Inaugural-Dissertation

zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich-Mathematischen
Gesamtfakultät
der
Ruprecht-Karls-Universität
Heidelberg

vorgelegt von
Dipl.-Phys. Holger Merlitz
aus Uelzen

Tag der mündlichen Prüfung: 3. Dezember 1997

Numerische Modellierung der Bose-Einstein Korrelationen in der Pioninterferometrie

Gutachter: Prof. Dr. Dietrich Pelte
Prof. Dr. Iring Bender

Zusammenfassung:

Numerische Modellierung der Bose-Einstein Korrelationen in der Pion-Interferometrie. Ein quantenmechanisches Wellenpaket-Modell zur Beschreibung eines Systems wechselwirkungsfreier Bosonen wird entwickelt. Der Einfluß der Quantisierung wird am Beispiel einer thermischen Quellenfunktion mit analytischen Methoden untersucht. Daraufhin werden mittels eines Monte Carlo Verfahrens bzw. mittels numerischer Integration die Korrelationsfunktionen für eine Reihe unterschiedlicher Quellen, darunter das Transportmodell IQMD, berechnet und deren Korrelationsparameter analysiert.

Zur Simulation der Coulomb Effekte zwischen geladenen Pionen wird ein Verfahren zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung mittels Basisentwicklung vorgestellt und auf eine thermische Quelle angewendet. Um ferner den Einfluß einer geladenen Quelle auf die Korrelationssignale zu studieren, wird ein Molekulardynamik-Verfahren auf Basis der Bohm'schen Quantenmechanik entwickelt und auf thermische Quellen unterschiedlicher Ladungen angewendet.

Abstract:

Numerical modeling of Bose-Einstein correlations in pion interferometry. A quantum mechanical model with wavepackets is developed to describe a system of non-interacting bosons. The influence of the quantization procedure is studied analytically for a thermal source function. The correlation functions for different source functions, including the transport model IQMD, are evaluated using Monte Carlo respectively numerical integration techniques, and their correlation parameters are analysed.

In order to simulate the effect of pion-pion Coulomb interaction, a technique to solve the time dependent Schrödinger equation via basis expansion is presented and applied to a thermal source. Additionally, the influence of a charged source onto the correlation signals is investigated using a moleculardynamics procedure, which is based on Bohm's quantum theory of motion, and which is applied to thermal sources of different charges.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

In der relativistischen Schwerionenphysik beschäftigt man sich mit der Analyse von Kollisionen schwerer Atomkerne. Dies ist das einzige bekannte Verfahren, mit dem sich unter Laborbedingungen Kernmaterie fernab von ihrem Grundzustand erzeugen läßt. Ziel der Studien ist, das Verhalten der Materie bei hohen Dichten und hohen Temperaturen zu verstehen und die Erkenntnisse auf die Physik natürlicher Systeme wie Neutronensterne oder das junge Universum anzuwenden. Ein wesentliches Hindernis auf dem Weg dorthin besteht darin, daß sich der Kollisionsvorgang in räumlichen Dimensionen von wenigen 10^{-15} Metern abspielt und daher nicht direkt beobachtet werden kann. Die Detektoren messen lediglich die Impulskoordinaten der Kollisionsfragmente fernab vom Kollisionsort, und somit steht nur die Hälfte des Phasenraums für die Analyse des Systems zur Verfügung.

Im Jahre 1957 erschien der Aufsatz zweier Astronomen, R. Hanbury-Brown und R. Q. Twiss [1], in dem von der erfolgreichen Bestimmung des Winkeldurchmessers des Sternes Sirius mit dem Resultat 0.0068 ± 0.0005 Bogensekunden berichtet wird. Die Bedeutung dieser Messung wird klar, wenn man sich vor Augen hält, daß die genauesten erdgebundenen Teleskopbeobachtungen eine Auflösung von 1 Bogensekunde kaum unterschreiten. Erzielt wurde diese außerordentliche Genauigkeit mit Hilfe einer sog. *Intensitätsinterferometrie*, bei der die Korrelationsfunktion 2. Ordnung des optischen Intensitätsfeldes bestimmt und aus der Bose-Einstein Überhöhung mittels Fouriertransformation und einem Theorem aus der Quantenoptik, dem *van Cittert-Zernike Theorem* [2], die scheinbare Quellengröße errechnet wird. Da die physikalische Grundlage des Verfahrens auf dem Superpositionsprinzip und der Bose Statistik der Photonen beruht, schlug G. Goldhaber bereits 1960 [3] vor, ein ähnliches Verfahren auch auf Pionen, die in der Hochenergiephysik auftauchen, anzuwenden, um die räumliche Dimension ihres Produktionsortes (Quelle) zu bestimmen und auf diese Weise doch noch Informationen über den Ortsanteil des Phasenraums zu erhalten.

Leider ist die Physik der Pionen in der Schwerionenphysik erheblich komplizierter als die der Photonen in der Astronomie. Dies hängt insbesondere mit den folgenden Fakten zusammen:

- Die Quelle der Pionen ist nicht statisch, sondern einer rapiden zeitlichen Entwicklung unterworfen.

- Die räumliche Dimension der Quelle ist von gleicher Größenordnung wie die de Broglie Wellenlänge der Pionen, so daß zusätzliche Quanteneffekte auftauchen.

- Die Pionen tragen eine elektrische Ladung, so daß sie miteinander und mit der Quelle wechselwirken.

Diese Umstände führen dazu, daß es nicht möglich ist, aus den Korrelationen im Impulsraum durch Fouriertransformation direkt die Intensitätsverteilung der Quelle zu bestimmen: Das van Cittert-Zernike Theorem gilt hier nicht mehr. Die einzige Möglichkeit besteht folglich darin, die Pionquelle zu modellieren und durch numerische Verfahren die Korrelationsfunktion im Impulsraum zu berechnen und anschließend mit den gemessenen Daten zu vergleichen, und zwar so lange und iterativ, bis man die Physik der realen Quelle in dem Modell ausreichend realistisch repräsentiert hat und keine signifikanten Abweichungen zwischen den Korrelationsfunktionen mehr findet.

Die Komplexität einer Schwerionenkollision erfordert es, die zeitliche Entwicklung des Pionsystems künstlich in 3 Phasen einzuteilen. Die **Phase 1** kann man als *Produktionsphase* bezeichnen; hier dominiert die starke Wechselwirkung. Es werden Nukleonen durch Stöße zu Resonanzen angeregt, welche anschließend in Nukleonen und Mesonen, deren leichteste und daher am häufigsten produzierte Vertreter die Pionen sind, zerfallen. Bei hohen Energien kann auch eine Quarkfragmentation zur Erzeugung von Pionen beitragen. Die Pionen können mehrfach absorbiert und reemittiert werden, bis sie schließlich die Quelle verlassen oder die Quelle durch Expansion eine Dichte erreicht, bei der Kollisionen der einzelnen Partikel unwahrscheinlich werden. Dieser Vorgang wird etwas vereinfacht als *Ausfrieren* (Freeze-out) bezeichnet. Er markiert das Ende der ersten Phase, das Ende der Dominanz der starken Wechselwirkung und die Entkopplung des Piongases von dem Nukleongas. Von einer exakten theoretischen Beschreibung der ersten Phase ist man weit entfernt. Es dominieren thermische („Feuerball") Modelle, in denen man dem System eine Dichte und eine Temperatur zuordnet und auf eine Modellierung komplizierter Details der Wechselwirkung verzichtet.

In der **Phase 2**, der *Coulomb Phase*, können wir die Pionen als ein heißes, Coulomb wechselwirkendes Bose-Gas auffassen. Dies ist die Phase, mit der wir uns im Detail beschäftigen werden. Zwei entscheidende Vorgänge beherrschen diese Phase:

1. Die Pionen verlassen die Quelle nach dem Ausfrieren ohne nennenswerte Bose-Einstein Korrelationen, da sie aufgrund der chaotischen Kollisionsvorgänge keine räumlich ausgebreitete Wellenfunktion bilden konnten. Dies wird nun nachgeholt.

2. Die Pionen wechselwirken mit dem Coulombfeld der Nukleonen und untereinander. Da sich die meisten Pionen aufgrund ihrer geringen Masse (140 MeV) schneller bewegen als die Nukleonen (Masse: 940 MeV), bleiben letztere zurück und ihr Coulombfeld wirkt näherungsweise wie ein externes Zentralfeld.

In der **Phase 3**, der *freien Phase*, ist auch die Coulombwechselwirkung vernachlässigbar und die Pionen propagieren ohne weitere Änderung ihres Impulsraumzustands, bis sie im Detektor nachgewiesen werden und ihre Korrelationsfunktion bestimmt werden kann. Diese wird deutlich von den Bose-Einstein Korrelationen dominiert, während die Coulomb-Einflüsse als Störungen aufgefaßt werden können.

Abbildung 1.1 beschreibt schematisch die Vorgehensweise bei der numerischen Modellierung von Korrelationssignalen:

1. Am Anfang steht die Quellenfunktion. Sie ist ein Modell für die Vorgänge in Phase 1 und liefert die Phasenraumverteilung der Pionen zum Zeitpunkt des Freeze-out, die noch keine Bose-Einstein Korrelationen enthält. Unser Verständnis der Kernphysik spiegelt sich in der Quellenfunktion wieder. Diese kann a) eine einfache Parametrisierung oder b) das Resultat einer beliebig komplizierten mikroskopischen Simulation sein. In dieser Arbeit interessieren wir uns für die Modellierung der Phase 2, so daß wir möglichst einfache Parametrisierungen der Quellenfunktion bevorzugen werden. Eine Ausnahme bildet Abschnitt 4.8, in dem wir das Transportmodell IQMD als Quellenfunktion verwenden.

2. Der wichtigste Schritt in Richtung Bose-Einstein Korrelation ist die Konstruktion eines symmetrischen n- Teilchen Zustands. Sehr beliebt ist die Verwendung ebener Wellen als 1- Teilchen Funktionen und die jeweils paarweise Symmetrisierung gemäß
$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \sim e^{-i\,\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_1/\hbar}\; e^{-i\,\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_2/\hbar} + e^{-i\,\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_2/\hbar}\; e^{-i\,\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_1/\hbar}\,, \tag{1.1}$$
wobei $\mathbf{p}_i$ die Impulse sind. Um auch Korrelationen höherer Ordnung modellieren zu können, wurden Verfahren mit symmetrisierten n- Teilchen Wellenfunktionen entwickelt [4, 5, 6]. Eine detailgetreue Modellierung der Phase 2 setzt jedoch die Verwendung lokalisierter Zustände im Ortsraum voraus. In dieser Arbeit wird deshalb eine Wellenpaket Beschreibung mit n- facher Permutationssymmetrie entwickelt.

3. Die 2- Teilchen Korrelationsfunktion
$$\mathcal{C}_{12}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{\mathcal{P}_{12}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)}{\mathcal{P}(\mathbf{p}_1)\,\mathcal{P}(\mathbf{p}_2)} \tag{1.2}$$
mit den 1- Teilchen Wahrscheinlichkeitsdichten $\mathcal{P}(\mathbf{p}_i)$ und der 2- Teilchen Wahrscheinlichkeitsdichte $\mathcal{P}_{12}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ kann durch (i. a. Monte Carlo-) Integration des Impulsraumzustands über die Quellenfunktion berechnet werden. Es werden dabei erneut nur die 2- Teilchen Korrelationen erfaßt, da eine numerische Integration eines höherdimensionalen Zustands schnell die Kapazitäten der Rechner sprengen würde. Ein weiteres Problem stellt die adequate Behandlung der Coulombeffekte dar.

4. Alternativ kann das System daher auch mit Hilfe einer Simulation beschrieben werden, die ereignisweise mit unterschiedlichen, von der Quellenfunktion bestimmten Anfangsbedingungen durchgeführt wird. Den Coulombeffekten kann dabei in zeitabhängigen Verfahren Rechnung getragen werden.

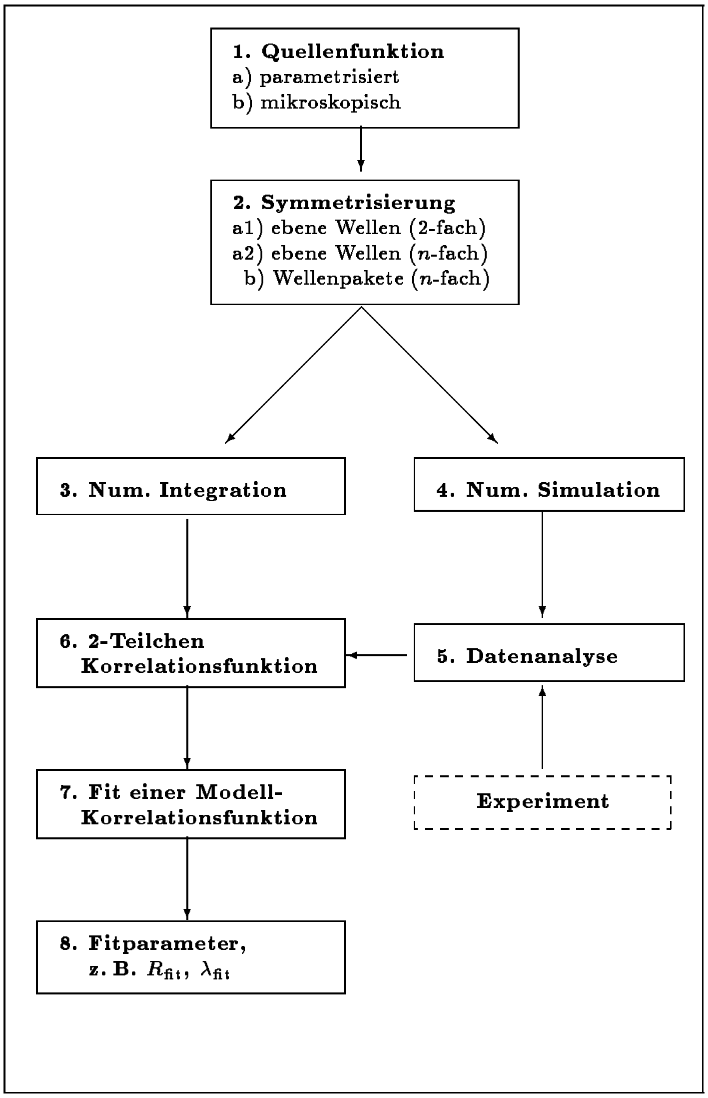

Abbildung 1.1: Flußdiagramm zur numerischen Modellierung von Korrelationssignalen

5. Die ereignisweise erzeugten Daten können einer Analyse unterzogen werden, die den bei experimentellen Daten verwendeten Prozeduren sehr nahe kommt. Dies schließt auch komplizierte Detektorsimulationen mit ein und kann zu wesentlich realistischeren Resultaten führen als eine numerische Integration der Korrelationsfunktion.

6. Die resultierende Korrelationsfunktion wird i. a. nicht direkt verwendet.

7. Stattdessen benutzt man einfache Modelle, die eine analytische Korrelationsfunktion mit wenigen freien Parametern besitzen, welche mittels eines Anpassungsfits an die numerisch berechnete Korrelationsfunktion bestimmt werden.

8. Die Werte dieser Parameter, z. B. der gefittete Korrelationsradius $R_{\rm fit}$ und die Chaotizität $\lambda_{\rm fit}$, repräsentieren das Resultat der Analyse und verlangen eine adequate Interpretation.

Diese Arbeit beginnt mit der Vorstellung des Wellenpaket Modells in Kapitel 2 und einer Analyse der statistischen Eigenschaften des gemischten Ensembles, das aus einer einfachen, thermischen Quellenfunktion nach Einführung der Quantisierung hervorgeht (Kapitel 3). Bis hierhin sind die Resultate noch auf analytischem Wege herleitbar. In Kapitel 4 wird ein Monte Carlo Verfahren zur Simulation wechselwirkungsfreier Pionen entwickelt und auf eine Reihe komplizierterer Systeme angewendet. Erstmals wird dabei der Einfluß eins breiten Spektrums unterschiedlicher Quellenfunktionen auf die Korrelationssignale mit einem konsequent quantenmechanischen Verfahren untersucht. Die Kapitel 5 und 6 befassen sich mit dem Einfluß der Coulombwechselwirkung auf die Korrelationssignale. Nach Wissen des Autors werden dabei erstmals zeitabhängige quantenmechanische Methoden angewendet, um den Randbedingungen des Systems im Coulombfeld gerecht zu werden.

Diese Arbeit wurde im Rahmen der **FOPI**-Kollaboration der *Gesellschaft für Schwerionenforschung* (GSI) in Darmstadt durchgeführt. Das vorhandene Schwerionensynchrotron liefert für Nickelkerne eine maximale Einschußenergie von ca. 2 GeV pro Nukleon. Dabei werden in zentralen Stößen typischerweise 10–20 Pionen gleicher Ladung erzeugt. Die in den Simulationen verwendeten Parameterwerte liegen daher in einem für solche Systeme typischen Bereich [7, 8], obwohl die meisten der gewonnenen Aussagen auch für Systeme höherer Energien und Multiplizitäten ihre Relevanz behalten. Einschränkungen werden in Abschnitt 4.4 diskutiert.

Diese Arbeit ist weder experimentell noch theoretisch, sondern dem interdisziplinären Bereich der numerischen Modellierung und Simulation zuzuordnen. Die hier verwendeten Methoden gehören auch nicht in den Bereich der Kern- oder Schwerionenphysik, denn die starke Wechselwirkung tritt in unserem System nicht auf. Sie behandeln vielmehr die Physik eines endlichen, inhomogenen und Coulomb-wechselwirkenden Bose-Gases bei endlicher Temperatur. Ein Teil der gewonnenen Resultate wurde bereits publiziert [9], der Inhalt des Kapitels 5 wurde zur Publikation angenommen [10].

Kapitel 2

Die Quantenmechanik freier Bosonen

2.1 Wellenpakete als Einteilchenzustände

In der Quantenmechanik sind die Operatoren für den Ort und den Impuls nicht kommutabel; man kann daher einem Teilchen niemals gleichzeitig einen lokalisierten Orts- und Impulszustand zuordnen. Die mathematische Beschreibung eines Phasenraumzustands erfordert daher eine intrinsische Unschärfe der Koordinaten, die man durch Überlagerung mehrerer Eigenzustände erreicht. Um ein solches Wellenpaket zu konstruieren, gehen wir aus von der freien Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\,\partial_t\psi(\mathbf{r},t)\ , \tag{2.1}$$

deren Lösung die ebene (monochromatische) Welle

$$\psi(\mathbf{r},t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)\right) \tag{2.2}$$

ist. E ist die Energie des „Teilchens“. Analoge Lösungen gibt es auch für die Wellengleichung in der Elektrodynamik, jedoch mit dem wesentlichen Unterschied, daß dort die Dispersionsrelation $E = p/c$ lautet, im Gegensatz zur Quantenmechanik, wo $E = p^2/(2m)$ gilt. Aus der Linearität der Schrödingergleichung folgt, daß auch jede beliebige Superposition ebener Wellen eine Lösung darstellt, so daß wir folgende allgemeine Lösung der freien Schrödingergleichung angeben können:

$$\psi(\mathbf{r},t) = h^{-3/2}\int A(\mathbf{p})\,\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left((\mathbf{p}-\mathbf{P})\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R}^\circ) - E\cdot(t-\tau)\right)\right)\,d\mathbf{p}\ . \tag{2.3}$$

Die Amplitudenfunktion $A(\mathbf{p})$ ist zeitunabhängig, da das Teilchen keine Wechselwirkung erfährt. Ferner haben wir noch willkürliche Phasen $\mathbf{R}^\circ$, $\mathbf{P}$ und τ eingeführt. Als Amplitudenfunktion verwenden wir eine Gauß-Verteilung der Form

$$A(\mathbf{p}) = \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sigma_\circ}{\hbar}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{\sigma_\circ^2}{\hbar^2}(\mathbf{p}-\mathbf{P})^2\right)\ , \tag{2.4}$$

die um den Mittelwert $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{P}$ zentriert ist und deren Quadrat eine Standardabweichung

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma_o} \tag{2.5}$$

in jede der drei Koordinatenrichtungen besitzt. Die Wahl einer Gauß-Funktion ist deshalb günstig, weil in diesem Fall das Integral Glng. (2.3) leicht analytisch lösbar ist und die resultierende Wellenfunktion

$$\psi(\mathbf{r}, t) = (2\pi s^2(t))^{-3/4} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{P} \cdot \mathbf{r} - E \cdot (t - \tau)) - \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))^2}{4s\sigma_o}\right) \tag{2.6}$$

ebenfalls ein Gauß-förmiges Amplitudenquadrat besitzt:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = (2\pi\sigma^2)^{-3/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))^2}{2\sigma^2}\right) . \tag{2.7}$$

Hier haben wir die folgenden Abkürzungen eingeführt:

$$E = \frac{P^2}{2m} , \tag{2.8}$$

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}^\circ + \frac{\mathbf{P} \cdot (t - \tau)}{m} , \tag{2.9}$$

$$s = \sigma_o \left(1 + \frac{i\hbar(t - \tau)}{2m\sigma_o^2}\right) \tag{2.10}$$

und

$$\sigma = |s| = \sigma_o \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar(t - \tau)}{2m\sigma_o^2}\right)^2} . \tag{2.11}$$

Diese Wellenfunktion weist mehrere Besonderheiten auf:

1. Der Schwerpunkt des Wellenpakets bewegt sich mit der konstanten Gruppengeschwindigkeit $\mathbf{P}/m$. Im Gegensatz zur ebenen Welle Glng. (2.2) ist diese Lösung der Schrödingergleichung daher nicht stationär.

2. Die Breite des Wellenpakets σ ist zeitabhängig. Falls wir den Zeitpunkt der Entstehung auf τ festlegen, besitzt die Wellenfunktion ein „Alter" von $t - \tau$, und die Breite des Amplitudenquadrats hat zum Zeitpunkt $t \equiv \tau$ den minimalen Wert σ_o. Diese *Dispersion* von Wellenpaketen im Vakuum hat kein Analogon in der Elektrodynamik, wohl aber in der klassischen statistischen Mechanik, wie in Kapitel 2.2 diskutiert wird.

3. Im Gegensatz zur ebenen Welle ist das Amplitudenquadrat Glng. (2.7) normiert – eine wichtige Voraussetzung für die Interpretation dieser Größe als Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines quantenmechanischen Ensembles.

Die Impulsraumdarstellung erhalten wir entweder durch Fouriertransformation

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{p},t) &= h^{-3/2}\int\psi(\mathbf{r},t)\,\exp\left(\frac{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right)\,d^3\mathbf{r}\\ &= \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}\frac{\sigma_o}{\hbar}}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{1}{4\sigma_p^2}\Delta\mathbf{p}^2+\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{R}^\circ\cdot\Delta\mathbf{p}-\frac{p^2\cdot(t-\tau)}{2m}\right)\right)\end{aligned} \tag{2.12}$$

mit $\Delta\mathbf{p} = \mathbf{p}-\mathbf{P}$, oder direkt durch Umschreiben von Glng. (2.3) nach Einsetzen von Glng. (2.4). In dieser Darstellung ist der Zustand stationär, d. h. die einzige Zeitabhängigkeit besteht in einer rotierenden Phase. Wir überprüfen noch Heisenberg's Unschärferelation und stellen fest, daß die Unschärfe

$$\sigma\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.13}$$

minimal ist für $t\equiv\tau$, d. h. zum Zeitpunkt der Entstehung.

In der Praxis schreibt man die Wellenfunktion (2.6) meist in einer variierten Form, indem man den Vorfaktor reell wählt und den verbleibenden komplexen Anteil mit in die Phase aufnimmt. Man erhält dann

$$\psi(\mathbf{r},t) = \left(2\pi\sigma^2(t)\right)^{-3/4}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{P}\cdot\mathbf{r}-\theta(t)\right)-\frac{\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}(t)\right)^2}{4s\sigma_o}\right) \tag{2.14}$$

mit

$$\theta(t) = E\cdot(t-\tau)+\frac{3\hbar}{2}\arctan\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\right)\ . \tag{2.15}$$

2.2 Analogien in der klassischen Mechanik

Das folgende Beispiel eines klassischen Systems stammt von P. Holland ([11], S. 54): Betrachten wir ein Ensemble von freien Einteilchensystemen, dessen Phasenraumverteilung durch Gauß-Verteilungen in Orts- und Impulsraum charakterisiert ist:

$$f_o(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\sigma_o^2)^{3/2}}\exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{2\sigma_o^2}\right)\times\frac{1}{(2\pi mT)^{3/2}}\exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2mT}\right)\ . \tag{2.16}$$

Da es keine Wechselwirkung gibt, muß die Relation

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = f_o(\mathbf{r}-\mathbf{p}t/m,\mathbf{p}) \tag{2.17}$$

erfüllt sein und wir erhalten

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = \frac{1}{(2\pi\sigma_o^2)^{3/2}}\exp\left(-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{p}t/m)^2}{2\sigma_o^2}\right)\times\frac{1}{(2\pi mT)^{3/2}}\exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2mT}\right)\ , \tag{2.18}$$

so daß wir für die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum

$$\mathcal{P}(\mathbf{r},t) = \int f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)\, d^3p = (2\pi\sigma^2)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{2\sigma^2}\right) \tag{2.19}$$

mit $\sigma^2 = \sigma_o^2 + Tt^2/m$ erhalten. Ein Vergleich mit Glng. (2.7) ergibt Übereinstimmung nach Einführung der „Quantentemperatur“

$$T_q \equiv \frac{\hbar^2}{4m\sigma_o^2}\,. \tag{2.20}$$

Wir haben damit gezeigt, daß ein klassisches, thermisches System, das zu einem Zeitpunkt $t = 0$ einer Gauß-Verteilung im Ortsraum genügt, auf dieselbe Weise dispergiert wie das Amplitudenquadrat des quantenmechanischen, Gauß'schen Wellenpaketes. Der fundamentale Unterschied beider Systeme liegt darin, daß uns niemand verbietet, die Temperatur T im klassischen System beliebig klein zu machen, die Quantentemperatur T_q jedoch durch die geometrische Abmessung des Systems zum Zeitpunkt $t = 0$ festgelegt ist. Die Frage, die sich hier stellt, lautet daher: Gibt es einen physikalischen Prozeß, der den Zusammenhang von Temperatur und räumlicher Abmessung, d. h. die Unschärferelation, begründet ?

