241.
- [BM75a] A. BOHR and B. R. MOTTELSON, *Nuclear Structure*, volume 1, Benjamin, London, 1975.
- [BM75b] A. BOHR and B. R. MOTTELSON, *Nuclear Structure*, volume 2, Benjamin, London, 1975.
- [Boh36] N. BOHR, *Nature* **137** (1936) 344.
- [BP53] D. BOHM and D. PINES, A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas, *Phys. Rev.* **92** (1953) 609.
- [BP02] H.-P. BREUER and F. PETRUCCIONE, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, London, 2002.
- [BR86] J.-P. BLAIZOT and G. RIPKA, *Quantum Theory of Finite Systems*, MIT Press, Cambridge, 1986.
- [BRT96] C. BLACK, D. RALPH, and M. TINKHAM, Spectroscopy of the superconducting gap in individual nanometer-scale aluminium particles, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 688.
- [BT98] A. B. BALANTEKIN and N. TAKIGAWA, Quantum tunneling in nuclear fusion, *Rev. Mod. Phys.* **70** (1998) 77.

- [Bun04] R. BUNDSCHUH, Master's thesis, Technische Universität München, München, 2004.
- [BV78] M. BARANGER and M. VENERONI, An adiabatic time-dependent hartree-fock theory of collective motion in finite systems, *Ann. Phys.* **114** (1978) 123.
- [BW39] N. BOHR and J. A. WHEELER, The mechanism of nuclear fission, *Phys. Rev.* **56** (1939) 426.
- [BZW94] J. BAO, Y. ZHUO, and X. WU, Kramers rate formula with coordinate-dependent mass, *Z. Phys. A* **347** (1994) 217.
- [CGT⁺95] A. CUCCOLI, R. GIACHETTI, V. TOGNETTI, R. VAIA, and P. VERRUCCHI, The effective potential and effective hamiltonian in quantum statistical mechanics, *J. Phys. Cond. Mat.* **7** (1995) 7891.
- [CL83] A. O. CALDEIRA and A. J. LEGGETT, Quantum tunneling in a dissipative system, *Ann. Phys.* **149** (1983) 374, **153**, 445(E) (1984).
- [CMC88] A. N. CLELAND, J. M. MARTINIS, and J. CLARKE, Measurement of the effect of moderate dissipation on macroscopic quantum tunneling, *Phys. Rev. B* **37** (1988) 5950.
- [CR97] N. CANOSA and R. ROSSIGNOLI, Effects of repulsive forces on thermal fluctuations, *Phys. Rev. C* **56** (1997) 791.
- [CR00] N. CANOSA and R. ROSSIGNOLI, Paramagnetic breakdown of superconductivity in nanoscale particles at finite temperature, *Phys. Rev. B* **62** (2000) 5886.
- [DH00] V. Y. DENISOV and S. HOFMANN, Formation of superheavy elements in cold fusion reactions, *Phys. Rev. C* **61** (2000) 034606.
- [DHI⁺98] T. DITTRICH, P. HÄNGGI, G.-L. INGOLD, B. KRAMER, G. SCHÖN, and W. ZWERGER, *Dissipative Quantum Systems*, Wiley-VCH, Weinheim, 1998.
- [Dir30] P. DIRAC, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **26** (1930) 376.
- [DSM⁺00] I. DIÓSZEGI, N. P. SHAW, I. MAZUMDAR, A. HATZIKOUTELIS, and P. PAUL, Nuclear viscosity of hot rotating ²²⁴Th, *Phys. Rev. C* **61** (2000) 024613.
- [Fes88] H. FESHBACH, Small systems: When does thermodynamics apply?, *IEEE J. Quant. Electronics* **24** (1988) 1320.
- [FG98] P. FRÖBRICH and I. GONTCHAR, Langevin description of fusion, deep-inelastic collisions and heavy-ion-induced fission, *Phys. Rep.* **292** (1998) 131.