Hinweise dazu findet man in stochastischen Zugängen zur Quantenmechanik. Bereits kurz nach Aufstellung der Schrödingergleichung fiel die formale Analogie der freien Schrödingergleichung zur Diffusionsgleichung

$$D\Delta\rho(\mathbf{r},t) = \partial_t\rho(\mathbf{r},t) \tag{2.21}$$

auf. Diese geht in Glng. (2.1) über, falls man den imaginären Diffusionskoeffizienten

$$D \equiv \frac{i\hbar}{2m} \tag{2.22}$$

einführt. In der Tat erhält man auf diese Weise das Wellenpaket Glng. (2.6) als Lösung[1] von Glng. (2.21), oder äquivalent, indem man die Greensfunktion für die freie Diffusion ([12], s. 17),

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}',t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4Dt}\right)\,, \tag{2.23}$$

über die Gauß-Amplitude integriert:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}',t)\,\psi(\mathbf{r}',0)\, d^3r'\,. \tag{2.24}$$

In der statistischen Mechanik läßt sich die treibende Kraft der Diffusion auf den Einfluß eines Mediums zurückführen. Gleichungen der Form (2.21) liefern hier nur Beschreibungen effektiver Größen, während die eigentliche Dynamik durch unzählige Stöße der

[1] Wobei ρ allerdings seine Rolle als Wahrscheinlichkeitsdichte verliert und zur Wahrscheinlichkeitsamplitude wird

zu beschreibenden Partikel mit den Molekülen des Mediums bestimmt wird. Auf diese Weise erhält man auch in der statistischen Mechanik Unschärferelationen, die denen der Quantenmechanik analog sind. Es gibt zahlreiche Ansätze, ein künstliches Medium auch in die Theorie der elementaren Teilchen einzuführen[2]. Dabei muß die Interpretation des imaginären Diffusionskoeffizienten eine zentrale Rolle spielen. Gemäß Einstein kann man den Diffusionskoeffizienten im thermischen Gleichgewicht darstellen als

$$D = \frac{T}{\zeta}\,, \tag{2.25}$$

wobei ζ ein Dissipationsterm (Reibung) ist. Diese Dissipation führt dazu, daß das System seine Invarianz unter Zeitumkehr verliert (Irreversibilität), und daher können Lösungen der Diffusionsgleichung nicht gleichzeitig Lösungen der (reversiblen) Schrödingergleichung sein. Die Reversibilität wird jedoch zurückgewonnen, falls man die Dissipation rein imaginär werden läßt[3], und unter Verwendung der bereits vorgestellten Quantentemperatur Glng. (2.20) erhalten wir für unsere Wellenpakete

$$\zeta = -\frac{i\hbar}{2\sigma_o^2}\,, \tag{2.26}$$

einen Ausdruck, dessen Interpretation freilich nicht so recht gelingen will.

Überlegungen dieser Art können den philosophischen Grenzbereich nur dann verlassen, wenn sie zu Vorhersagen führen, die den Rahmen der etablierten Theorie sprengen und die letztendlich auch experimentell zugänglich sind. Dies ist in einer Diffusionstheorie der Quantenmechanik prinzipiell der Fall: Ebenso wie die Diffusionsgleichung nur gültig ist in Zeitskalen, die weit größer sind als die mittlere Kollisionszeit mit den Partikeln des Wärmebades, sollte bei Anwesenheit eines Mediums auch die Schrödingergleichung ihre Gültigkeit für sehr kurzzeitige Phänomene verlieren. G. Comisar [15] hat darauf hingewiesen, daß sich der Diffusionskoeffizient für kuzzeitige Phänomene in einer Weise verändern würde, die das Teilchen u. a. mit einer erhöhten effektive Masse versieht. Nun sind kurze Zeiten i. a. mit hohen Energien verbunden, und hier verläßt die Quantenmechanik ohnehin ihren Gültigkeitsbereich. In einer adequaten relativistischen Beschreibung treten ebenfalls erhöhte Massen auf, so daß die experimentelle Verifikation eines Nichtgleichgewicht-Effekts schwierig ist.

Zusammenfassend bleibt die bemerkenswerte Analogie der klassischen Diffusionstheorie mit der Quantenmechanik. Die Existenz der imaginären Reibung ist ein Tribut an die Galileiinvarianz der mikroskopischen Welt, kann jedoch nicht verstanden werden, solange man die Eigenschaften des zugrundeliegenden (hypothetischen) Mediums nicht analysiert. Zwei fundamentale Fragen bleiben offen:

1. Kann der Einfluß eines Mediums, das eine rein imaginäre Reibung erzeugt, als Erklärungsansatz für eventuell beobachtbare Phänomene, die nicht im Standardformalismus der Quantenmechanik enthalten sind, herangezogen werden?

[2] Man vergleiche z. B. [13] und die darin zitierte Literatur, insbesondere [14].

[3] Eine Vorgehensweise, die wir aus der Elektrodynamik kennen, wo man Blindwiderstände einführt, die den Elektronenfluß verändern, ohne ihm Energie zu entziehen.

2. Wenn es in mikroskopischen Systemen nur imaginäre Dissipation gibt, warum erleben wir dann reellwertige Dissipation im Alltag ?

Die erste Frage ist bis heute offen. Die Zweite ist verbunden mit der Frage nach der Entstehung der Irreversibilität in makroskopischen Systemen, deren mikroskopische Komponenten reversiblen Bewegungsgleichungen genügen. Dieses Problem wurde in der statistischen Mechanik ausgiebig analysiert und ist zumindest in Ansätzen verstanden [16].

2.3 Mehrteilchensysteme

Die Beschreibung eines Systems n identischer Bosonen erfolgt durch das vollständig symmetrisierte Produkt

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n, t) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_\sigma \psi_{\sigma(1)}(\mathbf{r}_1, t)\, \psi_{\sigma(2)}(\mathbf{r}_2, t) \cdots\, \psi_{\sigma(n)}(\mathbf{r}_n, t) \qquad (2.27)$$

der n Einteilchenfunktionen $\psi_i(\mathbf{r}_j, t)$. Der Index i bezieht sich auf die Größen $\mathbf{R}_i(t)$, $\mathbf{P}_i$ und τ_i in Glng. (2.6). Die Summe läuft über alle $n!$ Permutationen $\{\sigma(1), \sigma(2), \ldots, \sigma(n)\}$, weshalb das Objekt (2.27) auch *Permanente* genannt wird, im Gegensatz zur vollständig antisymmetrischen (Slater-) Determinante, die ein System n identischer Fermionen beschreibt. Der hier vorgestellte Ansatz bedarf einiger Bemerkungen:

1. Formal ist jede Superposition von Lösungen eine Lösung der Schrödingergleichung. Die Tatsache, daß man für Bosonen nur symmetrisierte Zustände wählt (und antisymmetrische für Fermionen), stellt eine Superauswahlregel dar, die nicht aus dem Basis-Formalismus der Quantenmechanik hervorgeht, sondern als zusätzliches Postulat eingeführt wird. Nachtmann [17] hat bemerkt, daß die Symmetrieeigenschaften der Mehrteilchensysteme aus der Forderung der sog. *Mikrokausalität*, d. h. der Forderung nach (Anti-) Vertauschbarkeit von Operatoren raumartiger Ereignisse, hervorgehen. Umgekehrt hat Valentini [18] demonstriert, wie eine jegliche Abweichung der Wahrscheinlichkeitsamplituden von der (anti-) symmetrischen Form das Senden überlichtschneller Signale prinzipiell ermöglichen würde. Es scheint daher, daß die Einführung der Permutationssymmetrie in die Quantenmechanik der Mehrteilchensysteme aus einem Kompromiß mit relativistischen Prinzipien hervorgegangen ist.

2. Der Zusatz „identisch“ bezieht sich auf die notwendige Übereinstimmung der Teilchen „in allen inneren Freiheitsgraden“ ([19], Seite 67). Dazu gehören Masse, elektrische Ladung, Baryonenzahl und (vermutlich) Leptonenzahl, nicht jedoch Orts- und Impulskoordinaten. Es handelt sich hier um weitere Superauswahlregeln, die festlegen, unter welchen Umständen das Superpositionsprinzip angewendet werden muß. H. Primas hat darauf hingewiesen, daß diese Ausnahmen vom Superpositionsprinzip dann auftreten können, wenn „klassische Operatoren“ ins

Spiel kommen, wobei ein Operator „klassisch“ genannt wird, falls er mit allen anderen für das System relevante Operatoren vertauscht. Ferner sind klassische Operatoren effektive Operatoren in dem Sinne, daß sie als Resultat einer Kopplung mit einem System hervorgehen, das sehr viele Freiheitsgrade besitzt. In der Tat werden im Rahmen der Quantenfeldtheorie Massen und Ladungen als effektive Größen interpretiert. Ein weiteres Beispiel ist die Chiralität eines Moleküles, die in einem Lösungsmittel zur optischen Aktivität führt. Je „makroskopischer“ ein System ist, desto mehr klassische Operatoren treten infolge von Kopplung an sehr vielen Freiheitsgraden auf, bis schließlich alle relevanten Operatoren vertauschen.

3. Als Superposition dürfen nur Zustände zu identischen Zeitpunkten gewählt werden, jegliche Retardierungseffekte sind ausgeschlossen. Diese Regel führt zu der vieldiskutierten Eigenschaft der Nichtlokalität. Die Symmetrieeigenschaften des Systems verhindern jedoch, wie in 1. bemerkt, Verletzungen des Kausalitätsprinzips.

Den Impulsraumzustand erhalten wir über eine Fouriertransformation zu

$$\Phi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_n, t) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_\sigma \phi_{\sigma(1)}(\mathbf{p}_1, t)\, \phi_{\sigma(2)}(\mathbf{p}_2, t) \cdots\, \phi_{\sigma(n)}(\mathbf{p}_n, t) \tag{2.28}$$

mit den Einteilchenamplituden aus Glng. (2.12). Dieser Zustand ist wieder stationär, da keinerlei Kräfte wirken.

2.4 Der 2-Teilchen Zustand in Wellenpaket Darstellung

Wir betrachten die normierte 2-Teilchen Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum unter Verwendung der Wellenpakete Glng. (2.12):

$$|\Phi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)|^2 = \frac{\mathcal{N}_2}{2!} \Big(|\phi_1(\mathbf{p}_1)|^2\, |\phi_2(\mathbf{p}_2)|^2 + |\phi_2(\mathbf{p}_1)|^2\, |\phi_1(\mathbf{p}_2)|^2 + 2\, Re\{\mathcal{I}\} \Big) \tag{2.29}$$

mit dem Interferenzterm

$$\mathcal{I} = \phi_1(\mathbf{p}_1)\, \phi_2(\mathbf{p}_2) \phi_2^*(\mathbf{p}_1)\, \phi_1^*(\mathbf{p}_2) \tag{2.30}$$

und der Normierung

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_2^{-1} &= \frac{1}{2!} \int \Big(|\phi_1(\mathbf{p}_1)|^2\, |\phi_2(\mathbf{p}_2)|^2 + |\phi_2(\mathbf{p}_1)|^2\, |\phi_1(\mathbf{p}_2)|^2 + 2\, Re\{\mathcal{I}\} \Big)\; d^3p_1\, d^3p_2 \\ &= 1 + \exp\left(\frac{-(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2)^2}{4\sigma_\mathrm{p}^2} \right)\, \exp\left(\frac{-(\mathbf{R}_1^\circ - \mathbf{R}_2^\circ)^2}{4\sigma_\mathrm{o}^2} \right) . \end{aligned} \tag{2.31}$$

Wir diskutieren zunächst den Interferenzterm. Dazu schreiben wir $\mathcal{I} = a \cdot \exp b$ mit

$$b = \frac{i}{\hbar} \mathbf{R}^{\circ}_{12} \cdot \mathbf{p}_{12} - \frac{1}{4\sigma_p^2} \left(\Delta\mathbf{p}_{11}^2 + \Delta\mathbf{p}_{22}^2 + \Delta\mathbf{p}_{21}^2 + \Delta\mathbf{p}_{12}^2 \right) \tag{2.32}$$

und $\Delta\mathbf{p}_{ij} = \mathbf{p}_i - \mathbf{P}_j$, $\mathbf{p}_{12} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$ und $\mathbf{R}^{\circ}_{12} = \mathbf{R}^{\circ}_1 - \mathbf{R}^{\circ}_2$. Wir erkennen, daß der Interferenzterm der Impulsraum-Wellenfunktion Information über die Phasendifferenz $\mathbf{R}^{\circ}_{12}$ enthält, eine Größe, die wir im Wellenpaket Modell als die Differenz der Wellenpaket Zentren zum Zeitpunkt $t = 0$ interpretieren. Da diese Differenz eng an die geometrischen Verhältnisse der Teilchenquelle gekoppelt ist, besteht prinzipiell die Möglichkeit, dem quantenmechanischen Mehrteilchenzustand im Impulsraum Informationen über den Quellendurchmesser zu entnehmen. Darauf basiert die Hanbury-Brown und Twiss (HBT) Interferometrie, die wir in Abschnitt 3.2 studieren werden.

Weitere Information können wir der Normierung (2.31) entnehmen. Der zweite Term stammt aus dem Überlapp der Wellenpakete in Orts- und Impulsraum. Ist dieser vernachlässigbar, dann nimmt $\mathcal{N}_2^{-1}$ den Wert 1 an; sind die Zustände hingegen identisch, dann wird der Wert 2 erreicht. Diese Beobachtung führt zu einer interessanten Erkenntnis: Der Überlappbereich beider Zustände hat ein doppelt so großes statistisches Gewicht wie der restliche Bereich, eine Folge der positiven Interferenz, die mit der Symmetrisierung der Zustände einhergeht. Diese Erkenntnis kann dazu verwendet werden, zu einer vereinfachten Darstellung eines Zustands überzugehen, indem man jede Feinstrukturierung des Phasenraumes außer Acht läßt und nur noch die binäre Unterscheidung der Zustände in *identisch* oder *verschieden* macht. Dies führt zu der Quantenstatistik, die in [5, 6] diskutiert wird.

Ein Zustand repräsentiert ein reines quantenmechanisches Ensemble. In der Hochenergiephysik hat man es in der Regel mit Daten zu tun, die aus einer großen Anzahl von Ereignissen aufsummiert werden. In jedem dieser Ereignisse herrschen unterschiedliche Anfangs- und Randbedingungen, so daß man Observable aus statistischen Gemischen gewinnt. Diese erhält man, indem man die reinen Zustände über klassische Ensemble mittelt. Wie die Eigenschaften solcher gemischten Ensemble aussehen, wollen wir in dem nächsten Kapitel untersuchen.

Kapitel 3

Statistische Eigenschaften gemischter Ensemble

Der quantenmechanische Zustand des freien n Teilchensystems ist durch die Angabe der Parameter

$$\{(\mathbf{R}_1, \mathbf{P}_1, \tau_1), (\mathbf{R}_2, \mathbf{P}_2, \tau_2), \ldots, (\mathbf{R}_n, \mathbf{P}_n, \tau_n)\} \tag{3.1}$$

die initiale Wellenpaketbreite σ_o eindeutig beschrieben. Eine Messung der Impulskoordinaten würde nach Normierung eine Wahrscheinlichkeitsdichte gemäß $|\Phi|^2$ in Glng. (2.28) ergeben. In der Schwerionenphysik hingegen hat man nicht die Möglichkeit, mehrmals exakt identische Anfangsbedingungen der Form (3.1) zu erzeugen. Stattdessen führen die komplizierten dynamischen Prozesse in der Kollision zu einem statistisches Ensemble von Anfangsbedingungen, welches man mit der normierten *Quellenfunktion* $g(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \tau)$ repräsentiert[1]. Die Mittelung über eine große Anzahl von Kollisionsereignissen erhält man durch die Integration

$$\mathcal{P}_n(\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n) = \int |\Phi(\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n)|^2 \, g(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \tau) \, d\mathbf{R} \, d\mathbf{P} \, d\tau \ . \tag{3.2}$$

$\mathcal{P}_n(\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n)$ entspricht asymptotisch ($t \to \infty$) der experimentell zugänglichen Impulsverteilung der Pionen. Die Quellenfunktion ist daher nicht direkt meßbar und muß bei einer theoretischen Beschreibung des physikalischen Systems modelliert werden. Diese Modellierung kann auf unterschiedliche Art und Weise vonstatten gehen:

1. Für analytische und einfache numerische Modelle verwendet man Parametrisierungen von $g(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \tau)$.

2. Aufwendigere numerische („ab initio“) Simulationen benutzen mikroskopische Modelle und liefern daher keinen analytisch faßbaren Ausdruck für die Quellenfunktion. Da die zur Zeit verfügbaren Codes jedoch keine Quantenstatistik zur Simulation der Pionen verwenden, ist hier die Quellenfunktion $g(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \tau)$ identisch mit der endgültigen Phasenraumverteilung der erzeugten Pionen und $\mathcal{P}_n$ definiert ein klassisches Ensemble.

[1] In dieser Darstellung sollen $\mathbf{R}$, $\mathbf{P}$ und τ jeweils den Koordinatensatz aller Pionen beschreiben

Unser Ziel wird sein, unter Verwendung der n-Teilchen Amplitude (2.28) ein quantenstatistisches Gemisch zu generieren, das der Verteilungsfunktion (3.2) genügt und somit die zu untersuchenden Bose-Einstein Korrelationen enthält. Welche Änderungen die statistischen Eigenschaften der Teilchen bei dem Übergang von der klassischen Verteilung g zu dem Gemisch $\mathcal{P}_n$ erfahren, soll in den nächsten Abschnitten anhand einer einfachen Parametrisierung an $\mathcal{P}_1$ und $\mathcal{P}_2$ untersucht werden. In diesem Kapitel verwenden wir das einfache Modell

$$g(\mathbf{R},\mathbf{P},\tau) \equiv \rho(\mathbf{R})\, f(\mathbf{P}) \tag{3.3}$$

mit

$$\rho(\mathbf{R}) = (\pi R^2)^{-3/2} \exp\left(\frac{-\mathbf{R}^2}{R_s^2}\right) \tag{3.4}$$

und

$$f(\mathbf{P}) = (2\pi m T)^{-3/2} \exp\left(\frac{-\mathbf{P}^2}{2mT}\right) \ . \tag{3.5}$$

Es handelt sich folglich um eine statische, Gauß'sche Quellendichte der Breite[2] R_s und einer thermischen Energieverteilung. Ferner werden die Pionen zu identischen Zeitpunkten (instantan) emittiert, so daß der Parameter τ nicht berücksichtigt werden muß.

3.1 Einteilchenspektren

Wir betrachten ein Einteilchensystem und wollen die Ortsraumverteilung des gemischten Ensembles berechnen. Dazu lösen wir das Integral

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_1(\mathbf{r}) &= (\pi R_s^2)^{-3/2} \int |\psi(\mathbf{r})|^2 \exp\left(\frac{-\mathbf{R}^2}{R_s^2}\right) d^3R \\ &= (\pi \tilde{R}^2)^{-3/2} \exp\left(\frac{-\mathbf{r}^2}{\tilde{R}^2}\right) \end{aligned}\tag{3.6}$$

mit

$$\tilde{R} = \sqrt{R_s^2 + 2\sigma_o^2}\ . \tag{3.7}$$

Wir haben es weiterhin mit einer Gauß'schen Verteilung zu tun, jedoch ist dessen Breite $\tilde{R}$ größer als die der Quellenverteilung, eine Folge der endlichen Breite der Wellenpakete. Dasselbe Verhalten beobachten wir im Impulsraum, denn

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_1(\mathbf{p}) &= (2\pi m T)^{-3/2} \int |\phi(\mathbf{p})|^2 \exp\left(\frac{-\mathbf{P}^2}{2mT}\right) d^3P \\ &= (2\pi m T_{\text{eff}})^{-3/2} \exp\left(\frac{-\mathbf{p}^2}{2mT_{\text{eff}}}\right) \end{aligned}\tag{3.8}$$

[2]Die Angewohnheit, R_s als (halbe) „Breite“ der Quelle zu bezeichnen, ist eine historisch bedingte Konvention. In Wirklichkeit entspricht $R_s/\sqrt{2}$ der Standardabweichung der Gauß-Verteilung in jede Koordinatenrichtung, und der (rms-)Radius der 3-dimensionalen Verteilung ergibt sich zu $\sqrt{3/2}R_s$

mit

$$T_{\text{eff}} = T + \frac{\hbar^2}{4m\sigma_o^2} = T + T_q \ , \tag{3.9}$$

wobei wir der Quantentemperatur T_q bereits in Glng. (2.20) begegnet sind. Aufgrund der Unschärfe erhöht sich folglich die Temperatur der Pionen beim Übergang vom klassischen Ensemble zum quantenmechanischen Gemisch. Alternativ kann man die Erhöhung der Pionenergie auch als Beitrag einer Nullpunktsenergie verstehen, die auftritt, weil die Teilchen zum Zeitpunkt ihrer Entstehung in den Wellenpaketen lokalisiert sind. Die Form des Impulsspektrums bleibt trotz dieses Effekts thermisch.

Es fällt auf, daß die Einteilchen-Impulsverteilung Glng. (3.8) keinerlei Aussagen über die Ortsraumkoordinaten der Quelle gestattet. Dies ist der Fall, obwohl die quantenmechanische Impulsraumamplitude Glng. (2.12) den Entstehungsort des Pions $\mathbf{R}^o$ enthält. Da dieser jedoch nur in der Phase auftritt, fällt er bei der Bildung des Amplitudenquadrats in Glng. (3.2) heraus. Glücklicherweise gilt dies nur im Falle der Einteilchenspektren. Im nächsten Abschnitt werden wir als einfachstes Beispiel einer Mehrteilchenverteilung die 2-Teilchen Korrelationsfunktion untersuchen. Sie eröffnet die Möglichkeit, der experimentell zugänglichen Impulsraumverteilung der Pionen auch Information über die Ortsraumverteilung der Quelle zu entnehmen.

3.2 Die 2-Teilchen Korrelationsfunktion

Die 2-Teilchen Korrelationsfunktion im Impulsraum ist definiert als

$$\mathcal{C}_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{\mathcal{P}_{12}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)}{\mathcal{P}_1(\mathbf{p}_1)\, \mathcal{P}_1(\mathbf{p}_2)} \ , \tag{3.10}$$

wobei unter Verwendung der Parametrisierung (3.4) und (3.5) die Impulsverteilung $\mathcal{P}_1(\mathbf{p})$ der Glng. (3.8) entspricht und

$$\mathcal{P}_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \int \rho(\mathbf{R}_1)\, \rho(\mathbf{R}_2)\, f(\mathbf{P}_1)\, f(\mathbf{P}_2)\, |\Phi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)|^2\, d^3R_1\, d^3R_2\, d^3P_1\, d^3P_2 \ . \tag{3.11}$$

Die 2-Teilchen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Phi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)|^2$ wurde bereits in Abschnitt 2.4 vorgestellt. Die Berechnung des Integrals ist nicht einfach, da mit der Normierung (2.31) eine Funktion von $\mathbf{P}_i$ und $\mathbf{R}_i$ im Nenner auftaucht. Wir entwickeln daher die Normierung in eine Taylorreihe gemäß

$$\mathcal{N}_2 = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \exp\left(\frac{-k(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2)^2}{4\sigma_p^2} \right) \exp\left(\frac{-k(\mathbf{R}_1^o - \mathbf{R}_2^o)^2}{4\sigma_o^2} \right) \tag{3.12}$$

und führen die Integration Term für Term aus. Das Resultat ist

$$\mathcal{C}_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{a_o^2 b_o^2}{a_k b_k c_k d_k} \right)^{3/2} \left(e^{f_k(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)} + e^{g_k(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)} \right) \tag{3.13}$$

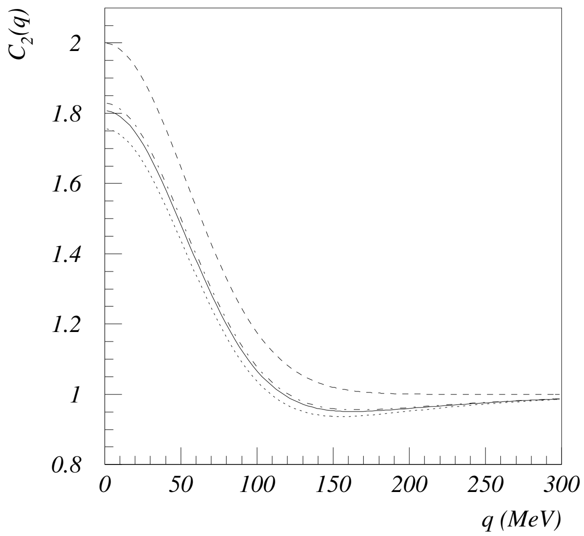

Abbildung 3.1: Die Korrelationsfunktion (3.13) in unterschiedlichen Approximationen: Exakt (durchgezogene Linie), der nullte Taylor-Term (gestrichelt), einschließlich des 1. Terms (gepunktet) und einschließlich des 2. Terms (gestrichpunktet). Der Quellenradius war $R_s = 3$ fm, die Wellenpaketbreite $\sigma_o = 1.8$ fm und die Temperatur $T = 50$ MeV.

mit

$$f_k(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = -(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2 \frac{k}{16\sigma_p^6 a_k c_k} , \tag{3.14}$$

$$g_k(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = -(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2 \left(\frac{4\sigma_p^2 a_k + k}{32\sigma_p^6 a_k c_k} + \frac{1}{2\hbar^2 R_s^2 b_k d_k} \right) , \tag{3.15}$$

sowie

$$a_k = \frac{1}{2\sigma_p^2} + \frac{1}{2mT} + \frac{k}{4\sigma_p^2} , \tag{3.16}$$

$$b_k = \frac{1}{R_s^2} + \frac{k}{4\sigma_o^2} , \tag{3.17}$$

$$c_k = a_k - \frac{k^2}{16\sigma_p^4 a_k} , \tag{3.18}$$

$$d_k = b_k - \frac{k^2}{16\sigma_o^4 b_k} . \tag{3.19}$$

Zur Erinnerung: σ_p ist die Breite des Wellenpakets im Impulsraum und mit der initialen Ortsraumbreite via $\sigma_p = \hbar/(2\sigma_o)$ verknüpft. Die vollständige Korrelationsfunktion ist schon in unserem thermischen Modell sehr komplex. In realistischeren Modellen ist sie überhaupt nicht mehr in analytischen Ausdrücken darstellbar und muß numerisch berechnet werden. Einige charakteristische Eigenschaften der Funktion lassen sich jedoch in unserem Modell studieren.

Die auffälligste Eigenschaft ist die ausschließliche Abhängigkeit von der Variablen $q^2 = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2$. In Abschnitt 4.5 wird demonstriert, wie diese Eigenschaft beim Auftreten kollektiver Flußeffekte verlorengeht. Als nächstes betrachten wir eine Näherung, indem wir nur den führenden Taylor-Term, d. h. $k = 0$ bzw. $\mathcal{N}_2 = 1$, berücksichtigen. Wir erhalten

$$\mathcal{C}_2^{(o)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = 1 + \exp\left(\frac{-R_{\text{eff}}^2 (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)^2}{2\hbar^2}\right) \tag{3.20}$$

mit dem *effektiven Radius*

$$R_{\text{eff}} = \sqrt{R_s^2 + 2\sigma_o^2 \frac{T}{T_{\text{eff}}}} \, . \tag{3.21}$$

Die Bezeichnung „effektiver Radius" liegt auf der Hand, da der Ausdruck R_{eff} zusammengesetzt ist aus dem Quellenradius R_s und weiteren Beiträgen, welche die Breite der Wellenpakete und die Temperaturen enthalten. Bemerkenswert ist jedoch, daß R_{eff} weder mit dem Quellradius R_s noch mit dem effektiven Radius des gemischten Ensembles $\tilde{R}$ Glng. (3.7) übereinstimmt. Wir erkennen ferner, daß der Berührungspunkt mit der Ordinate den Wert 2 hat. Dies gilt jedoch nur für die nullte Näherung. Allgemein erhalten wir aus (3.13):

$$\mathcal{C}_2(q = 0) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{a_o^2 b_o^2}{a_k b_k c_k d_k}\right)^{3/2} \, . \tag{3.22}$$

Traditionell gibt man in der Interferometrie nicht $\mathcal{C}_2(q = 0)$ an, sondern die sog. *Chaotizität*

$$\lambda = \mathcal{C}_2(q = 0) - 1 \, . \tag{3.23}$$

Was es damit auf sich hat, werden wir in Abschnitt 3.3 diskutieren. Abbildung 3.1 zeigt die Korrelationsfunktion in unterschiedlichen Näherungen für den Parametersatz $R_s = 3$ fm, $T = 50$ MeV, $\sigma_o = 1.8$ fm. Die über die nullte Näherung hinausgehenden Funktionen zeigen Abweichungen von der Gauß'schen Form der Gleichung (3.20) sowie eine Chaotizität, die < 1 ist. Mit zunehmendem σ_o verstärkt sich diese Tendenz. In Abschnitt 3.4 werden wir diskutieren, welche physikalische Bedeutung diesem Parameter gegeben werden kann. Dazu werden wir zunächst einen Formalismus vorstellen, der eine große historische Bedeutung hat und auch heute noch das Standardverfahren der Modellierung in der Pioninterferometrie darstellt.

3.3 Das Modell ebener Wellen (EWM)

Wir führen einen Grenzübergang durch: Mit $\sigma_o \to 0$ erhalten wir aus (3.13)

$$\lim_{\sigma_o \to 0} \mathcal{C}_2(q) = 1 + \exp\left(-\frac{q^2 R_s^2}{2\hbar^2}\right) \, , \tag{3.24}$$

eine Korrelationsfunktion für punktförmige Teilchen. Punktförmige Teilchen implizieren jedoch eine vollständige Delokalisierung im Impulsraum, so daß die Impulsraumzustände durch ebene Wellen dargestellt werden müssen.

In dem klassischen Formalismus zur Beschreibung der Intensitätsinterferometrie geht man von dem entgegengesetzten Extrem aus[3]:

Man beginnt mit ebenen Wellen im Ortsraum,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \sim e^{-i\,\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_1/\hbar}\, e^{-i\,\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_2/\hbar} + e^{-i\,\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_2/\hbar}\, e^{-i\,\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_1/\hbar} \;. \tag{3.25}$$

Im nächsten Schritt benutzt man die Quellverteilung als Wahrscheinlichkeitsamplitude für die Pionemission, woraus die folgende kohärente Summe resultiert:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_c(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) &= \frac{1}{2}\left|\int d^3r_1\, d^3r_2\, \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\, a(\mathbf{r}_1)\, a(\mathbf{r}_2)\right|^2 \\ &= |\tilde{a}(\mathbf{p}_1)\, \tilde{a}(\mathbf{p}_2)|^2 \;,\end{aligned} \tag{3.26}$$

wobei a eine Wahrscheinlichkeitsamplitude und $\tilde{a}(\mathbf{p})$ dessen Fouriertransformierte ist. Die koinzidente Nachweiswahrscheinlichkeit faktorisiert in zwei Anteile, die jeweils nur eine Impulskoordinate enthalten. Man sieht auf den ersten Blick, daß das Produkt der beiden Einteilchenwahrscheinlichkeiten $\mathcal{P}_c(\mathbf{p}_1)\mathcal{P}_c(\mathbf{p}_2)$ zu demselben Ergebnis führt, so daß die Korrelationsfunktion (3.10) identisch 1 wird:

$$\mathcal{C}_c(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = 1 \;. \tag{3.27}$$

Es ist keine Bose-Einstein Korrelation aufgetreten.

Wir betrachten nun das Beispiel einer inkohärenten Summation,

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_I(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) &= \frac{1}{2}\int d^3r_1\, d^3r_2\, |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2\, \rho(\mathbf{r}_1)\, \rho(\mathbf{r}_2) \\ &= |\tilde{\rho}(0)|^2 + |\tilde{\rho}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)|^2 \;,\end{aligned} \tag{3.28}$$

und erhalten als inkohärente Korrelationsfunktion

$$\mathcal{C}_I(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = 1 + \frac{|\tilde{\rho}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)|^2}{|\tilde{\rho}(0)|^2} \;. \tag{3.29}$$

Hier ist $\rho = a^*a$ die Quellenintensitätsverteilung und $\tilde{\rho}$ dessen Fouriertransformierte. Man kann leicht zeigen, daß dieser Ausdruck im Falle einer Gauß'schen Quelldichteverteilung auf die Korrelationsfunktion (3.24) führt. Dies ist bemerkenswert, da der Ausgangspunkt (ebene Welle im Ortsraum) exakt konträr ist zu dem Limes (punktförmiger Teilchen), der (3.24) zugrundeliegt. Was steckt dahinter? Aufklärung bringt ein simples Umschreiben der kohärenten Summe (3.26):

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_c(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) &= \frac{1}{2}\Big|\sum_{i,j} \Psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\, a_i\, a_j\Big|^2 \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} \Psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\, a_i\, a_j\, \Psi^*(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)\, a_k^*\, a_l^* \\ &= \sum_{i,j} |\Psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)|^2\, \rho_i\, \rho_j + \frac{1}{2}\sum_{i,j\neq k,l} \Psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\, \Psi^*(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)\, a_i\, a_j\, a_k^*\, a_l^* \\ &= \mathcal{P}_I(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) + \frac{1}{2}\sum_{i,j\neq k,l} \Psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\, \Psi^*(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)\, a_i\, a_j\, a_k^*\, a_l^* \;.\end{aligned} \tag{3.30}$$

[3]Die folgende Herleitung stammt aus [20]

Die kohärente Summe läßt sich demnach aufspalten in einen inkohärenten Anteil und einen Rest. An diesem Punkt kommt das physikalische Bild, das man sich von der Quelle macht, ins Spiel: Die Quellenamplituden a_i bestimmen die Eigenschaften der emittierten Strahlung. Man könnte sie mit einer stark ortsabhängig fluktuierenden Phase versehen. In diesem Falle würde der zweite Term in (3.30) aufgrund der Mittelung über die Phasen wegfallen und nur der inkohärente Anteil stehenbleiben. Dies ist der Limes einer „chaotischen Quelle". Enthalten die Amplituden dagegen keine ortsabhängigen Phasen, dann ist die Strahlung kohärent. In der chaotischen Quelle werden alle Teilchen unabhängig voneinander emittiert, d. h. ihre Ortsraumdarstellungen sind orthogonal und wir sind bei einem Modell punktförmiger Teilchen angelangt, deren Korrelationsfunktion (3.29) bestimmt ist durch die Fouriertransformierte der Quellenintensitätsverteilung. In der Quantenoptik bezeichnet man diesen Zusammenhang als die „Fernfeld Approximation des van Cittert-Zernike Theorems" ([2], S. 191), und in vielen praktischen Anwendungen liefert diese Näherung sehr gute Resultate. Dies gilt insbesondere für die Anwendung der Intensitätsinterferometrie in der Astronomie, da die Sternradien wesentlich größer sind als die Kohärenzlänge des Lichtes. Mit welcher Berechtigung und mit welchen Einschränkungen das Modell einer chaotischen Quelle, die Partikel als ebene Wellen emittiert, auf die Schwerionenphysik übertragbar ist, soll im nächsten Abschnitt diskutiert werden.

Die Korrelationsfunktion wird verallgemeinert, indem man den zusätzlichen Parameter λ einführt:

$$C_2(q) = 1 + \lambda \frac{|\tilde{\rho}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)|^2}{|\tilde{\rho}(0)|^2} \,. \tag{3.31}$$

Ein Vergleich mit (3.27) und (3.29) ergibt, daß $\lambda = 0$ im kohärenten Fall und $\lambda = 1$ im chaotischen Fall gilt, weshalb λ als *Chaotizität* bezeichnet wird. Hat man es mit Quellenamplituden a_i zu tun, die langsam fluktuierende Phasen besitzen, dann verschwindet der zweite Term in (3.30) nicht vollständig und die Korrelationsfunktion ist weder vollständig chaotisch noch kohärent. Diesen Fall nennt man *partiell kohärent* und man parametrisiert ihn mit $0 < \lambda < 1$. In der Schwerionenphysik verwendet man i. a. die Gauß-Parametrisierung der Quelle, so daß man die *Standardkorrelationsfunktion*

$$C_2(q) = 1 + \lambda \exp\left(-\frac{q^2 R_s^2}{2\hbar^2}\right) \tag{3.32}$$

im EWM erhält.

3.4 Wellenpakete contra ebene Wellen

Das EWM zeichnet sich durch seine Einfachheit aus, wie ein Vergleich der Standardkorrelationsfunktion (3.32) mit (3.13) demonstriert. Die Frage lautet daher: Sind einerseits die Näherungen, die mit diesem Bild einhergehen, mit der Physik des Systems verträglich und lohnt sich andererseits der Mehraufwand des Wellenpaket-Modells (WPM)?

Die Dynamik der Pionproduktion in einer Schwerionenkollision ist außerordentlich kompliziert, und die Eigenschaften der Pionen im Innern der dichten hadronischen Materie sind bis heute ein viel diskutiertes Thema [21]. Bei Energien um 1 GeV pro Nukleon entstammen die Pionen einem Zerfall von Resonanzen, meist $\Delta(1232)$, die zuvor durch Nukleonenstöße angeregt worden waren. Ein Teil der Pionen entkommt dem zentralen Feuerball ohne weitere Kollisionen, der Rest wird von Nukleonen absorbiert oder an ihnen elastisch gestreut. Die zahlreichen Kollisionen innerhalb der Quelle sind ein Grund dafür, daß die Pionen keine räumlich ausgedehnte, kohärente Wellenfunktion ausbilden können, obwohl die de Broglie Wellenlänge für ein typisches Pion mit einem Impuls von 150 MeV/c bei über 8 fm und somit im Bereich der Quellengröße liegt. Die Quelle ist daher nur partiell kohärent und die im vorigen Abschnitt etwas unmotiviert postulierten fluktuierenden Phasen finden auf diese Weise eine Rechtfertigung. Der große Absorptionsquerschnitt der Pionen führt jedoch auch zu einer effektiven Lokalisierung, da die mittlere freie Weglänge je nach Dichte der hadronischen Materie und Energie der Pionen in einem Bereich von 1-4 fm anzusiedeln ist [22], also kleiner als ein typischer Feuerballradius von 5-8 fm. Die Beschreibung dieser Lokalisierung erfordert eine Wellenpaket-Darstellung. In diesem Bild ist die Anfangsbreite σ_o des Wellenpakets gekoppelt an die mittlere freie Weglänge des Pions in der hadronischen Materie. Das WPM basiert folglich auf dem folgenden, extrem vereinfachten Bild: Ein Pion bewegt sich nach dessen Erzeugung frei innerhalb eines Volumens, das durch seine mittlere freie Weglänge bestimmt wird, oder, pessimistischer: Das Pion ist gefangen innerhalb dieses Volumens. Im nächsten Schritt entfernt man die Wände und erhält ein frei propagierendes und dispergierendes Wellenpaket, das mit eventuell vorhandenen weiteren Wellenpaketen interferieren kann. Das Entfernen der Wände ist eine Umschreibung des „Freeze-out", des Ausfrierens aller starken Wechselwirkungen im Verlauf der Ausdünnung des Feuerballs.

Wie in den vorherigen Abschnitten demonstriert wurde, hat der Wert von σ_o zwar keinen Einfluß auf die thermische Form des Impulsspektrums, ändert jedoch dessen Temperatur. So ist der Beitrag der Quantentemperatur T_q an der effektiven Temperatur T_{eff} (3.9) bei $\sigma_o = 1.8$ fm bereits 20 MeV. Die experimentell gemessenen Energiespektren der Pionen lassen sich nicht gut thermisch beschreiben, weichen jedoch bei höheren Energien nicht stark von einer thermischen Verteilung mit 80 MeV Temperatur ab. Das heißt, daß 25 % der kinetischen Pionenergie von der Nullpunktsenergie stammen würde. Dieser Beitrag ist beträchtlich und wird im EWM vernachlässigt, da man keinerlei Impulsunschärfe zuläßt. In diesem Sinne sind die ebenen Wellen eine semiklassische ($T_q = 0$) Approximation eines Systems, das aufgrund seiner Lokalisierung eigentlich mit endlicher Quantentemperatur ($T_q > 0$) beschrieben werden muß.

Die Bedeutung der Chaotizität λ in der Korrelationsfunktion des WPM wurde bereits angesprochen. Abbildung 3.2 zeigt die Abhängigkeit der Chaotizität von σ_o für unterschiedliche Radien im WPM. Zur Interpretation schreiben wir (3.22) um und

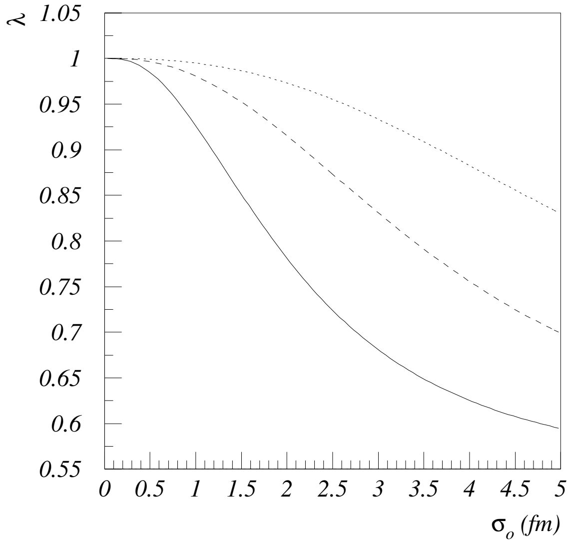

Abbildung 3.2: Die Chaotizität λ als Funktion der Wellenpaketbreite σ_o für die Quellradien $R_s = 3$ fm (durchgezogene Linie), $R_s = 5$ fm (gestrichelte Linie) und $R_s = 8$ fm (gepunktete Linie). Die Temperatur beträgt $T = 50$ MeV, die Temperaturabhängigkeit von λ ist gering.

erhalten

$$\mathcal{C}_2(q=0) - 1 = \lambda = 1 + \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k \left(1 + \frac{kR_s^2}{2\sigma_o^2}\right)^{-3/2} \left(1 + \frac{kT}{T_{\text{eff}}}\right)^{-3/2} . \tag{3.33}$$

Für $R_s \gg \sigma_o$ ist bereits der erste Term der Reihe sehr klein, im weiteren Verlauf nähert sich die Folge der Summenterme sehr schnell dem Limes 0. λ ist daher vor allem durch die 1 vor der Summe bestimmt und weicht nicht wesentlich davon ab. Dieser Grenzfall führt folglich zu einer chaotischen Quelle, was physikalisch anschaulich ist: Schmale Wellenpakete überlappen nicht, es kommt zu keiner Interferenz im Ortsraum und die Teilchen werden unabhängig voneinander emittiert. Entfernt man sich von diesem Grenzfall, konvergiert die Folge in (3.33) zunehmend langsamer und die Reihe erreicht einen Grenzwert, der zunehmend kleiner als 1 wird. In diesem Bereich sind die Wellenpaketdurchmesser nicht mehr vernachlässigbar gegen die Dimension der Quelle und aufgrund von Interferenz wird die Strahlung partiell kohärent. Die Temperaturabhängigkeit von λ ist gering: Variiert man T zwischen 30 MeV und 100 MeV, so verändern sich die Kurven in Abb. 3.2 unwesentlich. In der Standardkorrelationsfunktion des EWM, (3.32), ist λ, wie erwähnt, ein Parameter, der zusätzlich eingeführt und an die Meßdaten angepaßt wird. Ein Zusammenhang mit weiteren Quellenparametern, vergleichbar mit (3.33), existiert daher nicht. Ein Wert $\lambda < 1$ drückt hier lediglich aus, daß die Annahme einer chaotischen Strahlung nicht gerechtfertigt war.

Nicht zuletzt unterscheiden sich in den verschiedenen Bildern die erhaltenen Korrelationsradien. In der Standardkorrelationsfunktion ist der Korrelationsradius stets identisch mit dem Quellenradius, da der Beitrag der Unschärferelation im Ortsraum nicht berücksichtigt wird. Bei einem Quellendurchmesser $R_s = 5$ fm und einer Delokalisierung von $\sigma_o = 1.8$ fm erhalten wir aus der exakten Korrelationsfunktion (3.13) mittels eines Gauß-Fits einen Radius von $R_{\text{fit}} \approx 5.9$ fm, immerhin eine Abweichung, welche in dem Bereich der heutzutage erreichbaren Meßgenauigkeit liegt. Die Temperaturabhängigkeit ist wiederum marginal.

Zusammenfassend liefert das WPM eine vollständig quantenmechanische Beschreibung der Pioneigenschaften im Rahmen des eingangs erwähnten vereinfachten physikalischen Bildes. Es erklärt das beobachtbare Phänomen der partiellen Kohärenz auf konsistente Weise und könnte daher prinzipiell anhand von λ Informationen über die Lokalisierung σ_o und somit über die mittlere freie Weglänge der Pionen im Feuerball bereitstellen. Ferner postuliert es Modifikationen in weiteren Observablen wie Korrelationsradius und Impulsspektrum. Dagegen liefert das EWM eine semiklassische und teilweise inkonsistente Beschreibung des Systems. Im Alltag der experimentellen Pioninterferometrie stellt die Verwendung der Standardkorrelationsfunktion (3.32) dennoch keine wesentliche Einschränkung dar: λ wird von diversen weiteren Einflüssen wie Mehrteilchenkorrelationen und endlicher Detektorauflösung derart modifiziert, daß es in der Praxis notwendig wird, die Chaotizität als freien Parameter zu behandeln. Der Korrelationsradius wird ebenfalls modifiziert von der endlichen Lebensdauer der Quelle, der dynamischen Expansion, der Coulomb-Wechselwirkung mit dem Feuerball und Absorptionseffekten, so daß der fehlende Beitrag der Ortsunschärfe keineswegs dominant ist. Dieser Vielfalt der Erscheinungen muß man entgegentreten mittels zuverlässiger Simulationen. Eine numerische Modellierung der Pionkorrelationen kann jedoch nicht auf befriedigende Weise im Rahmen des EWM - Formalismus betrieben werden, weil hier die notwendige Flexibilität fehlt: Zeitabhängige Phänomene können nicht modelliert werden, da die ebenen Wellen stationäre Zustände beschreiben. Darüberhinaus stellen die Lokalisationsradien wichtige Randbedingungen im System dar, insbesondere dann, wenn Wechselwirkungen ins Spiel kommen. Kann man in der Analyse experimenteller Daten noch weitgehend auf eine Wellenpaketdarstellung verzichten, so ist dies für die numerische Simulation nicht mehr der Fall.

In den folgenden Kapiteln werden wir numerische Verfahren entwickeln, die es erlauben, Systeme mit beliebigen Quellenfunktionen $g(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \tau)$ zu simulieren. Dadurch wird es möglich, den Quellen interessantere physikalische Eigenschaften zu geben als es das statische, Gauß'sche und thermische Modell dieses Kapitels vermag. Wir werden dann den Einfluß dieser Quellen auf die Korrelationsfunktion untersuchen. Analytische Ausdrücke werden wir allerdings nicht mehr angeben können, so daß die Strategien der Analyseverfahren sich enger an diejenigen der experimentellen Physik anlehnen werden. Die Resultate dieses Kapitels, gewonnen aus einem simplen Modell, werden uns jedoch weiterhin als Leitfaden für die Interpretation der simulierten Daten dienen.

Kapitel 4

Simulation wechselwirkungsfreier Pionen

In diesem Kapitel berechnen wir Systeme von Pionen ohne Wechselwirkung. Hier sind die Impulsraumzustände stationär und können ohne Zuhilfenahme zeitabhängiger Verfahren modelliert werden. Die Eigenschaft der Quelle manifestiert sich ausschließlich in der spezifischen Phasenraumverteilung der Wellenpaket-Zentren, d. h. in den Parametern $\mathbf{R}^o$, $\mathbf{P}$ und τ in Glng. (2.3). Sie bestimmen die Eigenschaften des gemischten Ensembles und somit der Korrelationsfunktion (3.10). Die Berechnung dieser Korrelationsfunktion erfordert auf den ersten Blick eine schlichte numerische Integration des 2- Teilchenzustands über die Quellenfunktion gemäß Glng. (3.11). In der Tat werden wir z. T. eine Monte Carlo Integration verwenden, um die Korrelationsfunktion eines 2- Teilchen Systems auf schnelle und effiziente Weise zu berechnen. In Systemen mit vielen Teilchen können jedoch Phänomene auftreten, die von der gleichzeitigen Korrelation mehrerer Zustände hervorgerufen werden und bei einer Analyse der 2- Teilchen Korrelationen zu unerwarteten Effekten führen. Diese können aus den experimentellen Daten nicht herausgefiltert werden und sollten daher ebenfalls in die Simulation mit einbezogen werden. Es ist generell wünschenswert, eine numerische Simulation auf Ereignisbasis zu haben und so die erhaltenen Daten der selben Analyseprozedur unterziehen zu können wie die experimentellen Daten. Eine Simulation von Systemen vieler korrelierter Pionen ist etwas aufwendiger als die simple Integration der 2- Teilchen Korrelationsfunktion. Das Verfahren wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

4.1 Das Monte Carlo Verfahren zur ereignisweisen Simulation korrelierter Pionen

Der Impulsraumzustand Φ eines Systems n identischer Bosonen läßt sich darstellen als das symmetrisierte (nicht normierte) Produkt (2.28) der Einteilchen Zustände ϕ_i in Glng. (2.13). Vom numerischen Standpunkt aus stellt die Berechnung dieser Permanente das zentrale Problem bei der Simulation bosonischer Systeme dar. Formal enthält die Summe (2.28) $n!$ Terme, so daß der numerische Aufwand mit der Fakultät der Systemmultiplizität steigt. Dasselbe gilt im Prinzip auch für Determinanten, die man zur Beschreibung fermionischer Systeme verwenden muß. Es existieren allerdings mathematische Verfahren, sog. *Eliminationsverfahren*, bei denen die entsprechende Matrix in eine Form gebracht wird, die eine sehr einfache Berechnung der Determinante erlaubt. Auf diese Weise kann der numerische Aufwand (die *Komplexität* des Algorithmus) so reduziert werden, daß er nur noch $\sim n^3$ mit der Systemgröße anwächst. Erstaunlicherweise konnte kein vergleichbares Verfahren für Permanenten gefunden werden, die sich von den Determinanten nur um einige Vorzeichen unterscheiden. Es scheint mittlerweile sogar bewiesen zu sein, daß man hier keinen Algorithmus entwickeln kann, dessen Komplexität durch ein Polynom beliebigen Grades ausgedrückt werden kann [23]. Probleme dieser Art nennt man *NP hart*, wobei „NP" für „Nicht Polynomial" steht [1]. In dieser Arbeit wird zur Berechnung der Permanenten ein Algorithmus verwendet, der durch geschicktes Zusammenfassen der Summanden eine Komplexität von 2^{n-1} anstatt $n!$ besitzt und in [24] beschrieben ist.

Der n- Teilchen Zustand Φ definiert ein quantenmechanisches Ensemble von n- Teilchen Systemen. Um einen speziellen Repräsentanten dieses Ensembles zu erhalten, initialisieren wir n Testteilchen mit zunächst beliebig gewählten Impulsen. Diese Impulskoordinaten definieren das Argument des initialen n- Teilchenzustandes Φ. Nun wird das Amplitudenquadrat $|\Phi|^2$ berechnet. Der Satz von Testteilchen soll ein Repräsentant des quantenmechanischen Ensembles sein, was voraussetzt, daß eine große Anzahl solcher Sätze eine Wahrscheinlichkeitsverteilung besitzt, die mit $|\Phi|^2$ übereinstimmt. Dies wird mittels eines *Metropolis* Verfahrens erreicht [25], das unter Verwendung eines vereinfachten Modells bereits von Zajc [4] zur Berechnung von Pionkorrelationen verwendet wurde. Dazu wird folgende Schleife solange durchlaufen, bis das System relaxiert ist:

- Do ...
  - Man verschiebe die Impulskoordinate eines der Testteilchen um einen zufälligen Beitrag $\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_i + \Delta\mathbf{p}$
  - Man berechne das Amplitudenquadrat $|\Phi|^2_{\mathrm{neu}}$ mit dem neuen Koordinatensatz
  - Man akzeptiere den neuen Koordinatensatz mit einer Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P} = \min\{1, |\Phi|^2_{\mathrm{neu}}/|\Phi|^2\}$
- ... Loop

Die Testteilchen werden der Reihe nach probeweise verschoben. Nachdem das n'te Teilchen behandelt worden ist, ist ein Durchlauf („Sweep") vollendet. Man kann zeigen,

[1] Das wohl bekannteste der NP harten Probleme ist das sog. Handelsvertreter- Problem (business salesman problem). Es handelt von dem Problem eines Geschäftsmannes, der n Städte aufsuchen muß und dafür die kürzeste Route sucht. Es tritt nicht nur bei der Routenplanung von Fluggesellschaften auf, sondern auch im optimierten Design von Leiterbahnen auf Computerchips und Platinen.

daß im Limes sehr vieler Sweeps die statistische Verteilung eines Ensembles solcher Testteilchen sich asymptotisch der vorgegebenen Dichtefunktion $|\Phi|^2$ annähert. Die Geschwindigkeit der Konvergenz hängt von der Multiplizität des Systems und der genauen Struktur des Wahrscheinlichkeitsraumes ab und muß in der Praxis i. a. durch Probieren analysiert werden. In dem Multiplizitätsbereich, der im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurde ($n \leq 30$), konnte folgende Faustregel gefunden werden:

$$N_{\text{sweep}} = 30 \cdot n \; . \tag{4.1}$$

Bei einer weiteren Erhöhung von N_{sweep} war keine Änderung der statistischen Eigenschaften des Ensembles mehr feststellbar. Die Verschiebungen $\Delta\mathbf{p}$ sollten so gewählt werden, daß sie den natürlichen Fluktuationen des Systems entsprechen [26], d. h. in der Größenordnung der Wellenpaketbreite im Impulsraum liegen. Sind sie kleiner, dann braucht man unnötig viele Schritte bis zur Äquilibrierung, sind sie größer, dann werden häufig unphysikalische Zustände erreicht und die Akzeptanzrate des Metropolis Algorithmus wird kleiner.