- [FH65] R. P. FEYNMAN and A. R. HIBBS, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Mc Graw Hill, New York, 1965.
- [FK86] R. P. FEYNMAN and H. KLEINERT, Effective classical partition functions, *Phys. Rev. A* **34** (1986) 5080.
- [FT92] P. FRÖBRICH and G.-R. TILLACK, Path-integral derivation for the rate of stationary diffusion over a multidimensional barrier, *Nucl. Phys. A* **540** (1992) 353.
- [FV63] R. FEYNMAN and F. VERNON, The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system, *Ann. Phys. (N.Y.)* **24** (1963) 118.
- [FW71] A. L. FETTER and J. D. WALECKA, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, New York, 1971.
- [GK78] D. H. E. GROSS and H. KALINOWSKI, Friction model of heavy-ion collisions, *Phys. Rep.* **45** (1978) 175.
- [GOW85] H. GRABERT, P. OLSCHOWSKI, and U. WEISS, Temperature dependence of quantum decay rates in dissipative systems, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 3348.
- [GOW87] H. GRABERT, P. OLSCHOWSKI, and U. WEISS, Quantum decay rates for dissipative systems at finite temperatures, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 1931.
- [Gra88] H. GRABERT, Escape from a metastable well: The Kramers turnover problem, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 1683.
- [Gri57] J. J. GRIFFIN, Oxygen-16 by the method of generator coordinates, *Phys. Rev.* **108** (1957) 328.
- [GSI88] H. GRABERT, P. SCHRAMM, and G.-L. INGOLD, Quantum Brownian motion: The functional integral approach, *Phys. Rep.* **168** (1988) 115.
- [GT85] R. GIACHETTI and V. TOGNETTI, Variational approach to quantum statistical mechanics of nonlinear systems with application to Sine-Gordon chains, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 912.
- [GT86] R. GIACHETTI and V. TOGNETTI, Quantum corrections to the thermodynamics of nonlinear systems, *Phys. Rev. B* **33** (1986) 7647.
- [GW57] J. J. GRIFFIN and J. A. WHEELER, Collective motions in nuclei by the method of generator coordinates, *Phys. Rev.* **108** (1957) 311.
- [GW80] P. GRANGE and H. WEIDENMÜLLER, Fission probability and the nuclear friction constant, *Phys. Lett. B* **96** (1980) 26.

- [GW84] H. GRABERT and U. WEISS, Crossover from thermal hopping to quantum tunneling, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1787.
- [GWH84] H. GRABERT, U. WEISS, and P. HÄNGGI, Quantum tunneling in dissipative systems at finite temperatures, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 2193.
- [HBD⁺94] D. HOFMAN, B. BACK, I. DIÓSZEGI, C. MONTOYA, S. SCHADMAND, R. VARMA, and P. PAUL, Viscosity of saddle-to-scission motion in hot ²⁴⁰Cf from giant dipole resonance γ yield, *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 470.
- [HHR89] D. HINDE, D. HILSCHER, and H. ROSSNER, Fission timescales of excited nuclei, *Nucl. Phys. A* **502** (1989) 497.
- [HI91] H. HOFMANN and G.-L. INGOLD, Dissipative transport across a parabolic barrier, *Phys. Lett. B* **264** (1991) 253.
- [HI99] H. HOFMANN and F. A. IVANYUK, Nuclear transport at low energies, *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 4603.
- [HIRY01] H. HOFMANN, F. A. IVANYUK, C. RUMMEL, and S. YAMAJI, Nuclear fission: The “onset of dissipation” from a microscopic point of view, *Phys. Rev. C* **64** (2001) 054316.
- [HIT93] H. HOFMANN, G.-L. INGOLD, and M. THOMA, Fission decay rates from a quantal transport equation, *Phys. Lett. B* **317** (1993) 489.
- [HK98] H. HOFMANN and D. KIDERLEN, A self-consistent treatment of damped motion for stable and unstable collective modes, *Int. J. Mod. Phys. E* **7** (1998) 243.
- [HM00] S. HOFMANN and G. MÜNZENBERG, The discovery of the heaviest elements, *Rev. Mod. Phys.* **72** (2000) 733.
- [HN76] H. HOFMANN and C. NGÔ, Influence of statistical fluctuations on the angular distribution of deep inelastic reactions, *Phys. Lett. B* **65** (1976) 97.
- [HN83] H. HOFMANN and J. NIX, Fission dynamics simplified, *Phys. Lett. B* **122** (1983) 117.
- [Hof97] H. HOFMANN, A quantal transport theory for nuclear collective motion: The merits of a locally harmonic approximation, *Phys. Rep.* **284** (4&5) (1997) 137.
- [Hof05] H. HOFMANN, *The Physics of Warm Nuclei and of Mesoscopic Systems*, Oxford University Press, London, 2005.
- [Hol73] G. HOLZWARTH, Four approaches to the function of inertia in a solvable model, *Nucl. Phys. A* **207** (1973) 545.