Die Testteilchen entsprechen den Pionen, die im Experiment bei einem einzelnen Kollisionsereignis gemessen werden und weisen die gewünschten n- Teilchen Korrelationen auf. Die unterschiedlichen Anfangsbedingungen, die bei den verschiedenen Kollisionen auftreten, werden wieder durch die Quellenfunktion $g(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \tau)$ modelliert. Wir müssen daher eine große Anzahl von Ereignissen simulieren, deren Zustände Φ sich voneinander unterscheiden. Konkret heißt das: Die Koordinaten der Wellenpaketzentren $\mathbf{R}_i$, $\mathbf{P}_i$ und die Entstehungszeiten τ_i werden zu Beginn eines Ereignisses gemäß den Vorgaben aus $g(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \tau)$ ausgewürfelt und bleiben während der anschließenden Metropolisprozedur unverändert. Hat man schließlich einen Satz korrelierter Testteilchen erhalten, so wird mit dem neuen Ereignis begonnen. Nachdem man auf diese Weise sehr viele Ereignisse simuliert hat, besitzt die Gesamtmenge an Testteilchen die gewünschte Statistik des gemischten Zustands und weist *ereignisweise* Bose-Einstein Korrelationen auf.

4.2 Berechnung der Korrelationsfunktion

Um die Korrelationsfunktion (3.10) zu ermitteln, bestimmt man die Impulsabstände $q_{ij} = |\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j|$ aller Testteilchen, die jeweils einem Ereignis zugehören. Hat man sämtliche Teilchen auf diese Weise bearbeitet, so erhält man eine Verteilung der relativen Häufigkeiten $\mathcal{P}_{12}(q)$. Falls die Korrelationsfunktion ausschließlich eine Funktion von q ist, wie in dem Beispiel Glng. (3.13), hat man bereits die Funktion im Zähler von (3.10) ermittelt. Für den Nenner wendet man das Prinzip der Ereignismischung an: Man bildet wiederum paarweise Impulsdifferenzen, jedoch von Teilchen aus verschiedenen Ereignissen. Da diese mit Sicherheit unkorreliert sind, zerfällt die entsprechende Wahrscheinlichkeitsverteilung in das Produkt $\mathcal{P}_1(\mathbf{p}_1)\cdot\mathcal{P}_1(\mathbf{p}_2)$ und die Korrelationsfunktion kann durch Division erhalten werden. Für die Ereignismischung können wesentlich mehr Paare benutzt werden als das, was an korrelierten Paaren zur Verfügung steht; so kann der statistische Fehler reduziert werden.

Abschließend muß die Korrelationsfunktion analysiert werden. Dies könnte durch einen χ^2 Anpassungs-Fit der analytischen Korrelationsfunktion (3.13) an die simulierte Korrelationsfunktion geschehen, jedoch benutzt man traditionell die wesentlich einfachere Standardkorrelationsfunktion Glng. (3.32), die dem Modell ebener Wellen entsprungen ist. Als Resultat erhält man die angepaßten Werte für die Parameter $R_{\rm fit}$ (Korrelationsradius) und $\lambda_{\rm fit}$, letzterer als „Chaotizität" bezeichnet. Es muß noch einmal ausdrücklich betont werden, daß $R_{\rm fit}$ weder der geometrische Radius R_s der Quelle ist, noch $\tilde{R}$ aus Glng. (3.7) und auch nicht der effektive Radius aus Glng. (3.21). $R_{\rm fit}$ ist ebenso wie $\lambda_{\rm fit}$ ein optimierter Parameter in einem Modellraum, der nicht identisch ist mit dem Parameterraum in der Simulation und schon gar nicht im Experiment. Die angemessene Interpretation der erhaltenen Fitparameter ist äußerst schwierig und die Motivation dafür, ausgefeilte Simulationsmethoden zu entwickeln und die Einflüsse von immer komplexer werdenden Quellenfunktionen auf die Fitresultate zu studieren. Wir beginnen im folgenden Abschnitt mit dem einfachsten System, der statischen, Gauß'schen Quelle mit Radius R_s und Temperatur T, dessen Eigenschaften wir in Kapitel 3 bereits analytisch untersucht haben.

4.3 Statische Quelle

Als Quellenparameter wurden ein Radius von $R_s = 3$ fm und eine Temperatur von $T = 50$ MeV verwendet. In realistischen Systemen (vgl. Abschnitt 4.8) würde man beide Werte höher ansetzen, jedoch hat der kleinere Phasenraum den Vorteil, daß die quantenmechanischen Effekte voll zum Tragen kommen. Es wurden Simulationen mit unterschiedlichen Wellenpaketbreiten σ_o durchgeführt. In jeder Simulation wurden 50000 Ereignisse mit jeweils 5 Pionen erzeugt, dann die Korrelationsfunktion ermittelt und die Standardkorrelationsfunktion an das Resultat gefittet. Abbildung 4.1 zeigt die Resultate für $R_{\rm fit}$ (oben) und $\lambda_{\rm fit}$ (Mitte).

Der Korrelationsradius wächst mit zunehmendem σ_o (Punkte). Der Anstieg ist etwas steiler als die Näherungsformel für $R_{\rm eff}$ (3.21) (durchgezogene Kurve), die nur den ersten Term der Korrelationsfunktion (3.13) enthält. Bereits aus Abb. 3.1 wird deutlich, daß die Korrelationsfunktion in höherer Näherung etwas schmaler ist als in 0'ter Näherung und bei einem Fit mit der Standardkorrelationsfunktion (3.32) folglich einen größeren Korrelationsradius ergeben muß. Zur Bestätigung wurde dieser Fit an die exakte 2- Teilchen Korrelationsfunktion durchgeführt und als gepunktete Kurve eingezeichnet. Sie stimmt mit den Resultaten aus den Monte Carlo Simulationen überein. Wir können daraus lernen, daß sich die Korrelationsradien in unserem Modellsystem aus 5 Pionen bereits mit der 2- Teilchen Korrelationsfunktion beschreiben lassen und somit die Mehrteilchenkorrelationen noch keine Rolle spielen.

Obwohl die Näherung (3.21) nicht sehr gut funktioniert, kann sie uns dazu anleiten, eine Faustformel aufzustellen. Bei den im Verlauf dieser Arbeit durchgeführten Simulationen statischer Quellen lieferte die Formel

$$R_{fit} \approx \sqrt{R_s^2 + 3\sigma_o^2} \tag{4.2}$$

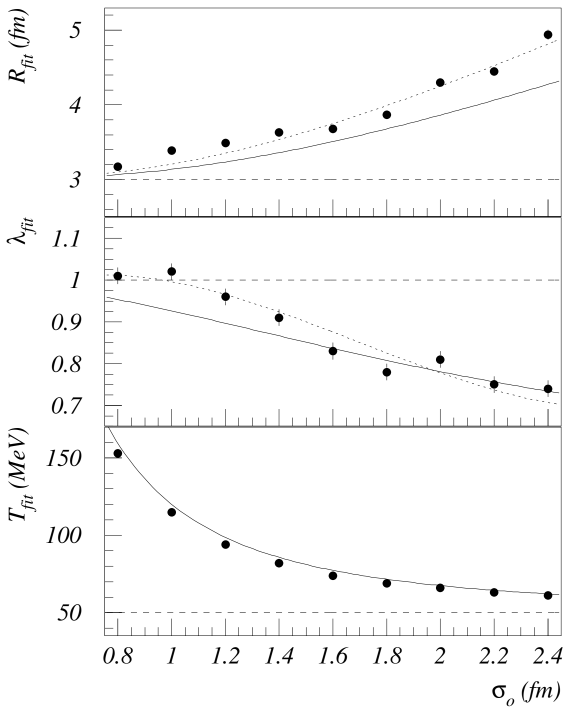

Abbildung 4.1: Statistik der Testteilchen mit statischer Quellenfunktion in Abhängigkeit von der initialen Breite σ_o der Wellenpakete. Oben: Die simulierten Korrelationsradien (Punkte) im Vergleich zu der Näherung Glng. (3.21) (durchgezogene Kurve) und den Fitresultaten an die 2- Teilchen Korrelationsfunktion (3.13) (gepunktet). Mitte: Die Chaotizität λ in der Simulation (Punkte), der Formel (3.33) (durchgezogen) und als Fitresultate an die 2- Teilchen Korrelationsfunktion (3.13) (gepunktet). Unten: Die Temperatur (Punkte) im Vergleich zu der effektiven Temperatur (3.9) eines 1- Teilchen Ensembles (durchgezogen).

stets einen zuverlässigen Schätzwert für den gefitteten Korrelationsradius.

Die Chaotizität λ_{fit} nimmt mit zunehmendem σ_o ab (mittlerer Teil, Punkte), wie bereits in 3.4 diskutiert wurde. Es gibt jedoch Abweichungen von der theoretischen Vorhersage aus der 2- Teilchen Korrelationsfunktion Glng. (3.33) (durchgezogene Kurve). Ist dies ein Hinweis auf Mehrteilcheneffekte? Erneut wurde ein Fit an die exakte 2- Teilchen Korrelationsfunktion durchgeführt, das Ergebnis ist wieder als gepunktete Kurve dargestellt. Die Übereinstimmung mit der Monte Carlo Simulation beweist, daß es sich bei den Abweichungen von Glng. (3.33) lediglich um systematische Fehler in der Fitprozedur handelt. Da die exakte Korrelationsfunktion Abb. 3.1 nicht Gauß-förmig ist, kann ein Fit mit der Standardkorrelationsfunktion (3.32) zu solchen Abweichungen im y-Achsenabschnitt führen.

Im unteren Teil der Abbildung ist die Temperatur des Ensembles aufgetragen, die aus einem Fit mit einer Maxwellverteilung hervorgegangen ist (Punkte). Die durchgezogene Kurve zeigt die theoretische Temperatur T_{eff}, die in (3.9) aus einem Einteilchenensemble hergeleitet wurde. Wie zu erkennen ist, weichen die Temperaturen der simulierten Pionen geringfügig, aber systematisch von T_{eff} ab. Ursache sind die 2- Teilchen Korrelationen, die zu einer leichten Verringerung der Anzahl der Freiheitsgrade im System führen. Dies ist der erste Schritt in Richtung Bose-Kondensation. Je kleiner der Wellenpaketradius σ_o, desto größer ist der Überlapp im Impulsraum und somit der Interferenzeffekt in den Impulskoordinaten.

Bevor wir mit dem Studium weiterer Systeme fortfahren, sollte die hier gewählte Vorgehensweise noch einmal interpretiert werden: Wir haben mittels eines Monte Carlo Verfahrens Daten erzeugt. Diese wurden mit Hilfe der Standardkorrelationsfunktion analysiert, genauer gesagt haben wir diejenigen 2 Parameter bestimmt, die uns von der Standardkorrelationsfunktion zur Verfügung gestellt werden. Die Fitprozedur bildet die Daten auf den Parameterraum der Fitfunktion ab, welche einem Modell entspringt. Die physikalische Bedeutung des erhaltenen Parameterwertes ist jedoch i. a. nicht identisch mit der Bedeutung, die der Parameter in diesem Modell hat. Als zweiter Schritt muß daher eine Interpretation erfolgen. Im vorliegenden Beispiel gehört der Parameterraum der Fitfunktion zu dem Modell ebener Wellen (EWM). Die simulierten Daten hingegen wurden aus einer Monte Carlo Prozedur gewonnen, welche auf dem Modell der Wellenpakete aufbaut. Letzteres unterscheidet sich vom EWM in der Existenz eines zusätzlichen Parameters σ_o. Wir haben daher in diesem Abschnitt die Abhängigkeit der Fitparameter von σ_o untersucht und gefunden, daß weder R_{fit} mit dem Quellenradius übereinstimmt (was im EWM der Fall wäre) noch die Chaotizität λ_{fit} eine Konstante ist (worüber das EWM keine Aussagen macht). Durch sorgfältige Interpretation und Vergleich mit analytischen Näherungen waren wir dennoch in der Lage, die systematischen Abhängigkeiten der Parameter zu verstehen und ihnen auf diese Weise diejenige physikalische Bedeutung zurückzugeben, die sie bei der Projektion eines komplexeren Systems auf das EWM verloren hatten.

Es ist dies die Stratgie, mit der wir fortfahren werden, wenn wir uns mit komplizierteren Systemen zu beschäftigen haben. Mit zunehmender Komplexität der Quellenfunktion werden wir jedoch immer häufiger auf Schwierigkeiten mit der Interpretation stoßen, in demselben Maße wie allmählich die analytischen Ausdrücke rar werden und der Parameterraum des EWM immer enger zu werden scheint. In Abschnitt 4.8 werden wir erkennen, wo die Grenzen der Pioninterferometrie liegen und daß es sehr viel mehr bedarf als ein bloßes Anfitten von Korrelationsfunktionen, um zu Aussagen zu kommen, die für die Schwerionenphysik von Nutzen sind.

4.4 Systeme mit hohen Multiplizitäten

Bei hohen Multiplizitäten stößt man schnell an die Leistungsrenze der Rechner. Grund dafür ist die NP- Eigenschaft der Permanente (Abschnitt 4.1). Abbildung 4.2 zeigt den mit der Systemgröße schnell anwachsenden Zeitbedarf zur Berechnung eines Durchlaufs (Sweep). Systeme mit weit mehr als 10 Teilchen können auf diese Weise nicht mehr in voller Permutationssymmetrie simuliert werden. Abhilfe schafft das Phänomen der *effektiven Faktorisierung* des Impulsraumzustands. Damit ist gemeint, daß die n Einteilchenfunktionen im Impulsraum nicht notwendigerweise überlappen und der Zustand stattdessen in disjunkte Unterzustände (Cluster) faktorisiert. Eine Symmetrisierung ist dann nur noch innerhalb dieser Cluster erforderlich. Nach Implementierung eines solchen Faktorisierungsschrittes, dessen Algorithmus in Anhang A beschrieben ist, wird es möglich, Systeme von bis zu 25 Pionen (bei einer Temperatur von 80 MeV) mit vertretbarem numerischen Aufwand zu simulieren. Das Monte Carlo Verfahren reicht somit aus, um die bei SIS-Energien (1–2 GeV/A) entstehenden Pionmultiplizitäten zu behandeln.

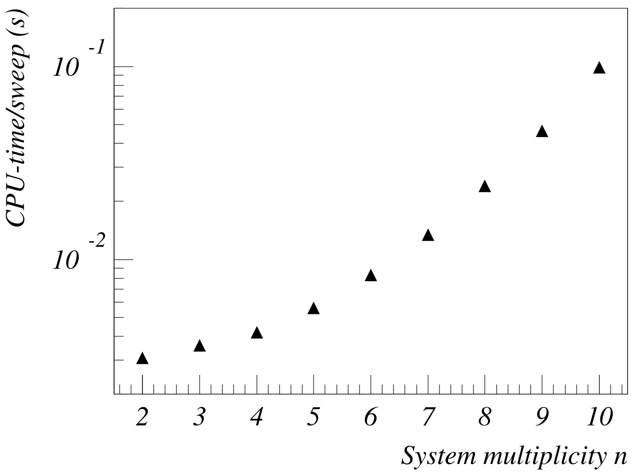

Abbildung 4.2: Erforderliche Zeit zur Vollendung eines Sweeps in Abhängigkeit von der Systemgröße n, ermittelt auf einer DEC $250^{4/266}$ Workstation.

Für noch höhere Multiplizitäten steht ein weiteres Verfahren zur Verfügung, welches auf einem quantenstatistischen Algorithmus aufbaut [5]. Hier wird die Zustandssumme des Systems numerisch berechnet und anschließend der Impulsraum in Zellen eingeteilt, auf welche die Pionen verteilt werden. Die besondere Wahl der statistischen Gewichte ($k+1$ für eine k-fach belegte Zelle) während des Verteilungsprozesses erzeugt die Korrelationen. Mit diesem Verfahren kann man nahezu unbegrenzt hohe Multiplizitäten simulieren, jedoch nur für sehr einfache Quellenfunktionen, da ansonsten die Partitionierung des Impulsraumes in Zellen zu schwierig würde.

Abbildung 4.3 zeigt eine Anwendung dieses Verfahrens auf Systeme unterschiedlicher Multiplizitäten. Die Quelle hat den Radius $R_s = 5$ fm und eine Temperatur von $T = 50$ MeV, wobei eine relativistische Maxwellverteilung

$$\mathcal{P}(\mathbf{P}) \sim \exp\left(-\frac{\sqrt{\mathbf{P}^2 + m^2}}{T}\right) \tag{4.3}$$

verwendet wurde. Im oberen Teil der Abbildung ist der gefittete Korrelationsradius dargestellt. Da es bei diesem Verfahren keine zusätzliche Delokalisierung der Einteilchenzustände gibt, sollte sich im Falle des 2- Teilchensystems exakt der Quellenradius $R_s = 5$ fm ergeben. Die Verschiebung um $+0.25$ fm ist eine Konsequenz der Impulsraum-Diskretisierung und identisch für alle Simulationen. Man erkennt, daß der Korrelationsradius mit wachsender Systemgröße abnimmt. Für $n > 100$ beträgt die Abweichung mehr als 10% und wird somit relevant für die experimentelle Datenanalyse. Die Abhängigkeit von $\lambda_{\rm fit}$ von n (unterer Teil) ist noch stärker ausgeprägt. Im Anhang B wird gezeigt, daß dies nichts mit der Chaotizität, d. h. partieller Kohärenz der Quelle, zu tun hat, denn diese ist unabhängig von n. Stattdessen handelt es sich um den *Zajc-Effekt* [4], der bei der Vernachlässigung von Mehrteilchenkorrelationen in der Analyseprozedur auftritt. Da wir mit der 2- Teilchen Korrelationsfunktion die Korrelationen höherer Ordnung nicht erfassen können, werden diese in den Raum der

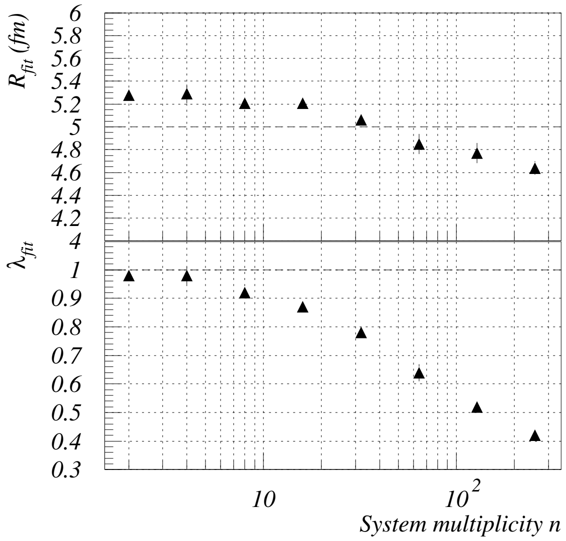

Abbildung 4.3: Korrelationsradius (oben) und „Chaotizität“ (unten) für unterschiedliche Systemmultiplizitäten.

2- Teilchen Korrelationen projiziert und führen zu den beobachteten Abweichungen in der Chaotizität und dem Radius.

Das Resultat dieses Abschnitts ist, daß wir bei SIS-Energien mit Multiplizitäten < 20 Pionen keine dramatischen Effekte der Mehrteilchenkorrelationen zu befürchten haben. Lediglich die „Chaotizität“ λ_{fit} kann um etwa 10% aufgrund des Zajc-Effekts abfallen. Bei CERN-Energien (200 GeV/A) hingegen, wo einige tausend Pionen in einem Ereignis auftreten, spielt dieser Effekt eine dominante Rolle für das Erscheinungsbild der Korrelationsfunktion und darf keinesfalls vernachlässigt werden, da λ hier so klein werden kann, daß eine zuverlässige Auswertung des Korrelationssignals im Raum der 2-Teilchen Korrelationen nahezu unmöglich wird.

4.5 Quellen mit radialer Expansion

Daß der Feuerball, der die Pionen emittiert, eine Komponente kollektiver radialer Expansion besitzt, wurde jüngst anhand des Au+Au Experiments bei FOPI nachgewiesen [27]. Die Expansionsgeschwindigkeit liegt bei über 30% der Lichtgeschwindigkeit (bei einer Einschußenergie von 400 MeV/A) und ist daher keineswegs klein. Wir interessieren uns dafür, wie sich diese kollektive Expansion auf die Korrelationserscheinungen auswirkt.

Wir modellieren die Expansion auf eine Weise, daß jedes Pion zusätzlich zu seiner ungerichteten (thermischen) Geschwindigkeitskomponente einen radialen Geschwindigkeitsbeitrag bekommt. Dessen Betrag ist ortsunabhängig. Die Addition der thermischen mit der radialen Geschwindigkeit erfolgt nach dem relativistischen Additionstheorem. Diese Vorgehensweise führt zu einer analytisch darstellbaren Impulsverteilung, der

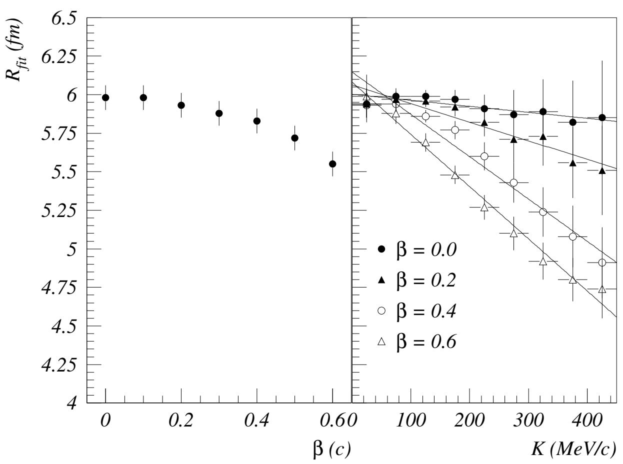

Abbildung 4.4: Korrelationsradius in Abhängigkeit von der kollektiven Expansionsgeschwindigkeit β. Links: Werte für integrale Impulsspektren. Rechts: In Abhängigkeit von K.

Siemens-Rasmussen Formel [28]:

$$\mathcal{P}(\mathbf{p}) \sim p^2 \exp\left(-\frac{\gamma E}{T}\right)\left[\left(\gamma + \frac{T}{E}\right)\frac{\sinh \alpha}{\alpha}\right] \tag{4.4}$$

mit $\alpha = \gamma\beta|\mathbf{p}|/T$, $E = (m^2c^4 + p^2)^{1/2}$, $\gamma = (1-\beta^2)^{-1/2}$ und der Geschwindigkeit β (in Einheiten der Lichtgeschwindigkeit). Als Quellenparameter wählen wir einen Radius $R_s = 5$ fm und eine Temperatur $T = 50$ MeV, der initiale Radius der Wellenpakete ist $\sigma_o = 1.8$ fm.

Wie in Abschnitt 4.4 gezeigt wurde, spielen Mehrteilchenkorrelationen bei SIS Energien noch keine große Rolle, so daß man anstelle einer ereignisweisen Simulation des Mehrteilchensystems mittels der Monte Carlo Simulation aus Abschnitt 4.1 auch eine numerische Integration der 2- Teilchen Korrelationsfunktion direkt durchführen kann. Dies wird durch eine Monte Carlo Integration der Glng. (3.11) erreicht. Auf diese Weise kann eine sehr große Statistik erreicht werden, d. h. etwa 10^8 Paare in einer Stunde Rechenzeit.

Abbildung 4.4 zeigt im linken Teil, daß der Einfluß der Expansion auf den Korrelationsradius begrenzt bleibt. Für realistische Werte ($\beta \approx 0.4$ c) erhält man einen Abfall des Radius um nur 3%, und selbst bei $\beta = 0.6$ c ist der integrale Radius um nur 8% von dem Wert abgefallen, den man für die statische Quelle erhält. Dies ändert sich, sobald man Schnitte (cuts) in dem Summenvektor $K = |\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2|/2$ vornimmt (rechter Teil). Bei Vorhandensein radialer Expansion sinkt der Korrelationsradius monoton mit wachsendem K. Dieser Effekt wurde von S. Pratt [29] bereits an einem analytischen Modell demonstriert. Pratt hat daraufhin vorgeschlagen, anhand dieses Abfalls die Expansionsgeschwindigkeit der Pionquelle experimentell zu bestimmen, jedoch werden wir in Abschnitt 4.8 erkennen, daß diese Sichtweise zu optimistisch ist und in realen Systemen noch weitere Effekte auftreten, welche die K-Abhängigkeit des Korrelationsradius beeinflussen. Es fällt auf, daß sogar bei $\beta = 0$ ein leichter Abfall der Kurve auftritt. Dies hängt mit systematischen Fehlern in der Fitprozedur zusammen, die auftreten, weil sich die Form der Korrelationsfunktion in den unterschiedlichen K- Abschnitten geringfügig ändert. Für die numerische Integration wurden je System $2 \cdot 10^7$ Paare (linke Abbildung) bzw. $2 \cdot 10^8$ Paare (rechts) benutzt. Der Vollständigkeit halber soll noch ergänzt werden, daß ein gemeinsamer Schnitt in den Impulsbeträgen $|\mathbf{p}_1|$ und $|\mathbf{p}_2|$ zu qualitativ ähnlichen Resultaten führt wie ein Schnitt in K. Letzterer wird in der Literatur offenbar deshalb bevorzugt, weil er sich leichter in theoretischen Modellen verwenden läßt.