- [Hov55] L. v. HOVE, Quantum-mechanical perturbations giving rise to a statistical transport equation, *Physica* **21** (1955) 517.
- [HPA⁺98] C. HARTNACK, R. K. PURI, J. AICHELIN, J. KONOPKA, S. BASS, H. STÖCKER, and W. GREINER, Modelling the many-body dynamics of heavy ion collisions: Present status and future perspective, *Eur. Phys. J. A* **1** (1998) 151.
- [HR92] D. HILSCHER and H. ROSSNER, Dynamics of nuclear fission, *Ann. Phys. (Paris)* **17** (1992) 471.
- [HS75] H. HOFMANN and P. SIEMENS, Do thermal fluctuations destroy the concept of critical angular momentum?, *Phys. Lett. B* **58** (1975) 417.
- [HS88] H. HOFMANN and R. SOLLACHER, Nuclear collective dynamics with subsidiary conditions: A quantized Hamiltonian which allows for dissipative motion, *Ann. Phys.* **184** (1988) 62.
- [HSO89] H. HOFMANN, R. SAMHAMMER, and G. OCKENFUSS, A nonperturbative transport theory for nuclear collective motion with a Hamiltonian suited to a self-consistent description, *Nuclear Physics A* **496** (1989) 269.
- [HTA96] K. HAGINO, N. TAKIGAWA, and M. ABE, Thermal fission rate around superfluid-normal phase transition, *Phys. Rev. C* **53** (1996) 1840.
- [HTB90] P. HÄNGGI, P. TALKNER, and M. BORKOVEC, Reaction-rate theory: Fifty years after Kramers, *Rev. Mod. Phys.* **62** (1990) 251.
- [Hub59] J. HUBBARD, Calculation of partition functions, *Phys. Rev. Lett.* **3** (1959) 77.
- [HW53] D. L. HILL and J. A. WHEELER, Nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena, *Phys. Rev.* **89** (1953) 1102.
- [IH99] F. A. IVANYUK and H. HOFMANN, Pairing and shell effects in the transport coefficients of collective motion, *Nucl. Phys. A* **657** (1999) 19.
- [Ing88] G.-L. INGOLD, *Anwendung von Funktionalintegralen auf Transport- und Relaxationsphänomene in dissipativen Quantensystemen*, PhD thesis, Universität Stuttgart, 1988, <http://www.physik.uni-augsburg.de/theo1/ingold/pub/diss/diss.shtml.de>.
- [JK87] W. JAHNKE and H. KLEINERT, The effective classical potential of the double-well potential, *Chem. Phys. Lett.* **137** (1987) 162.
- [KHI92] D. KIDERLEN, H. HOFMANN, and F. A. IVANYUK, Dynamical aspects of thermal nuclear properties, *Nucl. Phys. A* **550** (1992) 473.

- [KK94] R. KARRLEIN and H. KLEINERT, Precise variational tunneling rates of anharmonic oscillator for $g < 0$, *Phys. Lett. A* **187** (1994) 133.
- [KL81] A. K. KERMAN and S. LEVIT, Mean-field study of the nuclear partition function: Application to level density and compound nucleus fission, *Phys. Rev. C* **24** (1981) 1029.
- [Kle86] H. KLEINERT, Particle distribution from effective classical potential, *Phys. Lett. A* **118** (1986) 267.
- [Kle90] H. KLEINERT, *Pathintegrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, World Scientific, Singapore, 1990.
- [Kle92] H. KLEINERT, Improving the variational approach to path integrals, *Phys. Lett. B* **280** (1992) 251.
- [Kle93] H. KLEINERT, Variational approach to tunneling. Beyond the semiclassical approximation of Langer and Lipatov – perturbation coefficients to all orders, *Phys. Lett. B* **300** (1993) 261.
- [KM96] H. KLEINERT and I. MUSTAPIC, Decay rates of metastable states in cubic potential by variational perturbation theory, *Int. J. Mod. Phys. A* **11** (1996).
- [Kra40] H. A. KRAMERS, Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions, *Physica (Utrecht)* **7** (1940) 284.
- [KSA02] G. KOSENKO, C. SHEN, and Y. ABE, A dynamical approach to heavy-ion fusion: $^{48}\text{Ca} + ^{244}\text{Pu}$, *J. Nucl. Radiochem. Sci.* **3** (2002) 19.
- [LAB88] B. LAURITZEN, P. ARVE, and G. BERTSCH, Nuclear level densities in the static-path approximation, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2835.
- [Lan67] J. S. LANGER, Theory of the condensation point, *Ann. Phys. (N.Y.)* **41** (1967) 108.
- [Lan69] J. S. LANGER, Statistical theory of the decay of metastable states, *Ann. Phys. (N.Y.)* **54** (1969) 258.
- [Lav91] B. H. LAVENDA, *Statistical Physics, a probabilistic approach*, J. Wiley, New York, 1991.
- [LB89] B. LAURITZEN and G. BERTSCH, Static path approximation in deformed nuclei, *Phys. Rev. C* **39** (1989) 2412.
- [Lev80] S. LEVIT, Time-dependent mean-field approximation for nuclear dynamical problems, *Phys. Rev. C* **21** (1980) 1594.