4.6 Quellen mit Lebensdauer

In realistischen Systemen werden die Pionen nicht instantan emittiert. Als zeitliches Verhalten der Quellenintensität setzen wir die Gauß-Funktion

$$\mathcal{P}(t) = (\pi\tau^2)^{-3/2} \exp\left(-\frac{(t-t_o)^2}{\tau^2}\right) \tag{4.5}$$

an, wobei τ „Lebensdauer der Quelle“ genannt wird. Man kann leicht zeigen [30], daß eine Gauß'sche und thermische Quelle mit einer zeitlichen Intensitätsverteilung wie (4.5) im Modell ebener Wellen zu folgender Korrelationsfunktion führt:

$$\mathcal{C}_2(q, \Delta E) = 1 + \lambda \, \exp\left(-\frac{q^2\, R_s^2 + \Delta E^2 \tau^2}{2\hbar^2}\right) \ . \tag{4.6}$$

ΔE ist die Differenz $E_2 - E_1$ der kinetischen Energien beider Pionen. Diese Darstellung wirft ein Problem auf, denn q und ΔE sind nicht unabhängig voneinander und die Korrelationsfunktion enthält somit eine Mischung aus Orts- und Zeitkoordinaten. Von Yano, Koonin und Podgoretsky [31, 32] stammt die Idee, den Differenzvektor $\mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1$ in zwei Anteile aufzuspalten. Der erste, $\mathbf{q}_l$, ist die Projektion von $\mathbf{q}$ auf den Summenvektor $\mathbf{K} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ (longitudinaler Anteil von $\mathbf{q}$), der andere, $\mathbf{q}_t$, ist der restliche (transversale) Anteil von $\mathbf{q}$. Die Korrelationsfunktion läßt sich dann näherungsweise schreiben als [33]

$$\mathcal{C}_2(q_l, q_t) = 1 + \lambda \, \exp\left(-\frac{q_l^2\, R_l^2 + q_t^2\, R_t^2}{2\hbar^2}\right) \ . \tag{4.7}$$

Anstelle des Quellenradius R_s tauchen nun der longitudinale Radius R_l und der transversale Radius R_t auf, für die in guter Näherung

$$R_t \approx R_s \ , \quad \text{und} \quad R_l \approx R_s + \langle v^2 \rangle \tau^2 \tag{4.8}$$

gilt. $\langle v^2 \rangle$ ist das mittlere Geschwindigkeitsquadrat des Pion-Paares bezüglich der Quelle. Besonders erfreulich bei dieser Darstellung (die im folgenden *YKP-Darstellung* genannt werden soll) ist, daß q_l und q_t voneinander unabhängig sind und die Korrelationsfunktion (4.7) durch das Setzen enger Schnitte entkoppelt werden kann. Gilt

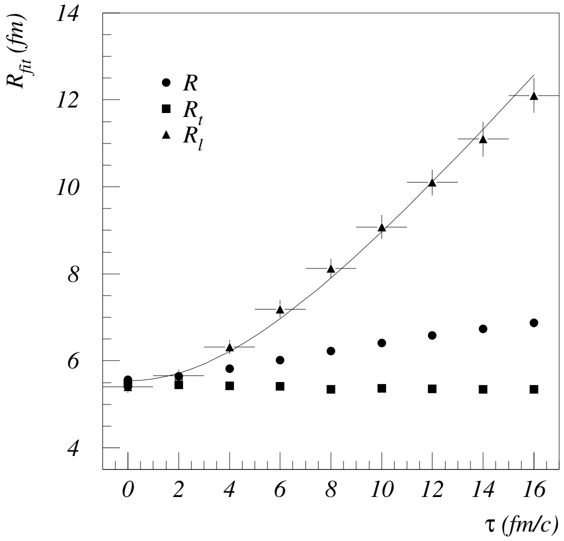

Abbildung 4.5: Korrelationsradien in Abhängigkeit von der Lebensdauer τ der Quelle. Die durchgezogene Kurve ist der Fit von Glng. (4.10).

beispielsweise für die zu analysierenden Daten $q_l \approx 0$, dann bleibt eine Korrelationsfunktion nur in den transversalen Koordinaten übrig, d. h.

$$\mathcal{C}_2(q_l, q_t) \approx \mathcal{C}_2(q_t) = 1 + \lambda \exp\left(-\frac{q_t^2\, R_t^2}{2\hbar^2}\right) , \tag{4.9}$$

und umgekehrt erhält man bei $q_t \approx 0$ eine Korrelationsfunktion ausschließlich in den longitudinalen Koordinaten. Aus der Analyse beider Korrelationsfunktionen läßt sich daher zunächst der geometrische Radius R_s aus R_t bestimmen, und anschließend das Produkt $\langle v^2\rangle\tau^2$ aus R_l. Da $\langle v^2\rangle$ sich experimentell bestimmen läßt, kann schließlich auch die Lebensdauer τ der Quelle ermittelt werden.

Die YKP-Darstellung wurde im Bild ebener Wellen hergeleitet und eine analoge Herleitung im Wellenpaket Modell wäre sehr aufwendig. Wir wollen ihre Gültigkeit daher numerisch prüfen. Die Quelle hat einen Radius von $R_s = 4.7$ fm, eine Temperatur von $T = 50$ MeV und die Wellenpakete einen initialen Radius $\sigma_o = 1.8$ fm. Zur Bestimmung der longitudinalen Korrelationsfunktion wurde der Schnitt $q_t < 30$ MeV/c verwendet, zur Bestimmung der transversalen Korrelationsfunktion der Schnitt $q_l < 20$ MeV/c. Je System wurden $2 \cdot 10^8$ Paare zur Berechnung der Korrelationsfunktionen verwendet. Abbildung 4.5 zeigt das Resultat für unterschiedliche Lebenszeiten τ. Der transversale Radius R_t ist in der Tat unabhängig von der Lebensdauer (Quadrate) und stimmt mit der Faustformel Glng. (4.2), mit der wir $R_{\text{fit}} \approx 5.6$ fm erhalten, überein. Der Gesamtradius R, gewonnen aus der Standardkorrelationsfunktion (3.32), wächst monoton mit der Lebensdauer τ (Kreise). Dasselbe gilt in verstärkter Weise für den longitudinalen Radius R_l (Dreiecke). Wir wollen prüfen, ob die Beziehung (4.8) erfüllt ist und bestimmen aus dem Verhalten von R_l die mittlere Geschwindigkeit $\sqrt{\langle v^2\rangle}$. Dazu führen wir einen Fit der Funktion

$$R_{\text{l,fit}} = \sqrt{R_{\text{fit}}^2 + \tau^2\,\langle v^2\rangle_{\text{fit}}} \tag{4.10}$$

an die longitudinalen Radien durch und erhalten als optimale Fitparameter $R_{\text{fit}} = (5.5 \pm 0.1)$ fm und $\sqrt{\langle v^2 \rangle_{\text{fit}}} = (0.71 \pm 0.03)$ fm/c. Als Gegenprobe berechnen wir

$$\begin{aligned} \langle v^2 \rangle &= (2\pi m T)^{-3} (2m)^{-2} \int (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2 \exp\left(-\frac{p_1^2 + p_2^2}{2mT} \right) d^3p_1\, d^3p_2 \\ &= (2\pi m T)^{-3} (2m)^{-2} \left\{ 2 \int p^2 \exp\left(-\frac{p_1^2 + p_2^2}{2mT} \right) d^3p_1\, d^3p_2 \right. \\ &\qquad \left. + 2 \int \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 \exp\left(-\frac{p_1^2 + p_2^2}{2mT} \right) d^3p_1\, d^3p_2 \right\} = \frac{3T}{2m}\,, \end{aligned} \tag{4.11}$$

da das zweite Integral wegen der Isotropie der Quelle verschwindet. Einsetzen von $T = 50$ MeV und $m = 140$ MeV ergibt $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = 0.73$ in Übereinstimmung mit $\sqrt{\langle v^2 \rangle_{\text{fit}}}$.

Zusammenfassend steht mit der YKP-Darstellung eine ausgezeichnete Mehode zur Verfügung, die räumliche Komponente der Pionquelle von der zeitlichen (Lebensdauer) Komponente zu entkoppeln. Bei experimentellen Daten würde man in der Analyse von R_l natürlich umgekehrt vorgehen, d.h. die Lebensdauer τ mit Hilfe der bekannten Größe $\langle v^2 \rangle$ zu bestimmen versuchen.

4.7 Absorbierende Quellen

Die mittlere freie Weglänge der Pionen im zentralen Feuerball beträgt nur wenige fm [22]. Die Überlebenswahrscheinlichkeit eines Pions ist daher um so geringer, je größer die Strecke ist, die es im Feuerball zurücklegen muß. Es wird erwartet, daß auch solch eine Absorption die Korrelationssignale beeinflußt [34]. Wir modellieren die Absorption, indem wir das Pion nur dann akzeptieren, wenn das Skalarprodukt $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}$ positiv ist.

Die Korrelationsfunktionen wurden für Systeme mit unterschiedlichen Quellenradien berechnet. Dazu wurden je System $2 \cdot 10^7$ Paare ausgewürfelt. Die Temperatur der Quelle betrug $T = 50$ MeV, die initiale Breite der Wellenpakete $\sigma_o = 1.8$ fm. Abbildung 4.6 zeigt die resultierenden Korrelationsradien, die unter Verwendung der YKP-Darstellung (Abschnitt 4.6) ermittelt wurden. Man erkennt eine starke Reduktion der longitudinalen Radien infolge der Absorption. Ferner ist eine geringe Reduktion des Gesamtradius, der mit der Standardkorrelationsfunktion (3.32) ermittelt wurde, erkennbar. Der transversale Radius wird von der Absorption nicht signifikant beeinflußt.

Dieses Resultat relativiert bereits die Schlußfolgerung des vorigen Abschnitts, daß anhand von R_l die Lebensdauer des Systems bestimmbar sei. In Wirklichkeit wird R_l von mindestens zwei Effekten beeinflußt: Die Lebensdauer vergrößert den Wert, die Absorption verkleinert ihn. Qualitativ ist dieses Verhalten einsehbar: Die Koordinate q_l beschreibt die Korrelation der Pionen in Flugrichtung des Paares und ist daher eher auf die Tiefenverteilung der Quelle empfindlich. Falls die Pionen zu unterschiedlichen Zeiten entstehen, hat sich eines der beiden Pionen zum Zeitpunkt der Entstehung des zweiten Pions bereits ein Stück von der Quelle entfernt, so daß „ihm die räumliche

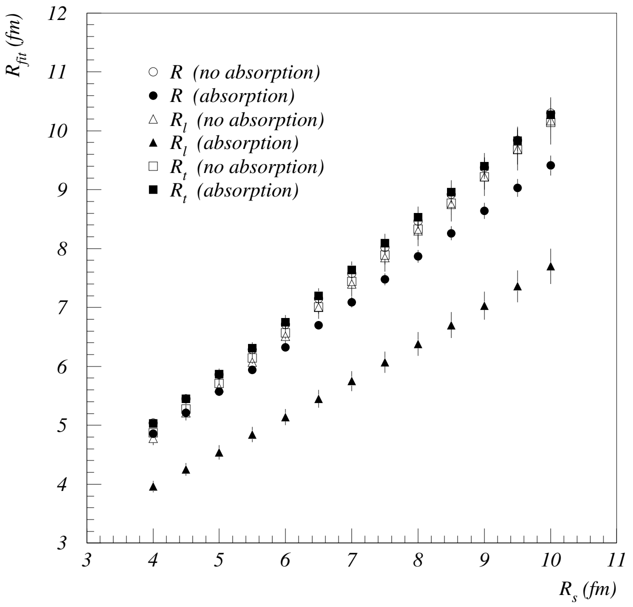

Abbildung 4.6: Korrelationsradien in Abhängigkeit vom Quellenradius bei Quellen ohne Absorption (offene Symbole) und mit Absorption (ausgefüllte Symbole).

Tiefe der Quelle vergrößert erscheint". Die Absorption sorgt für einen gegenteiligen Effekt, da nur noch die dem Paar zugewandte Seite der Quelle als Entstehungsort zur Verfügung steht.

Es ist dieses Zusammenwirken mehrerer Effekte, welches die Pioninterferometrie so vieldeutig und ungenau macht. Im nächsten Abschnitt werden wir daher eine Quellenfunktion verwenden, die einem realen System sehr viel näher kommt als die primitiven Parametrisierungen in unseren bisherigen Rechnungen. Mit dem Auftreten vielfältiger Kopplungen der dynamischen Parameter untereinander schwindet die Illusion einer Korrelationsanalyse, die uns Schritt für Schritt im Sinne eines Kochrezeptes Resultate über die verschiedensten Quellenparameter hätte liefern sollen.

4.8 Eine komplexere Quellenfunktion: Das Transportmodell IQMD

4.8.1 Das Programm

Das Transportmodell QMD (**Q**uanten**M**olekular**D**ynamik) wurde in der zweiten Hälfte der 80'er Jahre zur Simulation von Schwerionenstößen unterschiedlicher Energien entwickelt [35]. Es handelt sich um ein molekulardynamisches Verfahren: Die Teilchen (Nukleonen, Mesonen und Resonanzen) werden als Gauß-Pakete repräsentiert und unter dem Einfluß von Potentialen zeitlich propagiert. Die Wellenpakete haben hier keine Bedeutung im quantenmechanischen Sinne als Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, sondern als Wechselwirkungsradien für die Kollisionsvorgänge und sind auch nicht dispersiv. Die Bewegungsgleichung ist klassisch, jedoch gibt es zusätzlich stochastische Komponenten in der Dynamik: Bei jeder Kollision zweier Teilchen wird gewürfelt, ob es sich um einen elastischen oder inelastischen Prozeß handelt und in welchen Kanal die Streuung führen soll. An dieser Stelle wird auch das Pauli Prinzip berücksichtigt, denn einem Fermion stehen keine Kanäle zur Verfügung, die in einen bereits belegten Phasenraumzustand führen. Die Wahl der Potentiale zwischen den Teilchen ist derart, daß in einem (hypothetischen) System unendlich ausgedehnter Kernmaterie eine Zustandsgleichung bestehen würde, die durch das sog. Skyrme-Modell beschrieben wird [36]. Skyrme's Ansatz beschreibt die Wechselwirkung in Form von 2- und 3- Teilchenwechselwirkungen und führt im besagten unendlich ausgedehnten System zu einer semiempirischen Zustandsgleichung, welche die potentielle Energie in Relation zur Dichte setzt und eventuell vorhandene Temperaturabhängigkeiten vernachlässigt. Die freie Wahl der Parameter wird eingeschränkt durch gewisse Randbedingungen, daß z. B. die Grundzustandsenergie E/A mit der Bindungsenergie (-16 MeV) übereinstimmen muß. Es bleiben jedoch Freiheitsgrade übrig, so daß das Programm QMD mit unterschiedlichen Zustandsgleichungen (d. h. je nach Wahl der Parameter mit unterschiedlich harten Potentialen) laufen kann. Die erweiterte Version IQMD (**I**sospinQMD) unterscheidet die Ladungen der Teilchen und führt zu einer besseren Repräsentation der Coulomb Effekte [37].

Ein Pion wird erzeugt, falls die Kollision zweier Nukleonen in einen inelastischen Kanal führt und eine Resonanz entsteht, die anschließend zerfällt. Das Pion wird daraufhin mit einer klassischen Bewegungsgleichung propagiert; Bose-Einstein Korrelationen werden nicht berücksichtigt. Es kann zu einer Absorption des Pions und anschließender Reemission kommen, elastische Streuung an Nukleonen wird jedoch nicht simuliert. Die Phasenraumverteilung der schließlich überlebenden Pionen ist daher einerseits durch die Phasenraumverteilung der Resonanzen (in der letzten Generation) zum jeweiligen Zeitpunkt ihres Zerfalls, und andererseits durch deren Massenverteilung bestimmt. Diese Pionen nehmen wir als Ausgangspunkt für unsere Monte Carlo Simulation, um die Bose-Einstein Statistik in das Ensemble einzuführen.

4.8.2 Eigenschaften der Quelle

Es wurden ca. 8300 zentrale und semizentrale (Stoßparameter $<$ 4 fm) Kollisionen von Ni auf Ni mit einer Einschußenergie von 1.93 GeV/A mit dem IQMD Generator simuliert[2]. Es wurde eine „harte Zustandsgleichung“ mit impulsabhängigen Potentialen verwendet (vgl. [35]). Abbildung 4.7 zeigt die wichtigsten Eigenschaften der Quelle bzgl. der negativen Pionen. Teil a) enthält die Multiplizitätsverteilung mit dem Mittelwert $\langle N_{\pi^-}\rangle = 9.5$. Teil b) zeigt die Verteilung der Entstehungszeiten der Pionen nach Berührung der beiden Kerne bei $t = 0$ fm/c. Hier liegt der Mittelwert bei 14.6 fm/c. In c) und d) sind die Verteilungen der X- bzw. Z- Koordinaten der Entstehungsorte wiedergegeben. Während die Quelle in X- Richtung (ebenso wie in Y- Richtung) eine Gauß'sche Form hat (durchgezogene Kurve, $\sigma = 3.9$ fm), ist dies in Z- Richtung nicht mehr der Fall. Diese Asymmetrie liegt darin begründet, daß die Z- Richtung

[2]Ich bedanke mich hiermit herzlich bei Dr. Christoph Hartnack (Nantes), der die Simulationen für mich durchgeführt hat.

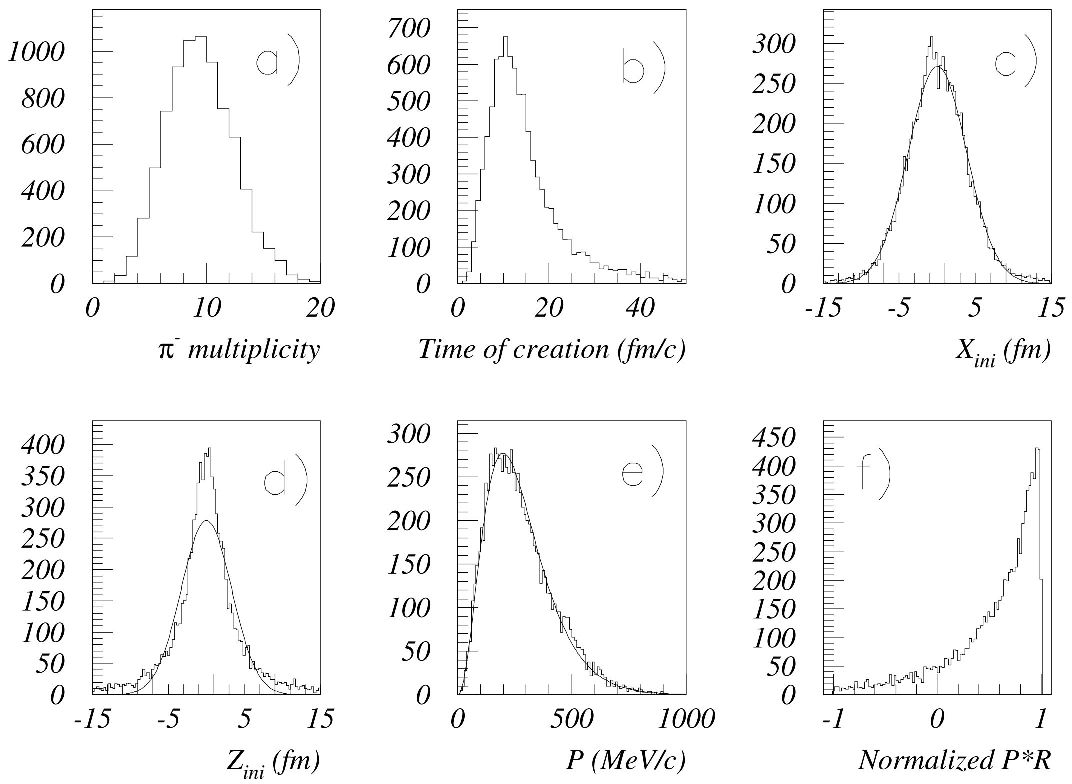

Abbildung 4.7: Statistische Eigenschaften der von IQMD im System Ni+Ni (1.93 GeV/A) erzeugten (negativen) Pionen. a) Multiplizitätsverteilung. b) Verteilung der Entstehungszeiten nach Beginn der Kollision. c) X- und d) Z- Koordinaten der Entstehungsorte. e) Impulsverteilung mit Fit einer relativistischen Maxwellverteilung (durchgezogene Kurve). f) Normiertes Skalarprodukt von Entstehungsort und Impuls.

die Strahlrichtung darstellt und die Quelle daher nicht notwendigermaßen rotationssymmetrisch, sondern lediglich axialsymmetrisch um Z zu sein braucht. In Teil e) ist die Verteilung der Impulse $P = |\mathbf{P}|$ dargestellt. Sie läßt sich mit einer relativistischen Maxwellverteilung Glng. (4.3) mit einer Temperatur von 81 MeV parametrisieren (durchgezogene Kurve). Schließlich zeigt f) die Verteilung des normierten Skalarproduktes $\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}/(|\mathbf{P}||\mathbf{R}|)$. Bei einer Quelle ohne Absorption würde man ein symmetrisches Verhalten um 0 erwarten. Die Tatsache, daß fast keine negativen Werte auftreten, zeigt, daß eine Emission in Richtung des Feuerballs nur selten stattfindet und daher von einer absorbierenden Quelle gesprochen werden kann. Die Näherung, nur Pionen mit positiven Werten von $\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}$ zuzulassen, haben wir in Abschnitt 4.7 eingeführt und sie scheint nicht unrealistisch zu sein. In den nächsten Abschnitten untersuchen wir die Korrelationen in zwei getrennten Schritten: Zunächst unter Verwendung der vollständigen Impulsspektren, die uns die integralen Korrelationsradien liefern, später unter Verwendung der Schnitte in dem Impulssummenvektor $K = |\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2|/2$.

4.8.3 Analyse integraler Radien

Da die generierten Pionen keinerlei Quantenkorrelationen aufweisen, bilden sie ein klassisch- statistisches Ensemble im Phasenraum. Die nun folgende Strategie ist identisch mit derjenigen, die wir in den Abschnitten 4.1 bis 4.3 verfolgt haben: Die Koordinaten der Pionen bilden die Schwerpunktkoordinaten von Wellenpaketen, aus denen wir den n- Teilchenzustand im Impulsraum konstruieren und dann mit Hilfe der Monte Carlo Prozedur (Abschnitt 4.1) Repräsentanten des quantenmechanischen Ensembles erzeugen. Aus den ereignisweise gebildeten Paaren wird die Korrelationsfunktion (Abschnitt 4.2) gebildet, die nach Mittelung über viele Ereignisse eine Korrelationsfunktion des gemischten Ensembles darstellt. Wir können die Statistik künstlich erhöhen, indem wir pro Kollisionsereignis mehr als nur einen Repräsentanten des quantenmechanischen Ensembles auswürfeln. Für die hier vorgestellte Analyse wurden pro Ereignis 50 solcher Repräsentanten erzeugt, was eine Gesamtstatistik von etwa $2 \cdot 10^7$ Paaren ergibt. Die Wellenpakete wurden wieder mit der Breite $\sigma_o = 1.8$ fm initialisiert.

Als Vergleich soll eine Simulation mit einer parametrisierten Quelle „Q1“ durchgeführt werden. Dazu orientieren wir uns an den Quelleneigenschaften, die wir im vorigen Abschnitt analysiert haben. Wir übernehmen die Verteilung der Entstehungszeiten Abb. 4.7 b) direkt, da der Ansatz einer Gauß-Parametrisierung gemäß (4.5) die Verhältnisse nicht genau genug wiederspiegelt. Bei der Ortsraumverteilung ignorieren wir alle Anisotropien und verwenden eine Gauß-förmige Quelle mit $\sigma = 3.9$ fm, was einem Radius von $R_s = \sqrt{2}\sigma = 5.5$ fm entspricht. Die Impulsraumverteilung setzen wir istrop an, mit einem relativistischen Maxwellprofil und einer Temperatur von 81 MeV. Es werden $4 \cdot 10^5$ Ereignisse mit je 10 Pionen simuliert, was etwa dieselbe Statistik wie bei der IQMD Simulation ergibt.

Tabelle 4.1 vergleicht die Resultate der IQMD Quelle mit Q1. Beide liefern im Rahmen der statistischen Fehler identische Resultate. Der transversale Radius R_t stimmt mit dem Wert aus der Faustformel (4.2) überein und repräsentiert folglich den ef-

Tabelle 4.1: Vergleich der Korrelationsradien aus der IQMD Quelle mit denen der parametrisierten Quelle Q1. Alle Angaben in fm Einheiten.

	IQMD	Q1
R	7.7±0.3	7.5±0.4
R_t	6.3±0.4	6.1±0.4
R_l	10.5±1.1	10.5±1.2

fektiven geometrischen Radius der Quelle. Der longitudinale Radius R_l ist trotz der Absorption stark erhöht, eine Folge der langen Lebensdauer (Abb. 4.7 b) der Quelle. Auch der Gesamtradius R ist im Vergleich zum effektiven geometrischen Radius R_t um 15% erhöht.

Aus der überraschend guten Übereinstimmung des einfachen Modells Q1 mit dem sehr komplexen Transportmodell IQMD können wir zwei Schlußfolgerungen ziehen: Erstens haben wir offensichtlich alle wesentlichen Effekte, die den Korrelationsradius beeinflussen, mit unserem Modell erfaßt. Dies ist die positive Seite. Zweitens sind die auf diese Weise gewonnenen Korrelationsradien Observable, die offensichtlich nicht besonders empfindlich auf die genauen physikalischen Abläufe im System ansprechen. Dies ist die negative Seite.