- [Lin86] J. LINDHARD, Complementarity between energy and temperature, in *The Lesson of Quantum Theory*, edited by E. DAL, J. DE BOER, and O. ULFBECK, Elsevier, Amsterdam, 1986.
- [LJKO93] G. H. LANG, C. W. JOHNSON, S. E. KOONIN, and W. E. ORMAND, Monte carlo evaluation of path integrals for the nuclear shell modell, *Phys. Rev. C* **48** (1993) 1518.
- [LL79] L. LANDAU and E. LIFSCHITZ, *Lehrbuch der theoretischen Physik: Statistische Physik, Teil 1*, volume V, Akademie-Verlag, Berlin, 5th edition, 1979.
- [LMG65] H. J. LIPKIN, N. MESHKOV, and A. J. GLICK, Validity of many-body approximation methods for a solvable model, *Nucl. Phys.* **62** (1965) 188.
- [LNP80a] S. LEVIT, J. W. NEGELE, and Z. PALTIEL, Barrier penetration and spontaneous fission in the time-dependent mean-field approximation, *Phys. Rev. C* **22** (1980) 1979.
- [LNP80b] S. LEVIT, J. W. NEGELE, and Z. PALTIEL, Time-dependent mean-field theory and quantized bound states, *Phys. Rev. C* **21** (1980) 1603.
- [LO83] A. I. LARKIN and Y. N. OVCHINNIKOV, Quantum tunneling with dissipation, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **37** (1983) 322, [*JETP Lett.* **37**, 382 (1983)].
- [LO84] A. I. LARKIN and Y. N. OVCHINNIKOV, Quantum-mechanical tunneling with dissipation. The pre-exponential factor, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **86** (1984) 719, [*Sov. Phys. JETP* **59**, 420 (1984)].
- [Man89] B. B. MANDELBROT, Temperature fluctuation: A well-defined and unavoidable notion, *Physics Today* **42** (Jan. 1989) 71.
- [MS91] C. MAHAUX and R. SARTOR, Single particle motion in nuclei, in *Advances in nuclear physics*, edited by J. NEGELE and E. VOGT, volume 20, Plenum Press, New York, 1991.
- [MSD72] B. MÜHLSCHLEGEL, D. SCALAPINO, and R. DENTON, Thermodynamic properties of small superconducting particles, *Phys. Rev.* **B 6** (1972) 1767.
- [Neg89] J. W. NEGELE, Microscopic theory of fission dynamics, *Nucl. Phys.* **A 502** (1989) 371.
- [NH77] C. NGÔ and H. HOFMANN, Mass exchange and angular distribution in a dynamical treatment of heavy ion collisions, *Z. Phys.* **A 282** (1977) 83.
- [NO88] J. W. NEGELE and H. ORLAND, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1988.