4.8.4 Schnitte (cuts) in K

Die Situation ändert sich, sobald wir damit beginnen, Schnitte auf die Impulsvariablen zu setzen. Wir erinnern uns an Abschnitt 4.5, wo wir Schnitte an dem Summenvektor $K = |\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2|/2$ dazu verwendeten, die radiale Expansion der Quelle zu analysieren. Wir versuchen dasselbe mit der Quelle IQMD und einer parametrisierten Quelle, die wir Q2 nennen. Q2 hat dieselben Eigenschaften wie Q1, jedoch eine reduzierte Temperatur $T = 75$ MeV und dafür eine radiale Expansion von $\beta = 0.3$ c. Wir können nur den Gesamtradius R analysieren, denn die Analyse von R_l bzw. R_t würde zusätzlich scharfe Schnitte in den Differenzvektoren q_t bzw. q_l erfordern, was gemeinsam mit dem Schnitt in K eine zu starke Reduktion der Statistik ergäbe. Die Resultate stehen in Tab. 4.2.

Bereits auf den ersten Blick erkennt man ein qualitativ unterschiedliches Verhalten beider Modelle. Wir beginnen mit der analytischen Quelle Q2: Der Radius wächst mit K, was angesichts der Expansion und der Erfahrungen aus Abschnitt 4.5 sehr überrascht. Des Rätsels Lösung findet man in Abschnitt 4.6 bei Betrachtung des longitudinalen Radius R_l in Glng. (4.8). Mit einem wachsenden Wert K vergrößert sich der Mittelwert $\langle v^2 \rangle$ und somit R_l, was sich auch auf den Gesamtradius auswirkt. Unsere Analyse in Abschnitt 4.5 ist daher definitiv falsch, sobald die Quelle eine Lebensdauer τ besitzt und der Term $\langle v^2 \rangle \tau^2$ in R_l nicht verschwindet. Auf der anderen Seite erkennt man eine Reduktion des Radius mit wachsendem K beim IQMD Modell. Liegt

Tabelle 4.2: Vergleich der Korrelationsradien aus der IQMD Quelle mit denen der parametrisierten Quelle Q2. Alle Radien in fm Einheiten.

K (MeV/c)	R_{IQMD}	R_{Q2}
$[0, 120]$	6.9±0.3	6.4±0.3
$[120, 200]$	6.6±0.2	6.9±0.2
$[200, 300]$	6.3±0.3	7.4±0.3
> 300	6.3±0.5	7.7±0.7

das daran, daß vielleicht die radiale Expansion β wesentlich größer ist als der in Q2 angesetzte Wert $\beta = 0.3$ c und somit der Effekt des wachsenden R_l überkompensiert wird? Dies ist nicht der Fall. Einerseits bräuchte man einen völlig unrealistisch hohen Wert von $\beta \approx 0.7$ c, um dieses Verhalten der Quelle mit Expansion zu erklären, und andererseits zeigt eine weitergehende Analyse des Quellenverhaltens von IQMD, daß sich diese Mühe nicht lohnt:

Abbildung 4.8 zeigt die Korrelationen der dynamischen Variablen $R(t_{\mathrm{ini}})$ und P mit den Entstehungszeiten t_{ini} der Pionen. Im Bild a) erkennt man, daß die Entstehungsorte der Pionen sich im Laufe der Zeit vom Ursprung entfernen, da die Quelle expandiert. Diese Expansion ist nicht ausschließlich durch den Parameter der radialen Expansion β dominiert, sondern insbesondere durch die thermische Expansion (vergl. Abschnitt 2.2). Dem Bild b) entnimmt man ferner, daß es auch eine Korrelation zwischen Emissionszeit und Impuls gibt. Zu früheren Zeitpunkten ist die Quelle „heißer“ als zu späteren Zeitpunkten. Infolge dessen gibt es auch eine Korrelation zwischen Produktionsort und Impuls (Bild c). Im Mittel haben Pionen, die nahe am Ursprung emittiert werden, höhere Impulse, was die Reduktion von R_{IQMD} mit wachsendem K erklärt.

Es ist klar, daß ein detailliertes Verständnis der K Abhängigkeit der Korrelationsradien ein ebenso detailliertes Verständnis dieser Quellendynamik voraussetzt. Dies läßt sich nicht trivial parametrisieren. Wir befinden uns hier folglich in einer Situation, die entgegengesetzt ist zu der in Abschnitt 4.8.3: Aufgrund der Tatsache, daß die Zeit mit dem Impuls korreliert, haben wir eine Art Uhr zur Verfügung, mit der wir im Prinzip die zeitliche Entwicklung des Systems analysieren könnten. Die Kehrseite ist jedoch, daß eine sinnvolle Interpretation der Korrelationsradien ein ebenso genaues Verständnis der Dynamik auf der Ebene des Modells erfordert; mit anderen Worten: Unsere Simulation des Kollisionsvorgangs muß sehr genau und zuverlässig sein, um aus den gemessenen Korrelationsradien die zeitliche Entwicklung z. B. des geometrischen Radius entfalten zu können. Daß dies zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht der Fall ist, zeigt die folgende Analyse.

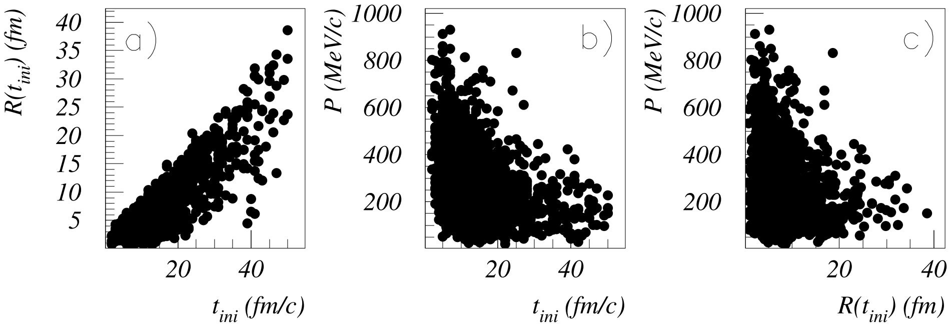

Abbildung 4.8: a) Korrelation von Entstehungsort und -zeit. b) Korrelation von Impuls und Entstehungszeit. c) Korrelation von Impuls und Entstehungsort.

4.8.5 Das Δ-Problem

Die korrekte Behandlung der Δ-Resonanzen in den heutigen Transportmodellen ist in jüngster Zeit wieder zur Disposition gestellt worden. Abgesehen von den notorischen Schwierigkeiten, eine angemessene theoretische Beschreibung der Resonanzen in dem sie umgebenden Medium zu finden, wird jetzt sogar angezweifelt, ob die Streuung zwischen Pion und Nukleon, also ein sehr fundamentaler Prozeß, jemals korrekt behandelt wurde [38]. Es handelt sich hier um ein Problem aus der theoretischen Kernphysik und selbst eine oberflächliche Beschreibung dieser Diskussion würde den Rahmen dieser Arbeit und die Kompetenz des Autors sprengen. Wir überlassen dies daher der Kompetenz der Kernphysiker und halten lediglich fest, daß die Lebensdauer der Resonanzen in den unterschiedlichen Ansätzen stark differiert und daher faktisch unverstanden ist. Dies wirkt sich natürlich direkt auf die Phasenraumverteilung der erzeugten Pionen aus. Aufgrund der unklaren Verhältnisse in der Physik der Resonanzen existieren unterschiedliche Versionen des IQMD- Codes, von denen wir nur zwei vergleichen: Die Standardversion, die wir IQMD1 nennen und die wir bisher zur Analyse der Korrelationen verwendet haben, sowie eine jüngere Version IQMD2, die aus Nantes[3] stammt und in die eine alternative Behandlung der Phasen in der Resonanzwellenfunktion implementiert ist, was sich schließlich als kürzere Lebensdauer der Resonanzen auswirkt.

Tabelle 4.3 zeigt die Korrelationsradien für die unterschiedlichen Versionen. Die IQMD2 Version liefert kleinere Radien, u. a. deshalb, weil die Resonanzen eine kürzere Lebenszeit haben und daher weniger weit propagieren können, bevor sie zerfallen. Die Differenz beträgt gut 20% und ist somit alles andere als ein Randeffekt. Welche Version die Physik der Quelle realistischer modelliert, bleibt abzuwarten. Wir können lediglich festhalten, daß die Fehlertoleranzen in der theoretischen Beschreibung der Quellenfunk-

[3] C. Hartnack und J. Aichelin

Tabelle 4.3: Vergleich der Korrelationsradien aus der IQMD1 Quelle mit denen der IQMD2 Quelle. Alle Angaben in fm Einheiten.

	IQMD1	IQMD2
R	7.7±0.3	6.3±0.3
R_t	6.3±0.4	4.9±0.3
R_l	10.5±1.1	8.3±1.0

tion momentan noch so groß sind, daß eine sehr detaillierte Studie der Quellendynamik via Interferometrie zur Zeit nicht viel Sinn machen würde.

4.9 Fazit: Systeme ohne Wechselwirkung

In diesem Kapitel haben wir untersucht, wie die physikalischen Eigenschaften der Quellenfunktion sich auf die Korrelationssignale in der HBT- Interferometrie auswirken. Wir haben festgestellt, daß Parameter, welche die Expansion, Lebensdauer und Absorption bestimmen, klare Signaturen hinterlassen, solange sie isoliert auftreten, in Kombination jedoch nur schwer zu entfalten sind. Unter Verwendung der komplexen IQMD Quelle wurde demonstriert, daß wenigstens die integralen Werte der Korrelationsradien interpretiert werden können, Schnitte in den Impulsvariablen jedoch zu Resultaten führen, deren Interpretation ein tieferes Verständnis der Dynamik voraussetzt. Für den experimentell arbeitenden Physiker stellt sich das Problem, daß es keine idealen 4π Detektoren gibt und somit jede Messung einen solchen Schnitt, mehr oder weniger scharf, beinhaltet. Den geometrischen Radius der Quelle, den man aus den Korrelationsradien zu extrahieren erhofft, mit einer Genauigkeit von $\pm 10\%$ bestimmen zu wollen, kann man schon als ein sehr ehrgeiziges Vorhaben bezeichnen. Voraussetzung dafür ist neben der akkuraten Messung insbesondere eine zuverlässige Modellierung der Quelle. Hier sind auch seitens der Theorie noch Fragen zu klären.

Das numerische Verfahren, das in diesem Kapitel vorgestellt wurde, schlägt die Brücke zwischen einer beliebigen Quellenfunktion und den observablen Korrelationssignalen. Es liefert somit die Basis für eine eingehende Interpretation der experimentellen Daten auf der einen und, im Gegenzug, für gezielte Verfeinerungen an der theoretischen Modellierung auf der anderen Seite. Unser Verfahren profitierte von der Annahme einer zu vernachlässigenden Endzustandswechselwirkung, denn auf diese Weise war der Impulsraumzustand stationär und eine zeitabhängige Beschreibung überflüssig. In den nächsten Kapiteln müssen wir überprüfen, inwieweit diese Annahme gerechtfertigt war. Zwar existieren eine Reihe semiklassischer Ansätze, mit denen die Coulombwechselwirkung der Pionen miteinander und mit der Quelle analysiert wurde, jedoch sind dem Autor keine echt quantenmechanischen Arbeiten bekannt. Dies ist einerseits überraschend, denn die Bose-Einstein Korrelationen sind ein rein quantenmechanischer Effekt und es ist nicht klar, ob eine Behandlung der Coulomb- Einflüsse auf die Korrelationen in einem klassischen Kontext zu sinnvollen Resultaten führt. Andererseits ist eine exakte Behandlung sehr schwierig, und das nicht nur auf formaler Ebene, sondern auch in ihrem numerischen Aufwand. In den folgenden zwei Kapiteln wollen wir versuchen, einen Kompromiß zwischen formal exakter Beschreibung und dem numerischen Realismus zu finden. Dabei soll die quantenmechanische Eigenschaft des Systems weiterhin den zentralen Pfeiler bilden. Anstatt die Pionen als klassische Teilchen mit Coulomb Wechselwirkung zu simulieren und anschließend durch Symmetrisierung eine quantenmechanische „Korrektur" vorzunehmen, gehen wir davon aus, ein im wesentlichen freies quantenmechanisches System mit einer Coulomb-Korrektur vor uns zu haben. Die Analyse der energetischen Verhältnisse, mit der wir das nächste Kapitel beginnen, liefert uns die Rechtfertigung dafür.

Kapitel 5

Zweiteilchensysteme mit Coulomb-Wechselwirkung

5.1 Charakterisierung des vorliegenden Systems

Bisher haben wir ausschließlich wechselwirkungsfreie Systeme behandelt. Die Rechtfertigung für diese Vorgehensweise nahmen wir aus dem „Freeze-out“ - Szenario, das wir wie folgt interpretierten: Die Pionen, entstanden aus dem Zerfall angeregter Delta-Resonanzen, befinden sich zunächst innerhalb der stark wechselwirkenden Kernmaterie und sind in einem bestimmten Volumen gefangen. Dies modellierten wir unter Verwendung der Wellenpakete, die wir mit einer Anfangsbreite initialisierten. Schlagartig sollten dann sämtliche Wechselwirkungen verschwinden, so daß die anschließende zeitliche Entwicklung des Systems mit Hilfe der freien Schrödingergleichung beschreibbar wird. Deren Lösungen sind im Impulsraum stationär, und daher reichte eine zeitunabhängige Monte Carlo Prozedur aus, um die physikalischen Eigenschaften des Systems zu modellieren.

Dieses „Freeze-out“ - Szenario hat eine gewisse Berechtigung erlangt, was den Umgang mit der starken Wechselwirkung betrifft. Der Grund dafür ist ihre kurze Reichweite, die es erlaubt, alle vorhandenen Partikel als näherungsweise frei zu betrachten, sobald die Dichte des Feuerballs einen bestimmten Wert unterschreitet. Bezogen auf die Coulomb-Wechselwirkung ist dieses Bild jedoch völlig falsch. Bedeutet das, daß die bisher von uns erhaltenen Ergebnisse unzuverlässig oder gar falsch sind?

Eine simple energetische Bilanz weist darauf hin, daß dem nicht so ist: Wir betrachten ein System aus zwei Pionen, die wir als Wellenpakete beschreiben. Ein vernünftiger Wert für das initiale σ_o muß in der Nähe von 2 fm liegen: Viel größer darf er aufgrund der Lokalisierung der Pionen in der Kernmaterie nicht sein, jedoch auch nicht viel kleiner, da andernfalls die Nullpunktsenergie

$$E_q = \frac{3\hbar^2}{8m\sigma_o^2} = \frac{3T_q}{2} \tag{5.1}$$

schnell Werte erreichen würde, die unvereinbar mit dem beobachtbaren Energiespektrum wären. Für $\sigma_o = 2$ fm erhalten wir bereits ≈ 25 MeV Lokalisierungsenergie, die im Verlauf der Dispersion in kinetische Energie umgesetzt wird. Die Coulombenergie schätzen wir ab, indem wir beide Wellenpakete aufeinanderschieben und die Selbstenergie der entstandenen Ladungswolke (mit $Z = 2$) berechnen. Dazu verwenden wir, weil es einfach ist, die bekannte Selbstenergie einer homogen geladenen Kugel mit einem Radius, der dem rms - Radius des Wellenpakets, $R_{\text{rms}} = \sqrt{3}\sigma_o \approx 3.5$ fm, entspricht. Wir erhalten die Energie

$$V_c \approx \frac{3}{5}\frac{Ze^2}{R_{\text{rms}}} \approx \frac{6 \cdot 1.44}{5 \cdot 3.5} \text{ MeV} \approx 0.5 \text{ MeV} , \tag{5.2}$$

die fast zwei Größenordnungen kleiner ist als die Lokalisierungsenergie. Als dritter Beitrag ist die kinetische Energie der Relativbewegung beider Pionen zu berücksichtigen. Für die Korrelationsanalyse liegt sie in dem Bereich zwischen $E_{\text{kin}} = 0.3$ MeV (Auflösungsgrenze des FOPI - Detektors) und $E_{\text{kin}} = 30$ MeV (bei höheren Relativenergien treten keine Bose-Einstein Korrelationen auf). Wir können daher festhalten, daß das System vom energetischen Standpunkt her von der Dispersion und Relativbewegung dominiert wird, während der Coulomb-Beitrag in der Größenordnung eines Prozents liegt.

Diese Abschätzung rechtfertigt unseren Ansatz, das System als „im wesentlichen wechselwirkungsfrei“ aufzufassen. Bemerkenswert ist jedoch, daß in der Fachliteratur Untersuchungen vorherrschen, die unter Verwendung semiklassischer Rechnungen[1] einen signifikanten Einfluß der Pion-Pion Coulomb Wechselwirkung vorhersagen und entsprechend drastische Korrekturverfahren für die gemessenen Korrelationsfunktionen vorschlagen. Dies gilt insbesondere für sehr kleine Relativimpulse, wo die Energiebilanz unter Vernachlässigung der Nullpunktsenergie ein 1 : 1 Verhältnis von Coulombenergie und kinetischer Relativenergie ergibt. Als verheerend könnte sich insbesondere die Gewohnheit vieler Arbeitsgruppen herausstellen, bereits „Coulomb-korrigierte“ Meßdaten zu publizieren.

Angesichts dieser Sachlage erscheint es erstrebenswert, exakte quantenmechanische Analysen vorzunehmen. In den folgenden Abschnitten dieses Kapitels soll ein Verfahren vorgestellt werden, mit dessen Hilfe die Pion-Pion Wechselwirkung auf adequate Weise behandelt werden kann. In der sich anschließenden Analyse der Resultate wird ferner ein Vergleich mit einem der semiklassischen Verfahren durchgeführt.

5.2 Die Notwendigkeit einer zeitabhängigen Behandlung

Die Schrödingergleichung zweier geladener und identischer Bosonen,

$$\hat{H}|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)\rangle = i\hbar\partial_t|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)\rangle , \tag{5.3}$$

[1]Als “semiklassisch“ bezeichnen wir Methoden, die als quantenmechanischen Effekt zwar die Symmetrisierung berücksichtigen, nicht jedoch Delokalisierung und Dispersion, also Heisenberg’s Unschärfe

mit

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2} \equiv \hat{T} + \hat{V} \tag{5.4}$$

und

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)\rangle = \mathcal{N}_2 \left(|\psi_1(\mathbf{r}_1, t)\rangle \, |\psi_2(\mathbf{r}_2, t)\rangle + |\psi_2(\mathbf{r}_1, t)\rangle \, |\psi_1(\mathbf{r}_2, t)\rangle \right) \ , \tag{5.5}$$

hat für Wellenpakete keine geschlossene Lösung, im Gegensatz zum klassischen Zweiteilchenproblem mit Coulombwechselwirkung. Dafür gibt es zwei Ursachen:

1. Aufgrund der komplizierten Interferenzerscheinungen werden die Wechselwirkungs - Matrixelemente impulsabhängig, so daß man im Schwerpunktsystem keine Zentralkräfte mehr vorfindet.

2. Die speziellen Anfangsbedingungen, die zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Lokalisierung der Teilchen *innerhalb* des gegenseitigen Potentials verlangen, lassen sich nicht ohne weiteres in Randbedingungen eines äquivalenten zeitunabhängigen Streuproblems transformieren.

Der zweite Punkt bedarf einer Erklärung: Prinzipiell läßt sich jedes quantenmechanische Problem mit zeitunabhängigem Hamiltonoperator auch zeitunabhängig behandeln. Die Streutheorie ist ein Beispiel dafür. Hier hat man einen bekannten initialen Zustand zum Zeitpunkt $t = -\infty$, dann eine Wechselwirkung bei $t = 0$, und als Resultat schließlich den asymptotischen Zustand zur Zeit $t = +\infty$. Über den Zustand *während* der Wechselwirkung gibt es keine Informationen. Da es die Physik unseres Systems erfordert, einen Zustand unter bestimmten Anfangsbedingungen zur Zeit $t = 0$ zu initialisieren, müßten diese zunächst in entsprechende Randbedingungen des Streuproblems transformiert werden. Eine zeitabhängige numerische Behandlung des Systems umgeht dieses Problem, ist außerdem flexibler, anschaulicher und liefert eine Zeitskala, was eine Interpretation der physikalischen Vorgänge erleichtert.

Unter den „exakten“ Verfahren zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung kann man zwei grundsätzlich verschiedene Typen unterscheiden: Die Lösung der Schrödingergleichung auf einem Gitter und die Entwicklung der Wellenfunktion in Basiszustände. Die Gittermethode ist formal einfacher, stößt jedoch sehr schnell an die Grenze der Computerkapazität: Der Konfigurationsraum eines quantenmechanischen Zweiteilchensystems erfordert bereits ein 6 dimensionales Gitter und ist nicht mehr in der notwendigen Granularität darstellbar (vergl. H. De Raedt in [26], S. 209). Wir konzentrieren uns daher auf die zweite Methode, die bei geeigneter Wahl der Basisfunktionen wesentlich effizienter implementiert werden kann.

5.3 Matrixdarstellung der Schrödingergleichung

Wir entwickeln die Wellenfunktion (5.5) in eine Reihe von Basisfunktionen:

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)\rangle = \sum c_k(t) \, |\Psi_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)\rangle \tag{5.6}$$

mit den i. a. komplexwertigen Koeffizienten

$$c_k(t) = \langle \Psi_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) | \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \rangle \ . \tag{5.7}$$

Die Gleichung (5.6) ist erfüllt, falls die $|\Psi_k\rangle$ einen vollständigen Satz bilden. Die Schrödingergleichung wird dann zu

$$\hat{H} \sum c_k \, |\Psi_k\rangle = i\hbar \, \partial_t \sum c_k \, |\Psi_k\rangle \ , \tag{5.8}$$

und nach Linksmultiplikation mit $\sum \langle \Psi_l|$ erhalten wir

$$\sum_{k,l} \langle \Psi_l | \hat{H} | \Psi_k \rangle \, c_k = i\hbar \sum_{k,l} \left(\langle \Psi_l | \partial_t | \Psi_k \rangle c_k + \langle \Psi_l | \Psi_k \rangle \, \dot{c}_k \right) \ . \tag{5.9}$$

In der Matrixnotation wird das zu

$$\tilde{H} \, \mathbf{c} = i\hbar \left(\tilde{D} \, \mathbf{c} + \tilde{S} \, \dot{\mathbf{c}} \right) \tag{5.10}$$

oder, da die Überlappmatrix $\tilde{S}$ invertierbar ist,

$$\dot{\mathbf{c}} = \tilde{S}^{-1} \left(\frac{1}{i\hbar} \tilde{H} - \tilde{D} \right) \mathbf{c} \ . \tag{5.11}$$

Diese Form der Schrödingergleichung ist nur dann äquivalent zu (5.3), falls die Basis einen vollständigen Satz bildet. In der Praxis verwendet man nur einen endlichen Satz von Basisfunktionen, weshalb es darauf ankommt, eine Auswahl zu treffen, die das physikalische System so effektiv wie möglich anzunähern vermag.

5.4 Auswahl eines geeigneten Basissatzes

Es gilt die simple Formel: *Ein Basissatz ist genau dann optimal, wenn er das Problem bei vorgegebener Genauigkeit mit minimalem numerischen Aufwand löst.* Der numerische Aufwand ist im wesentlichen von zwei Faktoren bestimmt,

1. von der Anzahl der benötigten Basisfunktionen, also der Dimensionalität der Matrizen $\tilde{H}$, $\tilde{D}$ und $\tilde{S}$

2. von der Anzahl der Rechenoperationen, die benötigt werden, um die einzelnen Matrixelemente zu berechnen.

Der zweite Punkt ist relativ leicht abzuhandeln: Dominant ist die Berechnung der Matrix $\tilde{H}$. Wir schreiben

$$H_{ij} = \langle \Psi_i | \hat{T} | \Psi_j \rangle + \langle \Psi_i | \hat{V} | \Psi_j \rangle \ , \tag{5.12}$$

wobei der kinetische Operator $\hat{T}$ und der Potentialoperator $\hat{V}$ bereits in (5.4) definiert worden sind. Letzterer ist ein Zweiteilchenoperator, weshalb das Integral $\langle \Psi_i | \hat{V} | \Psi_j \rangle$

nicht separiert und als 6 dimensionales Integral berechnet werden muß. Eine geeignete Basiswahl steht und fällt mit der Möglichkeit, die Dimensionalität dieses Integrals zu reduzieren, d. h. so weit wie möglich analytisch zu rechnen. In der Quantenchemie finden daher hauptsächlich die *primitiven Gauß-Funktionen*

$$\chi_{lmn}(x, y, z) = x^l \, y^m \, z^n \, e^{-ar^2} \tag{5.13}$$

als Basissatz Verwendung; in [39] ist gezeigt, daß die hier auftretenden Matrixelemente analytisch berechenbar sind, mit Ausnahme der Wechselwirkungsmatrixelemente $\langle \Psi_i | \hat{V} | \Psi_j \rangle$, die sich jedoch reduzieren lassen auf analytische Anteile und einer verbleibenden 1 dimensionalen Integration. Letztere ist als unvollständige Gammafunktion darstellbar und kann tabelliert werden.

Wie kann man die Anzahl der zu verwendenden Basisfunktionen möglichst klein halten? Um dieses Problem behandeln zu können, betrachten wir noch einmal Gleichung (5.11):

$$\dot{\mathbf{c}} = \tilde{S}^{-1} \left(\frac{1}{i\hbar} (\tilde{T} + \tilde{V}) - \tilde{D} \right) \mathbf{c} \equiv \tilde{H}^{\text{eff}} \, \mathbf{c} \; . \tag{5.14}$$

Der Koeffizientenvektor **c** wird zu Beginn der Simulation mit nur einem nichtverschwindenden Eintrag initialisiert, z. B.

$$\mathbf{c}(t=0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \; , \tag{5.15}$$

wobei die 1 der Koeffizient der Ausgangsfunktion Ψ_1 ist. Je „kleiner" die Ableitung $\dot{\mathbf{c}}$ im folgenden bleibt, desto weniger weitere Basisfunktionen werden im Verlauf der Zeitentwicklung angeregt werden. Es gilt daher, durch geeignete Manipulation an den Basisfunktionen die Matrix $\tilde{H}^{\text{eff}}$ so „klein" wie möglich zu halten. Sollte beispielsweise Ψ_1 bereits die exakte Lösung der Schrödingergleichung sein, dann erhalten wir aus (5.14) und (5.3)

$$\dot{c}_i = \tilde{H}^{\text{eff}}_{i1} \, c_i = \tilde{S}^{-1} \left(\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_i | \hat{H} | \Psi_1 \rangle - \langle \Psi_i | \partial_t | \Psi_1 \rangle \right) c_i = 0 \; , \tag{5.16}$$

so daß wir für alle Ewigkeit mit einer einzigen Funktion auskommen. Die Philosophie lautet daher: *Je mehr Zeitabhängigkeit wir in die Basisfunktionen stecken, desto weniger verbleibt für die Koeffizienten und desto kleiner kann die Basis gewählt werden.* An diesem Punkt kommt die Physik des Systems ins Spiel: Wie wir zu Beginn des Kapitels festgestellt haben, ist die Zeitentwicklung dominiert durch diejenige eines freien Systems. Für die Rechenpraxis bedeutet das, daß die Matrizen $\tilde{T}$ und $\tilde{D}$ einen erheblich größeren Beitrag zu $\tilde{H}^{\text{eff}}$ liefern als $\tilde{V}$. Benutzen wir exakte Lösungen der freien Schrödingergleichung als Basisfunktionen, so reduziert sich (5.14) zu

$$\dot{\mathbf{c}} = \tilde{S}^{-1} \frac{1}{i\hbar} \tilde{V} \mathbf{c} \tag{5.17}$$

und 99 % der Dynamik steckt bereits in den Basisfunktionen anstatt in in den Entwicklungskoeffizienten. Aus diesem Grunde verwenden wir nicht die primitiven Gauß-Funktionen (5.13) als Basisfunktionen, sondern die zeitabhängigen Funktionen

$$\chi_{\vec{l}_j k}(\mathbf{r},t) = x_k^{l_{jx}}\, y_k^{l_{jy}}\, z_k^{l_{jz}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{P}_k(t)\cdot\mathbf{r} - \theta_{\vec{l}_j,k}(t)\right) - \frac{\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k(t)\right)^2}{4s(t)\sigma_o}\right) \tag{5.18}$$

mit der zeitabhängigen Phase

$$\theta_{\vec{l}_j,k}(t) = \int_0^t E_k^{\mathrm{kin}}(\tau)\, d\tau + \hbar\,(l_{jx}+l_{jy}+l_{jz}+3/2)\,\arctan\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\right) \tag{5.19}$$

und $x_k^{l_{jx}} = (\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)_x^{l_{jx}}$, analog die y und z Koordinaten. Der Index k bezieht sich auf die Phasenraumkoordinate, während j den Anregungszustand der Funktion ausdrückt. Diese Wellenfunktionen sind eine direkte Verallgemeinerung der Gauß-Funktion (2.14), wobei wir auch zeitabhängige Impulse $\mathbf{P}_k(t)$ zulassen wollen. Dies ermöglicht eine weitere Reduktion des effektiven Hamiltonians, da die bei der Zeitableitung zusätzlich auftretenden Terme mit geeigneter Wahl von $\dot{\mathbf{P}}_k$ dazu verwendet werden können, Anteile aus $\tilde{V}$ zu eliminieren.

Der nächste Schritt ist die Bildung der 2- Teilchen Basisfunktionen aus den 1-Teilchen Zuständen. Dazu wählen wir stets symmetrisierte Produkte der Form

$$\Psi_{\vec{l}_i 1;\vec{l}_k 2} \sim \chi_{\vec{l}_i 1}(\mathbf{r}_1,t)\,\chi_{\vec{l}_k 2}(\mathbf{r}_2,t) + \chi_{\vec{l}_k 2}(\mathbf{r}_1,t)\,\chi_{\vec{l}_i 1}(\mathbf{r}_2,t)\ , \tag{5.20}$$

denn auf diese Weise erfüllt jede einzelne Basisfunktion die korrekte Permutationssymmetrie.

Speziell im Zweiteilchensystem ohne äußere Kräfte tritt noch eine weitere Symmetrie auf: Das Amplitudenquadrat der Wellenfunktion muß punktsymmetrisch um den Schwerpunkt liegen, denn es gibt keinen Grund, eines der zwei Zentren anders zu behandeln als das andere. Dies erfordert

$$\Psi_{\vec{l}_i 1;\vec{l}_k 2}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = \pm\,\Psi_{\vec{l}_i 1;\vec{l}_k 2}(-\mathbf{x}_1,-\mathbf{x}_2) \tag{5.21}$$

Unter Verwendung der Einteilchenfunktionen (5.18) und der Beziehungen im Schwerpunktsystem, $\mathbf{R}_1 = -\mathbf{R}_2$ und $\mathbf{P}_1 = -\mathbf{P}_2$, erhält man aus (5.21) die Forderungen

$$\begin{aligned} &(\mathbf{x}_1+\mathbf{R}_x)^{l_{2x}}\cdot(\mathbf{x}_2-\mathbf{R}_x)^{l_{1x}} = \pm\,(-\mathbf{x}_1-\mathbf{R}_x)^{l_{1x}}\cdot(-\mathbf{x}_2+\mathbf{R}_x)^{l_{2x}} \\ \text{und}\qquad &(\mathbf{x}_1-\mathbf{R}_x)^{l_{1x}}\cdot(\mathbf{x}_2+\mathbf{R}_x)^{l_{2x}} = \pm\,(-\mathbf{x}_1+\mathbf{R}_x)^{l_{2x}}\cdot(-\mathbf{x}_2-\mathbf{R}_x)^{l_{1x}}\ . \end{aligned} \tag{5.22}$$

Analoge Ausdrücke erhält man für die anderen Koordinaten. Die Bedingungen sind nur erfüllbar, falls $l_{1x} = l_{2x}$ ist, so daß nur die homogenen Basisfunktionen der Form

$$\Psi_{\vec{l}_i 1;\vec{l}_i 2} \sim \chi_{\vec{l}_i 1}(\mathbf{r}_1,t)\,\chi_{\vec{l}_i 2}(\mathbf{r}_2,t) + \chi_{\vec{l}_i 2}(\mathbf{r}_1,t)\,\chi_{\vec{l}_i 1}(\mathbf{r}_2,t) \tag{5.23}$$

die korrekte Symmetrie erfüllen. Wir benutzen daher folgendes Basissystem:

$$
\begin{array}{ll}
s: & \Psi_{000,1;000,2} \\
p: & \Psi_{100,1;100,2},\ \Psi_{010,1;010,2},\ \Psi_{001,1;001,2} \\
d: & \Psi_{200,1;200,2},\ \Psi_{020,1;020,2},\ \Psi_{002,1;002,2} \\
 & \Psi_{110,1;110,2},\ \Psi_{101,1;101,2},\ \Psi_{011,1;011,2} \\
f: & \Psi_{300,1;300,2},\ \Psi_{030,1;030,2},\ \Psi_{003,1;003,2} \\
 & \Psi_{210,1;210,2},\ \Psi_{201,1;201,2},\ \Psi_{120,1;120,2} \\
 & \Psi_{021,1;021,2},\ \Psi_{102,1;102,2},\ \Psi_{012,1;012,2} \\
 & \Psi_{111,1;111,2}\ .
\end{array}
\tag{5.24}
$$

Die Verwendung noch größerer Systeme scheitert an dem exponentiell anwachsenden Rechenaufwand. Folgende Werte sollen einen groben Anhaltspunkt liefern: Die Berechnung einer vollständigen Zeitentwicklung (mit ≈ 500 Zeitschritten) erfordert für eine *sp* - Basis etwa 1 Minute, mit *spd* - Basis etwa 1/2 Stunde und mit *spdf* - Basis etwa 1/2 Tag. Die Werte wurden auf einer DEC Alpha Workstation (266 MHz) erziehlt.

Bei der Berechnung der Potentialmatrixelemente $\langle\Psi_i|V|\Psi_j\rangle$ treten Integrale der Form

$$J_{\vec{l}_j,\vec{l}_k} \equiv \langle\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_j,2}(\mathbf{r}_2)|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}|\chi_{\vec{l}_k,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_k,2}(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{5.25}$$

und

$$K_{\vec{l}_j,\vec{l}_k} \equiv \langle\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_j,2}(\mathbf{r}_2)|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}|\chi_{\vec{l}_k,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_k,1}(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{5.26}$$

auf, wobei die $J_{\vec{l}_j,\vec{l}_k}$ „Coulombintegrale“ genannt werden und die $K_{\vec{l}_j,\vec{l}_k}$ „Austauschintegrale“. Letztere entstehen infolge der Interferenz und sind ein reiner Quanteneffekt. Insgesamt sind bei einem Basissatz von n Funktionen $2n(n+1)$ solcher Potentialmatrixelemente zu berechnen. Ist die Punktsymmetrie des Systems durch ein zusätzliches äußeres Potential gestört, so muß man auch inhomogene Funktionen der Form (5.20) in den Basissatz aufnehmen, was die Anzahl der Integrale auf $\sim n^4$ erhöht.

5.5 Lösung der Schrödingergleichung

Die explizite Berechnung der Matrixelemente ist sehr kompliziert und wird ausführlich in Anhang C gezeigt. Es stellt sich heraus, daß für unsere zeitabhängigen Basisfunktionen fast ausschließlich analytische Ausdrücke für die Matrixelemente gefunden werden können, mit Ausnahme der Potentialmatrixelemente, für die eine numerische Berechnung der unvollständigen Gammafunktion erforderlich ist. Zunächst werden in Abschnitt C.1 Ausdrücke der Coulomb- und Austauschintegrale für die s - Funktionen hergeleitet. In den beiden folgenden Abschnitten werden die allgemeineren Integrale $J_{\vec{l}_j,\vec{l}_k}$ und $K_{\vec{l}_j,\vec{l}_k}$ berechnet. In C.4 werden die notwendigen Normierungen und Überlappintegrale der Form $\langle\Psi_{\vec{l}_i1,\vec{l}_k2}|\Psi_{\vec{l}_j1,\vec{l}_l2}\rangle$ berechnet, es folgen die kinetischen Energien

$\langle\Psi_{\vec{l}_i1,\vec{l}_k2}|\tilde{T}|\Psi_{\vec{l}_j1,\vec{l}_l2}\rangle$ in C.5 und die Integrale der Zeitableitungen $\langle\Psi_{\vec{l}_i1,\vec{l}_k2}|\tilde{D}|\Psi_{\vec{l}_j1,\vec{l}_l2}\rangle$ in C.6.

Das Programm wurde in C^{++} codiert. Die Berechnung eines Ereignisses kann man wie folgt schematisieren:

1. Zu Beginn der Simulation wird die unvollständige Gammafunktion $F_\nu(x)$ (C.31) in dem Bereich $-25 < x < 25$ für jeden Wert von ν mit 5000 Einträgen tabelliert und später via Interpolation ausgelesen. Für den Fall, daß x den tabellierten Bereich überschreitet, wird $F_\nu(x)$ in Echtzeit berechnet (was selten vorkommt). Für sehr große Argumente (d. h. $x > 20$) konvergiert die Reihe (C.31) nur noch langsam. In diesem Bereich kann die folgende Approximation benutzt werden ([39], s. 303):
$$F_\nu(x) \approx \frac{\Gamma(\nu + 1/2)}{2x^{\nu+1/2}} . \tag{5.27}$$

2. In jedem Ereignis werden zunächst die initialen Phasenraumkoordinaten $\mathbf{P}_i(0)$ und $\mathbf{R}_i(0)$ beider Pionen ausgewürfelt. Dazu werden die simplen Phasenraumverteilungen (3.4) und (3.5) mit einem vorgegebenen Quellenradius R_s und einer Temperatur T verwendet.

3. Es folgt die Berechnung der Matrizen S, T und der Wechselwirkungsmatrix V. Die Kraft zwischen beiden Wellenpaketzentren ist die Ableitung von V nach dem Abstand beider Zentren. Sie wird numerisch bestimmt, wobei ausgenutzt wird, daß aufgrund der Punktsymmetrie der Gradient des Potentials in Richtung der Verbindungslinie beider Zentren liegen muß, so daß eine nur eindimensionale Differentiation erforderlich ist. Wir definieren dann $\dot{\mathbf{P}}_2 \equiv -\nabla_{R_{21}}\langle\Psi|V|\Psi\rangle$ und $\dot{\mathbf{P}}_1 = -\dot{\mathbf{P}}_2$.

4. Nun kann die Matrix D, welche die Ableitungen $\dot{\mathbf{P}}_i$ enthält, berechnet werden.

5. Bevor anhand der Schrödingergleichung (5.11) die Ableitung des Koeffizientenvektors bestimmt werden kann, muß vorher noch die Überlappmatrix S invertiert werden. Da S hermitesch und (in praktischen Anwendungen) positiv definit ist, kann ein Cholesky Verfahren zur Dreieckszerlegung verwendet werden. Die erhaltene Dreiecksmatrix läßt sich dann trivial invertieren.

6. Nach Erhalt des Ableitungsvektors $\dot{\mathbf{c}}$ kann der neue Koeffizientenvektor $\mathbf{c}(t+\Delta t)$ bestimmt werden. Die Erfahrung mit Integratoren zeigt, daß eine größere Stabilität des Algorithmus gewährleistet ist, falls man anstelle des simplen Schemas
$$\mathbf{c}(t + \Delta t) = \mathbf{c}(t) + \Delta t\, \dot{\mathbf{c}}(t) \tag{5.28}$$
das verschobene Schema
$$\mathbf{c}(t + \Delta t/2) = \mathbf{c}(t - \Delta t/2) + \Delta t\, \dot{\mathbf{c}}(t) \tag{5.29}$$
verwendet, das einem „Leap-Frog“ Verfahren [40] entspricht und zu den Integratoren zweiter Ordnung gezählt wird.

7. Der Zeitschritt Δt ist abhängig von der im System vorhandenen Energie. Es gilt für Integratoren zweiter Ordnung, daß

$$\Delta t < \frac{\hbar}{E_{\max}} \tag{5.30}$$

gelten muß, um Stabilität des Algorithmus zu erhalten, in der Praxis jedoch meist ein um den Faktor 5 kleinerer Zeitschritt verwendet wird [41]. $E_{\max}$ ist in unserem Fall nicht eindeutig, da die Wellenpakete keine Eigenfunktionen zum Hamiltonian sind. Wir verwenden daher $E \equiv E_q + E_{\rm kin}$, die Summe von Nullpunkts- und (relativer) kinetischer Energie (da die potentielle Energie vernachlässigbar ist) und die Relation

$$\Delta t = \frac{\hbar}{5E} \, . \tag{5.31}$$

8. Mit der Propagation wird solange fortgefahren, bis die restliche vorhandene Coulombenergie weniger als 5 % des Ausgangswertes hat.

Die Routinen zu den numerischen Verfahren mußten überwiegend mit der Hand implementiert werden, da die verfügbaren Standardbibliotheken eine Numerik komplexer Matrizen i. a. nicht unterstützen.

5.6 Korrelationsanalyse

Nach Abschluß der Simulationen haben wir ein gemischtes Ensemble von Wellenfunktionen in Ortsraumdarstellung vorliegen. Gesucht ist jedoch eine Korrelationsfunktion im Impulsraum, so daß zunächst ereignisweise eine Fouriertransformation durchgeführt werden muß. Dies ist für unsere Wellenfunktionen analytisch machbar. So erhält man als Fouriertransformierte der Einteilchenfunktionen (5.18)

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{l}_j k}(\mathbf{p}) &= h^{-3/2} \int \chi_{\vec{l}_j k}(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}\, d^3\mathbf{r} \\ &= (2s\sigma_o)^{3/2} (-s\sigma_o)^{l_j/2}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_k + \theta_{\vec{l}_j,k})}\, e^{-\frac{p^2\sigma_o s}{\hbar^2}}\, H_{l_{jx}}(a_x)\, H_{l_{jy}}(a_y)\, H_{l_{jz}}(a_z) \end{aligned} \tag{5.32}$$

mit

$$a_x = -\frac{p_x\sqrt{s\sigma_o}}{\hbar} \, , \tag{5.33}$$

sowie $l_j = l_{jx} + l_{jy} + l_{jz}$ und den Hermite-Polynomen $H_n(z)$, die in (C.21) definiert sind. Hieraus lassen sich die 2-Teilchenfunktionen im Impulsraum zusammensetzen, d. h., wir schreiben

$$\Phi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \sum c_j\, \Phi_j(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \tag{5.34}$$

mit

$$\Phi_j(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = 2^{-1/2} \mathcal{N}^{1/2}_{\vec{l}_j, \vec{l}_j} \Big(\phi_{\vec{l}_j 1}(\mathbf{p}_1)\, \phi_{\vec{l}_j 2}(\mathbf{p}_2) + \phi_{\vec{l}_j 2}(\mathbf{p}_1)\, \phi_{\vec{l}_j 1}(\mathbf{p}_2) \Big) \tag{5.35}$$

und der Normierung $\mathcal{N}_{\vec{l}_j, \vec{l}_j}$, die in (C.85) berechnet wird.

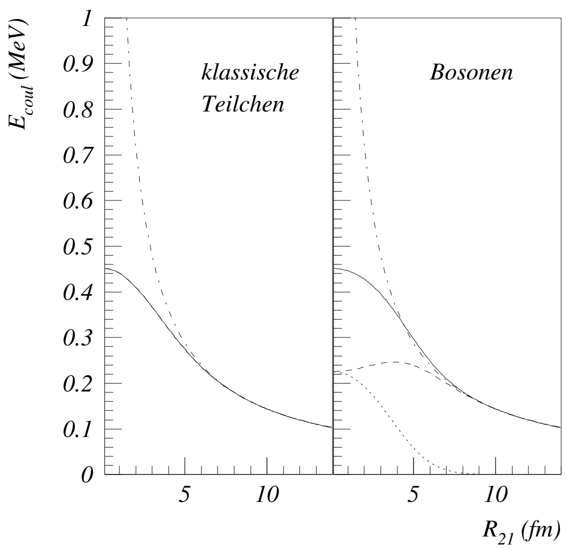

Abbildung 5.1: Links: Coulombenergie zweier Gauß'scher Ladungswolken mit $\sigma_o = 1.8$ fm (durchgezogen) im Vergleich mit punktförmigen Ladungen (gestrichpunktet). R_{21} ist der Abstand zwischen den Zentren. Rechts: Mit Bose-Statistik. Die gestrichelte Kurve zeigt den Coulomb-, die gepunktete den Austausch-Anteil.

Diese Wellenfunktionen definieren jeweils ein quantenmechanisches Ensemble von 2-Teilchensystemen. Um die korrelierten Teilchen zu erhalten, verwenden wir eine Monte Carlo Prozedur, wie sie in Abschnitt 4.1 beschrieben wurde. Auf diese Weise läßt sich ein und dieselbe Wellenfunktion vielmals verwenden, um ein (reines) Ensemble von Teilchenpaaren zu erzeugen. Dies ist von großer Bedeutung angesichts des hohen Rechenaufwands, der für die Erzeugung der Wellenfunktionen nötig ist. Die Generation von 10000 Ereignissen mit einem *sp*- Basissystem benötigt bereits mehrere Tage, für eine genaue Korrelationsanalyse sind jedoch einige Millionen Pion-Paare erforderlich. Dies wird erreicht, indem jede der 10000 Wellenfunktionen beispielsweise 1000 mal dazu benutzt wird, mittels der Monte Carlo Prozedur ein Pion-Paar zu erzeugen. Dies bedeutet, daß wir am Ende 10000 reine quantenmechanische Ensemble mit jeweils 1000 Paaren erzeugt haben, die zu einem gemischten Ensemble mit 10^7 Paaren zusammengefügt werden.

5.7 Resultate

5.7.1 Die effektive Coulombwechselwirkung

Abbildung 5.1 untermauert quantitativ die Abschätzung zu Beginn des Kapitels bzgl. der Coulombenergie zweier Pionen: Der linke Teil zeigt das Potential zweier Gaußförmiger Ladungsverteilungen mit $\sigma_o = 1.8$ fm im Vergleich zu Punktladungen. Die durchgezogene Linie ist (bis auf Normierungen) das Resultat von Gleichung (C.29). Für große Abstände sind die Potentiale identisch, sobald jedoch beide Ladungswolken überlappen, benötigt man weniger Energie als im Falle punktförmiger Teilchen, um sie weiter ineinander zu schieben. Bei identischen Bosonen ist die Lage komplizierter (rechte Seite): Neben dem Coulomb-Term (C.29), der hier gestrichelt dargestellt ist, taucht bei Überlapp noch der Austausch-Term auf (C.30), gepunktet dargestellt, der aus der

Tabelle 5.1: Mittlere Werte für die potentielle Energie (2. Spalte), die Änderung der kinetischen Energie (3. Spalte) und den Anregungsgrad der p- Basis (4. Spalte) für unterschiedliche Ladungszahlen. Die Zahl (in Klammern) bedeutet jeweils, daß in 10% der Ereignisse der angegebene Wert überschritten wurde.

Z	$\langle E_{\text{coul}}\rangle$ (MeV)	$\langle \Delta E_{\text{kin}}\rangle$ (MeV)	$\langle 1-\lvert c_s\rvert\rangle$
1	0.21 (0.35)	0.15 (0.25)	0.004 (0.01)
3	1.9 (3.2)	1.3 (2.5)	0.03 (0.09)
5	5.2 (9.0)	3.7 (7.0)	0.08 (0.2)

Interferenz beider Wellenfunktionen hervorgeht. Warum ist der Coulomb-Anteil nicht identisch mit dem klassischen Potential auf der linken Seite? Grund dafür ist die Normierung der Zweiteilchenfunktion (C.94), die aufgrund der Interferenz eine Abhängigkeit vom Abstand beider Zentren aufweist. Dies führt zu dem kuriosen Phänomen, daß der Coulomb-Anteil nicht notwendigermaßen monoton mit wachsendem Abstand fällt, sondern ansteigen kann, was bedeutet, daß dieser Term einen attraktiven Beitrag zur Coulomb-Kraft leistet, obwohl beide Teilchen identische Ladungen tragen. Es lassen sich leicht Parametersätze finden, für die sogar das Gesamtpotential, d. h. Coulomb- plus Austausch-Beitrag, für kleine Abstände zunächst ansteigt, bevor es mit wachsendem Abstand wieder abfällt. Das bedeutet, daß die Zustände bei dieser speziellen Initialisierung ein attraktives effektives Potential erfahren können. Dieses ist jedoch um Größenordnungen kleiner als die Nullpunktsenergie und kann daher nicht zu gebundenen Zuständen führen. Für die Rechenpraxis entscheidender ist die Tatsache, daß die Divergenz des Coulombpotentials aufgrund der Delokalisierung der Pionen verschwunden ist.

5.7.2 Einfluß auf die Korrelationen

Es wurden 3 Simulationen mit Ladungszahlen $Z = 1$, $Z = 3$ und $Z = 5$ durchgeführt[2]. Die Zustände wurden jeweils mit einer Breite von $\sigma_o = 1.8$ fm initialisiert, der Radius der Gauß-förmigen Quelle zu $R_s = 5.0$ fm und die Temperatur zu $T = 50$ MeV angesetzt. Es wurden je 2000 Ereignisse mit einem sp- Basissystem (5.24) berechnet. Die mittlere Systemzeit betrug jeweils etwa 130 fm/c (250 fm/c), wobei die Zahl in den Klammern bedeutet, daß 10% der Ereignisse mehr als 250 fm/c benötigte, bis das Coulombpotential auf 5% des ursprünglichen Wertes (Abbruchbedingung) abgefallen war.

Tabelle 5.1 faßt einige relevante Systemeigenschaften zusammen. Die mittlere potentielle Energie wächst, wie zu erwarten, quadratisch mit der Ladungszahl Z der

[2]Dem Autor ist bekannt, daß es neben den ungeladenen nur einfach geladene Pionen gibt. Die Verwendung höherer Ladungszahlen hat lediglich didaktische Gründe

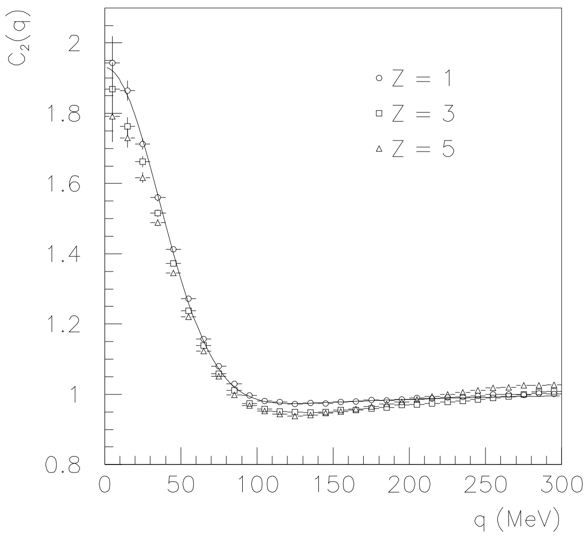

Abbildung 5.2: Die Korrelationsfunktionen für unterschiedliche Ladungszahlen. Die durchgezogene Linie ist die theoretische Korrelationsfunktion (3.13) für ungeladene Bosonen.

Teilchen. Die Werte sind in Relation zu setzen mit der Nullpunktsenergie des Systems, die, unabhängig von Z, etwa 60 MeV beträgt. Die kinetische Energie des Systems ändert sich im Verlauf der Zeitentwicklung, da die Impulse $\mathbf{P}_i$ der Wellenpakete variabel sind. Ein quantitativer Vergleich der mittleren Energieänderung (3. Spalte) mit der mittleren potentiellen Energie (2. Spalte) zeigt, daß in allen Simulationen ca. 70% der Coulombenergie in kinetische Energie der Wellenpakete umgewandelt wird. Die restlichen 30% fließen in die Anregung der p- Basisfunktionen, d. h. in die Deformation der Wellenpakete. Man beachte, daß die Gauß'schen Wellenpakete *Minimalwellenpakete* sind, was bedeutet, daß jede Abweichung von der Gauß'schen Form zu einer erhöhten Lokalisierungsenergie führt, die sich im Impulsspektrum als anisotroper Beitrag bemerkbar macht. Die 4. Spalte der Tabelle zeigt, daß der Anregungsgrad jener höheren Basisfunktionen vergleichsweise gering bleibt. Dies ist nicht überraschend, denn die Quantenenergie einer primitiven p- Wellenfunktion ist um den Betrag $\hbar^2/(4m\sigma_o^2) \approx 20$ MeV höher als die der s- Funktion, so daß bereits ein geringer Anregungsgrad ausreicht, um die Energiebilanz des Systems durch Anregung auszugleichen.

Um die Korrelationsfunktionen zu erhalten, wurde jede der 2000 resultierenden Wellenfunktionen in den Impulsraum transformiert und zur Generation von je 5000 Teilchen-Paaren verwendet, was eine Gesamtstatistik von 10^7 Paaren ergibt. Daraufhin wurden die Korrelationsfunktionen unter Verwendung der Relation (3.10) auf statistischem Wege ermittelt. Das Ergebnis ist in Abb. 5.2 dargestellt.