- [Oga99] Y. A. OGANESSIAN, Synthesis of nuclei of the superheavy element 114 in reactions induced by ^{48}Ca , *Nature* **400** (1999) 242.
- [Oga01] Y. A. OGANESSIAN, Observation of the decay of $^{292}116$, *Phys. Rev. C* **63** (2001) 011301.
- [PBB91] G. PUDDU, P. F. BORTIGNON, and R. A. BROGLIA, The RPA-SPA approximation to level densities, *Ann. Phys. (San Diego)* **206** (1991) 409.
- [PT94] P. PAUL and M. THOENNESSEN, Fission time scales from giant dipole resonances, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **44** (1994) 65.
- [Pü77] F. PÜHLKOFER, On the interpretation of evaporation residue mass distributions in heavy-ion induced fusion reactions, *Nucl. Phys. A* **280** (1977) 267.
- [Pud93] G. PUDDU, Thermal and quantal fluctuations in the pairing plus quadrupole model, *Phys. Rev. C* **47** (1993) 1067.
- [RA02] C. RUMMEL and J. ANKERHOLD, The partition function of an interacting many body system: Beyond the perturbed static path approximation, *Eur. Phys. J. B* **29** (2002) 105.
- [RB74] D. ROWE and R. BASSERMANN, Adiabatic and non-adiabatic cranking models for the solution of the large amplitude time-dependent Hartree-Fock equations and the calculation of nuclear energy surfaces, *Nucl. Phys. A* **220** (1974) 404.
- [RBT95] D. RALPH, C. BLACK, and M. TINKHAM, Spectroscopic measurements of discrete electronic states in single metal particles, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 3241.
- [RBT97] D. RALPH, C. BLACK, and M. TINKHAM, Gate-voltage studies of discrete electronic states in aluminium nanoparticles, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 4087.
- [RC97] R. ROSSIGNOLI and N. CANOSA, The RPA correlations in the presence of thermal fluctuations, *Phys. Lett. B* **394** (1997) 242.
- [RC01] R. ROSSIGNOLI and N. CANOSA, Thermal dependence of pairing correlations in small superconducting particles in a finite magnetic field, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 134523.
- [RCR99] R. ROSSIGNOLI, N. CANOSA, and P. RING, Fluctuations and odd-even effects in small superfluid systems, *Ann. Phys.* **275** (1999) 1.
- [RH01] C. RUMMEL and H. HOFMANN, A self-consistent quantal treatment of decay rates within the perturbed static path approximation, *Phys. Rev. E* **64** (2001) 066126.

- [RH03] C. RUMMEL and H. HOFMANN, Influence of microscopic transport coefficients on the formation probabilities for super-heavy elements, *Nucl. Phys. A* **727** (2003) 24.
- [RH04a] C. RUMMEL and H. HOFMANN, Nuclear quantum transport for barrier problems, to appear in *Prog. Theor. Phys.* (2004); nucl-th/0401040.
- [RH04b] C. RUMMEL and H. HOFMANN, to be published, (2004).
- [Ris89] H. RISKEN, *The Fokker-Planck-Equation*, Springer, Berlin, Heidelberg, 1989.
- [RK01] G. RUDOLPH and A. KELIĆ, Temperature dependence of friction from pre- and post-scission neutron emission, *Nucl. Phys. A* **679** (2001) 251.
- [RR98] R. ROSSIGNOLI and P. RING, The RPA strength function in the presence of thermal fluctuations, *Nucl. Phys. A* **633** (1998) 613.
- [RS80a] J. RANDRUP and W. SWIATECKI, One-body dissipation and nuclear dynamics, *Ann. Phys. (NY)* **125** (1980) 193.
- [RS80b] P. RING and P. SCHUCK, *The Nuclear Many Body Problem*, Springer, Berlin, 1980.
- [Rum00] C. RUMMEL, Erweiterung der Perturbed Static Path Approximation auf dissipative Vorgänge, Master's thesis, Technische Universität München, München, 2000.
- [RZ00] R. ROSSIGNOLI and J. ZAGORODNY, Thermal gap fluctuations in *d*-wave superconductors, *Phys. Lett. A* **276** (2000) 149.
- [RZC99] R. ROSSIGNOLI, J. ZAGORODNY, and N. CANOSA, Parity and finite size effects in the thermodynamics of small superconductors, *Phys. Lett. A* **258** (1999) 188.
- [Sch81] L. SCHULMAN, *Techniques and Applications of Path Integration*, John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [SH83] F. SCHEUTER and H. HOFMANN, On the propagation of a fissioning system across the barrier towards scission, *Nucl. Phys. A* **394** (1983) 477.
- [SJ87] P. J. SIEMENS and A. S. JENSEN, *Elements of Nuclei: Many-Body Physics with the Strong Interaction*, Addison-Wesley, 1987.
- [SJH84] P. SIEMENS, A. JENSEN, and H. HOFMANN, Damping of nuclear collective motion, in *Nucleon-Nucleon Interaction and the Nuclear Many-Body Problem*, edited by S. WU and T. KUO, page 231, World Scientific, Singapore, 1984.

- [SKA02] C. SHEN, G. KOSENKO, and Y. ABE, Two-step model of fusion for synthesis of superheavy elements, *Phys. Rev. C* **66** (2002) 061602.
- [Str57] R. L. STRATONOVICH, A method for the calculation of quantal distribution functions, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **115** (1957) 1097, [*Sov. Phys. Dokl.* **2**, 416 (1958)].
- [Str73] V. STRUTINSKY, The fission width of excited nuclei, *Phys. Lett. B* **47** (1973) 121.
- [TAK02] N. TAKIGAWA, S. AYIK, and S. KIMURA, Diffusion processes with Non-Markovian transport coefficients, (2002), nucl-th/0203042.
- [TB93] M. THOENNESSEN and G. F. BERTSCH, Threshold for dissipative fission, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 4303.
- [TCH⁺87] M. THOENNESSEN, D. CHAKRABARTY, M. HERMAN, R. BUTSCH, and P. PAUL, Giant dipole resonance in highly excited Thorium: Evidence for strong fission hindrance, *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 2860.
- [WAT⁺97] T. WADA, Y. ARITOMO, T. TOKUDA, M. OHTA, and A. Y., Dynamics of the superheavy element synthesis with a diffusion model, *Nucl. Phys. A* **616** (1997) 446c.
- [Wei93] U. WEISS, *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific, Singapore, 1993.
- [WL85] D. WAXMAN and A. J. LEGGETT, Dissipative quantum tunneling at finite temperature, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 4450.
- [WLW02] N. WANG, Z. LI, and X. WU, Improved quantum molecular dynamics model and its applications to fusion reaction near barrier, *Phys. Rev. C* **65** (2002).
- [WW92] E. T. WHITTAKER and G. N. WATSON, *A Course in Modern Analysis*, Cambridge University Press, New York, 1992.
- [WWL03] N. WANG, X. WU, and Z. LI, Dynamic study on fusion reactions for $^{40,48}\text{Ca} + ^{90,96}\text{Zr}$ around Coulomb barrier, *Phys. Rev. C* **67** (2003) 024604.
- [YKNN00] S. K. YOU, C. K. KIM, K. NAHM, and H. S. NOH, Variational perturbation theory for many-particle systems in the functional integral approach, *Phys. Rev. C* **62** (2000) 045503.

Publikationsliste

- [Rum00] C. RUMMEL, Erweiterung der Perturbed Static Path Approximation auf dissipative Vorgänge, Diplomarbeit, Technische Universität München, München, 2000.
- [HIRY01] H. HOFMANN, F. A. IVANYUK, C. RUMMEL, and S. YAMAJI, Nuclear fission: The “onset of dissipation” from a microscopic point of view, *Phys. Rev. C* **64** (2001) 054316.
- [RH01] C. RUMMEL and H. HOFMANN, A self-consistent quantal treatment of decay rates within the perturbed static path approximation, *Phys. Rev. E* **64** (2001) 066126.
- [RHA02] C. RUMMEL, H. HOFMANN, and J. ANKERHOLD, Extensions of the perturbed SPA: Decay rates of damped systems and improvement for small temperatures, in *The Nuclear Many Body Problem 2001*, edited by W. NAZAREWICZ and D. VRETENAR, NATO-Series, pages 215–222, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002.
- [RA02] C. RUMMEL and J. ANKERHOLD, The partition function of an interacting many body system: Beyond the perturbed static path approximation, *Eur. Phys. J. B* **29** (2002) 105.
- [RH03] C. RUMMEL and H. HOFMANN, Influence of microscopic transport coefficients on the formation probabilities for super-heavy elements, *Nucl. Phys. A* **727** (2003) 24.
- [RH04a] C. RUMMEL and H. HOFMANN, Nuclear quantum transport for barrier problems, to appear in *Prog. Theor. Phys.* (2004); nucl-th/0401040.