Zwei Dinge fallen auf:

1. Die Korrelation der einfach geladenen Teilchen (Punkte) unterscheiden sich nicht signifikant von derjenigen ungeladenen Teilchen (Kurve).

2. Die 3- und 5- fach geladenen Teilchen zeigen Korrelationsfunktionen, die sich in ihrer Form global voneinander unterscheiden.

Beide Resultate entsprechen nicht den Erwartungen, die man aus der Analyse semiklassischer Modelle erhält. Als Beispiel diskutieren wir eines der zur Zeit gängigen Standardverfahren zur Korrektur der Pion-Pion Coulomb-Wechselwirkung, das *Toy-model*-Verfahren [42]. Das Modell geht davon aus, daß von einem bestimmten Zeitpunkt an die Pionen der Abschirmung durch die Kernmaterie entkommen und anschließend das gegenseitige Coulomb Potential zu wirken beginnt. Dies wird über einen initialen Abstand r_o ausgedrückt, welcher als freier Parameter in das Modell eingeht. Der Einfluß dieser Wechselwirkung drücke sich in der folgenden Relation aus:

$$\frac{q^2}{2m_{\mathrm{red}}} = \frac{q_o^2}{2m_{\mathrm{red}}} + \frac{e^2}{r_o}\,, \tag{5.36}$$

was nach einigen vereinfachenden Annahmen zu der folgenden Korrelationsfunktion führt:

$$\mathcal{C}(\mathbf{q}) = \left(1 - \frac{2m_{\mathrm{red}}e^2}{r_o q^2}\right)^{1/2} C_o(\mathbf{q}_o) \equiv \kappa(q)\, C_o(\mathbf{q}_o)\,. \tag{5.37}$$

Gemäß diesem Modell erhält man daher die Korrelationsfunktion mit Coulomb-Wechselwirkung aus der ungestörten Korrelationsfunktion nach Anwendung eines Korrekturfaktors $\kappa(q)$, der von dem Parameter r_o abhängt. Für die praktische Anwendung werden für r_o Werte von etwa 10 fm vorgeschlagen. Wir wollen zunächst diskutieren, für welche Parameterwerte der Ansatz (5.36) sinnvoll ist. Der Ansatz des Coulombpotentials e^2/r_o ist nur dann korrekt, wenn die Zustände beider Teilchen so weit lokalisiert sind, daß sie nicht nennenswert überlappen, da andernfalls das effektive Potential reduziert würde. Darüberhinaus muß die Nullpunktsenergie der Zustände klein sein im Vergleich zum Coulomb-Term, da andernfalls ihr Beitrag zur Impulsänderung als zusätzlicher Term in die Relation mit aufgenommen werden müßte. Die erste Bedingung zwingt uns dazu, die Zustände auf Breiten von $\sigma_o < r_o/2$ zu lokalisieren, was zu der bekannten Nullpunktsenergie (5.1) führt. Wir berechnen, von welchem Abstand r_o an die Nullpunktsenergie den Wert des entsprechenden Coulombpotentials unterschreitet, und erhalten

$$r_o > \frac{3\hbar^2}{2me^2} \approx 290 \ \text{fm}\,. \tag{5.38}$$

Für r_o unterhalb dieses Wertes ist das „Toy-model“ nicht anwendbar, weil das System hier von der Nullpunktsenergie dominiert wird. Die daraus resultierende Dispersion erzeugt eine ungerichtete (diffusive) Impulskomponente, welche sich dem Coulomb bedingten Drifteffekt der Teilchen, repräsentiert durch den Term e^2/r_o, überlagert.

Zur Demonstration wurde eine Simulation durchgeführt, bei der die Dispersion abgeschaltet war. Die Teilchen wurden als Gauß-förmige Ladungswolken mit der fixen Breite von $\sigma = 1.8$ fm und der Ladung $Z = 1$ repräsentiert. Ohne Dispersion sind die Impulsraumzustände lokalisiert, so daß es keinen Überlapp und folglich auch keine Bose-Einstein Korrelation geben kann. Die ungestörte Korrelationsfunktion $\mathcal{C}_o$ ist daher identisch 1. Die übrigen Systemparameter wurden auf dieselben Werte gesetzt wie bei den anderen Simulationen ($R_s = 5$ fm und $T = 50$ MeV), insgesamt wurden 10^6 Paare erzeugt.

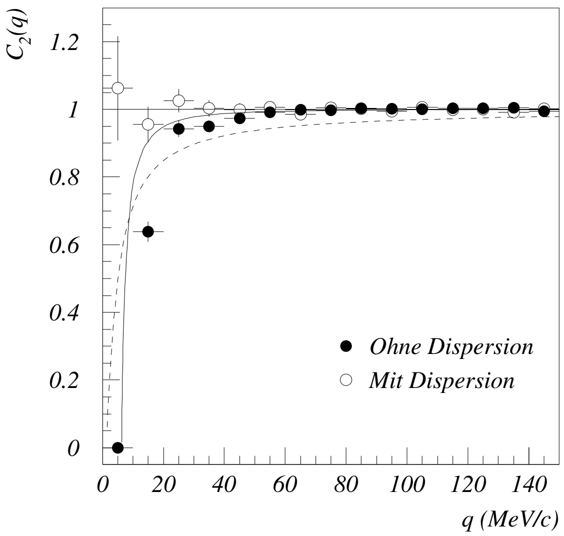

Abbildung 5.3: Korrelationsfunktion für (Gauß'sche) Ladungsverteilungen der Breite $\sigma = 1.8$ fm. Durchgezogene Kurve: „Toy-model" mit $r_o = 5$ fm, gestrichelte Kurve: Gamov Faktor.

Abbildung 5.3 zeigt die resultierende Korrelationsfunktion (volle Punkte) in guter Übereinstimmung mit der Vorhersage des „Toy-models" (5.37), dessen Parameter r_o auf den Wert des Quellenradius $R_s = 5$ fm gesetzt wurde. Diese Berechnung suggeriert, daß Impulsdifferenzen von $q < 40$ MeV/c aufgrund der Abstoßung beider Ladungen signifikant unterdrückt würden. Zum Vergleich wurde ferner der sog. Gamov Faktor eingezeichnet [43], den man aus der Berechnung der relativen Coulombwellenfunktion bei $q = 0$ erhält und der das Standard Korrekturverfahren der 80'er Jahre darstellte. Er gibt die Daten nur unzureichend wieder. Die Übereinstimmung des Simulationsergebnis mit dem „Toy-model" ist darauf zurückzuführen, daß die Teilchen während der Simulation überwiegend größere Abstände zueinander haben als das Zweifache ihrer Breite, so daß der Ansatz (5.36) gerechtfertigt ist. Die Situation ändert sich dramatisch, wenn man die Delokalisierung im Impulsraum einführt. Nach Faltung der Impulskoordinaten mit der Unschärfe $\sigma_p = \hbar/(2\sigma) = 55$ MeV/c und anschließender Neuberechnung der Korrelationsfunktion erhalten wir ein Resultat, das in der Abbildung als Kreise dargestellt wird. Die Coulomb-Unterdrückung ist nicht mehr vorhanden. Dies ändert sich auch für andere vernünftige Werte der Wellenpaketbreite ($1\,\mathrm{fm} < \sigma_o < 3\,\mathrm{fm}$) nicht. Wir können daraus schließen, daß die unterschiedlichen Resultate zwischen unserer quantenmechanischen Betrachtung und den üblicherweise verwendeten semiklassischen Ansätzen in der Berücksichtigung bzw. Vernachlässigung der Dispersion ihre Hauptursache finden. Es stellt sich vielleicht die Frage, ob es sich angesichts der großen Impulsunschärfe der Pionen in der Schwerionenphysik überhaupt lohnt, die Impulse mit einer Genauigkeit von ± 10 MeV/c zu messen. Die Antwort ist ein klares „Ja", denn durch Interferenz können wesentlich feinere Strukturen entstehen als die Breite eines Einteilchenzustands. Die Tatsache, daß die Bose-Einstein Erhöhung in der Korrelationsfunktion bei großen Quellenradien beliebig schmal werden kann, ist die Konsequenz eines solchen Interferenzeffekts.

5.8 Wie zuverlässig ist das Verfahren?

Die Lösung der Schrödingergleichung mittels einer Basisentwicklung gehört zu den Standardmethoden in der Quantenchemie, wenn auch in technisch raffinierteren Realisierungen [44, 45]. Im Vergleich zu den in anderen Problemen verwendeten Basissätzen erscheint die Anzahl der Funktionen in unserem Basissatz (= 4 bei der *sp*- Basis) außerordentlich klein, so daß man sich der Frage stellen muß, ob die Resultate in einem größeren Basissatz auch wirklich dieselben wären. Insbesondere könnte man argumentieren, daß der starke Abfall der Korrelationsfunktion bei kleinen Impulsdifferenzen, den die semiklassischen Modelle vorhersagen, derart steil ist, daß ein kleiner Basissatz zu steif sei, um eine solch scharfe Struktur erzeugen zu können. Mit anderen Worten: Das erwünschte Verhalten der Korrelationsfunktion liege nicht in dem von der Basis aufgespannten Lösungsraum.

Um diesen Verdacht zu entkräften, wurden Berechnungen an einem speziellen Testsystem durchgeführt. Dazu wurden beide Pionen mit Impulsdifferenz $|\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1| = 0$ und einem räumlichen Abstand von 3 fm initialisiert. Die initiale Breite der Wellenpakete betrug 1.8 fm. Die Wellenfunktion wurde solange propagiert, bis das Coulombpotential auf unter 5% des Anfangswertes abgefallen war. Daraufhin wurde die resultierende Wellenfunktion Fourier-transformiert und mittels Monte Carlo ein Ensemble von 10^6 Pion-Paaren erzeugt. Da jedes dieser Paare aus demselben Ereignis stammt, handelt es sich hier um ein reines quantenmechanisches Ensemble, d. h. der Mittelungsprozeß über die Phasenraumverteilung der Wellenpakete fällt weg und eventuell vorhandene Feinstrukturen in der Korrelationsfunktion sollten deutlicher sichtbar sein als in einem gemischten Ensemble[3]. Die Simulationen wurden jeweils mit $Z = 1$ und $Z = 5$ für unterschiedlich große Basissätze durchgeführt.

Die linke Seite von Abb. 5.4 zeigt die resultierenden Korrelationsfunktionen für $Z = 1$. Es sind keine signifikanten Abweichungen zwischen den Ergebnissen der unterschiedlichen Basissätze erkennbar. Dies ändert sich im Falle $Z = 5$ (rechts): Es treten systematisch unterschiedliche Resultate für die verschieden großen Basissätze auf. Dies beweist, daß die kleineren Basissätze nicht mehr flexibel genug sind, um die Verformungen durch das vergleichsweise starke Coulombpotential mitmachen zu können. Dies gilt auch für die Simulation in Abschnitt 5.7.2, so daß die Korrelationsfunktion bei $Z = 5$, die in einer *sp*- Basis ermittelt wurde, ungenau sein könnte. Man muß jedoch die vergleichsweise kleinen Abweichungen zwischen den einzelnen Basissätzen (rechte Seite in Abb. 5.4) in Relation sehen zu der großen Differenz, die der Übergang von $Z = 1$ zu $Z = 5$ hervorruft. Die Differenz zwischen dem *sp*- Resultat und dem *spdf*- Resultat ist im Vergleich dazu ein 10% Effekt. Da die Abweichungen zwischen den Korrelationsfunktionen verschiedener Ladungen im gemischten Ensemble (Abb. 5.2) wesentlich

[3] Im Gegensatz zu der vertrauten Korrelationsfunktion eines gemischten Ensembles ist diejenige eines reinen Zustands oszillierend. Bei der Mittelung über unterschiedliche Anfangsbedingungen kommt es bei kleinen Impulsdifferenzen zu einer positiven Interferenz, während sich die Oszillationen bei großen Impulsdifferenzen wegmitteln und auf diese Weise eine Korrelationsfunktion mit Gauß'scher Form entsteht

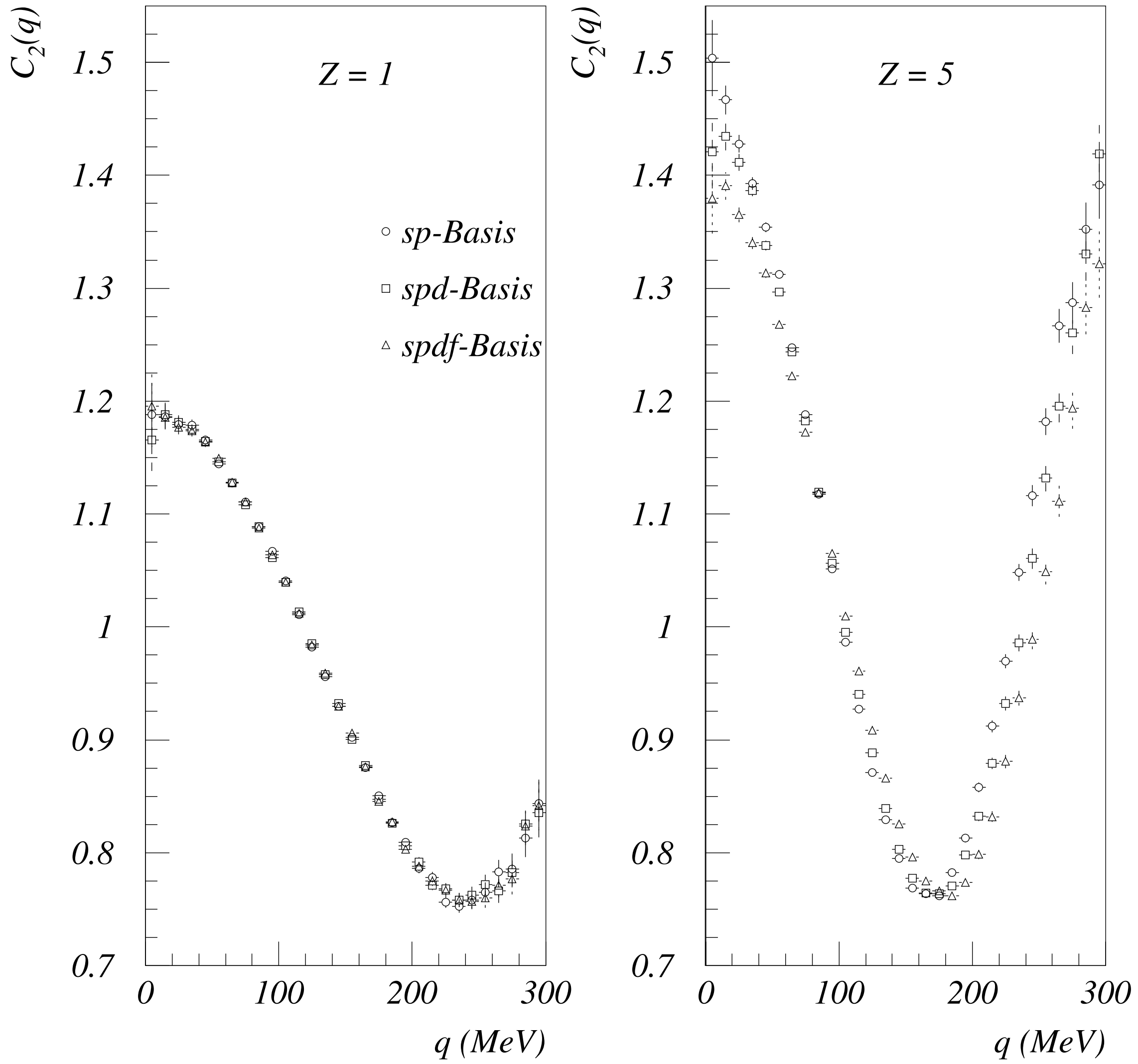

Abbildung 5.4: Korrelationsfunktionen für unterschiedliche Basissätze und den Ladungen $Z = 1$ (links) und $Z = 5$ (rechts). Die Teilchen entstammen einem reinen quantenmechanischen Ensemble, das durch die Präparation $|\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1| = 0$ MeV/c und $|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1| = 3$ fm sowie $\sigma_o = 1.8$ fm definiert wird.

kleiner sind, ist zu erwarten, daß eine Berechnung des $Z = 5$ - Systems in *spdf*- Basis nur geringe Unterschiede erzeugen würde.

Für den einzigen realistischen Fall mit $Z = 1$ stellt sich diese Frage nicht. Die Verwendung der *sp*- Basis scheint ausreichend genaue Resultate zu liefern. Insbesondere konnte auch mit dem größten Basissatz kein extremes Verhalten bei kleinen Impulsdifferenzen, wie es semiklassische Rechnungen vorhersagen, beobachtet werden.

Als letzter Test wurde eine Simulation mit *spd*- Basis (10 Basisfunktionen) und $Z = 1$ unter denselben Bedingungen wie in Abschnitt 5.7.2 durchgeführt. Die Anzahl der simulierten Ereignisse mußte wegen des erhöhten Rechenaufwands (etwa 3 Tage Realzeit pro 100 Ereignisse) auf unter 600 beschränkt bleiben. Aus jedem dieser Ereignisse wurden 5000 Paare mittels Monte Carlo Simulation extrahiert. Eine Abweichung von dem Resultat, das mit der *sp*- Basis gewonnen wurde, war nicht feststellbar.

5.9 Fazit

Zusammenfassend halten wir fest, daß die Pion-Pion Coulomb Wechselwirkung bei einer konsequent quantenmechanischen Behandlung keine Strukturen in der Korrelationsfunktion erzeugt. Dies steht im Widerspruch zu den Resultaten, welche man traditionsgemäß aus semiklassischen Modellen extrahiert. Als Ursache für die unterschiedlichen Ergebnisse wurde die Berücksichtigung bzw. Vernachlässigung der Dispersion ausgemacht. In Systemen mit Teilchen, deren Massen nur 140 MeV betragen, dominieren bei Abständen von wenigen 100 fm die Quantenpotentiale über die Coulombpotentiale. Die daraus resultierende Dispersion erzeugt eine diffusive Impulskomponente, die den Einfluß der gerichteten, aber kleinen Coulombkraft überdeckt. Der vorhergesagte Abfall der Korrelationsfunktion bei Impulsdifferenzen von $q < 30$ MeV/c existiert daher nicht. Die meisten der in den letzten Jahren publizierten Korrelationsdaten enthalten bereits eine „Coulombkorrektur“ und sind folglich im Bereich kleiner Impulsdifferenzen fehlerhaft. Diese Erfahrung lehrt, daß eine modellabhängige Korrektur von Meßdaten gefährlich ist und besser vermieden werden sollte. Coulombeffekte repräsentieren, wenn sie denn auftreten, eine Eigenschaft des physikalischen Systems und sollten daher nicht „korrigiert“ werden. Abgesehen von detektorspezifischen Korrekturen sollten Daten so publiziert werden, wie sie gemessen worden sind.

Kapitel 6

Coulomb-Wechselwirkung mit der zentralen Quelle

Neben der Coulomb-Wechselwirkung zwischen beiden Pionen wirkt noch eine weitere langreichweitige Kraft: Die Coulombkraft zwischen zentraler Quelle und den emittierten Pionen. Im Gegensatz zur Pion-Pion Wechselwirkung ist diese vom energetischen Standpunkt her nicht klein, wie die folgende Abschätzung zeigt: Bei einer zentralen Kollision zweier Goldkerne ist eine Ladung von $Z = 158$ in einem Feuerball mit etwa 9 fm rms-Radius konzentriert. Die Wechselwirkungsenergie dieses Feuerballs mit einer punktförmigen Einheitsladung an seiner Oberfläche beträgt $1.44 * 158/9$ MeV ≈ 25 MeV. Für kleinere Systeme erhalten wir geringere Energien, so beispielsweise für Ni+Ni ($Z = 56$, $R_{\text{rms}} \approx 6$ fm) eine Energie von ≈ 13 MeV. Obwohl die mittlere kinetische Energie der emittierten Pionen oberhalb von 100 MeV liegt, führt der Coulombeffekt zu deutlich meßbaren Verschiebungen in den Pionspektren [46]. Es stellt sich daher die Frage, ob, und, falls ja, in welcher Weise dies auch die Korrelationsspektren beeinflußt. Die Existenz dieses Effekts in der Korrelation liegt keineswegs auf der Hand, denn eine Verschiebung der Pionspektren wirkt sich sowohl auf die korrelierten Spektren als auch auf diejenigen Spektren aus, die später mittels Ereignismischung gewonnen werden, so daß sich der Effekt auf den ersten Blick auch wegheben könnte.

Eine Simulation dieses Coulombeffekts könnte prinzipiell mit derselben Methode erfolgen, die bereits im vorigen Abschnitt bei der Pion-Pion Wechselwirkung angewendet wurde. Da dieses Verfahren jedoch außerordentlich rechenintensiv und somit auf maximal Zweiteilchensysteme beschränkt bleibt, lohnt es sich, nach anderen Wegen Ausschau zu halten. Ausgangspunkt dafür ist eine Betrachtung der Größenverhältnisse in unserem System: In allen realistischen Systemen ist der initiale Durchmesser der Pion-Wellenfunktion deutlich kleiner als derjenige der Quelle. Dies hat zur Folge, daß das elektrostatische Feld der zentralen Quelle als näherungsweise homogen in dem Bereich, über den sich ein Pion-Wellenpaket erstreckt, approximiert werden könnte. In Wirklichkeit mag diese Näherung jedoch nicht sehr gut sein. Unser Verfahren sollte daher die Fähigkeit besitzen, kleinere Korrekturen in Richtung Inhomogenität einzuschließen. Eine solche Methode soll in diesem Kapitel entwickelt werden.

6.1 Lösung der Schrödingergleichung im homogenen Feld

Wir verwenden die (normierte) zeitabhängige Gauß-Funktion aus Gleichung (5.18),

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r},t) &= \sqrt{\mathcal{N}_{000}}\;\chi_{000}(\mathbf{r},t)\\ &= \left(2\pi\sigma^2(t)\right)^{-3/4}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{P}\cdot\mathbf{r}-\theta_{000}(t)\right)-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2}{4s(t)\sigma_\mathrm{o}}\right) \qquad (6.1)\\ &= \left(2\pi s^2(t)\right)^{-3/4}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{P}\cdot\mathbf{r}-\int_0^t E^{\mathrm{kin}}(\tau)\,d\tau\right)-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2}{4s(t)\sigma_\mathrm{o}}\right) \qquad (6.2)\end{aligned}$$

mit

$$s(t)=\sigma_o\left(1+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m\sigma_o^2}\right)\;, \qquad (6.3)$$

und zeigen, daß es sich bereits um die exakte Lösung im homogenen Feld handelt. Dazu müssen wir die Gültigkeit der Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\partial_t\,\psi(\mathbf{r},t) \qquad (6.4)$$

prüfen. Wir berechnen zunächst

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\left(\nabla\psi(\mathbf{r},t)\right) &= \nabla\cdot\left(\left(\frac{\mathrm{i}\mathbf{P}}{\hbar}-\frac{\mathbf{r}-\mathbf{R}}{2s\sigma_o}\right)\psi(\mathbf{r},t)\right) \qquad (6.5)\\ &= \left(\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2}{4s^2\sigma_o^2}-\frac{3}{2s\sigma_o}-\frac{P^2}{\hbar^2}-\frac{\mathrm{i}\mathbf{P}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})}{\hbar s\sigma_o}\right)\psi(\mathbf{r},t)\,. \qquad (6.6)\end{aligned}$$

Auf der anderen Seite berechnen wir

$$\partial_t\,\psi(\mathbf{r},t)=\left(\frac{-3\mathrm{i}\hbar}{4ms\sigma_o}+\frac{\mathrm{i}\dot{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}+\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})\cdot\dot{\mathbf{R}}}{2s\sigma_o}+\frac{\mathrm{i}\hbar(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2}{8ms^2\sigma_o^2}\right)\;. \qquad (6.7)$$

Wenn wir $E = P^2/(2m)$ und $\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{P}/m$ setzen, dann erhalten wir aus der Schrödingergleichung (6.4) nach Einsetzen der Ausdrücke (6.6) und (6.7)

$$V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r},t)=-\dot{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{r}\,\psi(\mathbf{r},t)\,. \qquad (6.8)$$

Nun gilt für ein homogenes Feld jedoch $V(\mathbf{r}) = \kappa\hat{e}\cdot\mathbf{r}$, wobei $\hat{e}$ ein Einheitsvektor ist, der in die Richtung der Feldlinien zeigt. Mit der Definition $\dot{\mathbf{P}} \equiv -\nabla V(\mathbf{r}) = -\kappa\hat{e}$ wird folglich die Schrödingergleichung gelöst.

Im Lichte der Basisentwicklung, die wir im vorigen Kapitel benutzt haben, können wir dieses Resultat leicht interpretieren: Im homogenen Feld wird das Wellenpaket als ganze Einheit beschleunigt, seine Form verändert sich dabei jedoch nicht. Es ist daher möglich, den gesamten Einfluß des Potentials in eine Zeitabhängigkeit des Impulses $\mathbf{P}(t)$

zu transformieren. Gemeinsam mit der intrinsischen Zeitabhängigkeit des Zustands, die bereits aus der Lösung der freien Schrödingergleichung stammt, kann auf eine Anregung höherer Basisfunktionen verzichtet werden.

Im Falle unseres Pionsystems bleibt angesichts dieser Näherung ein ungutes Gefühl: Zwar ist der Durchmesser der Pionquelle typischerweise um den Faktor 3 größer als der Durchmesser des Pions bei seiner Initialisierung; dennoch werden einige der Pionen weit im Innern der Quelle erzeugt, wo das Feld nicht mehr näherungsweise homogen ist. Ferner gibt es die Dispersion, die dafür sorgt, daß insbesondere die langsameren Pionen ein beträchtliches Volumen in der Nähe der Quelle annehmen können. Es sollte daher eine Korrektur in der Phasenraumverteilung der Pionen durchgeführt werden, falls möglich, ohne auf den sehr aufwendigen Formalismus von Kapitel 5 zurückgreifen zu müssen. Die Korrektur könnte folgendermaßen aussehen: Da jedes Wellenpaket ein gewisses Volumen einnimmt und ein Ensemble von Einteilchensystemen repräsentiert, gibt es unter den Repräsentanten des Ensembles solche, die sich bei der Initialisierung näher am Zentrum der Quelle befinden und solche, die weiter entfernt sind. Da die ersteren eine stärkere Coulombkraft erfahren, sollten sie auch stärker beschleunigt werden. Effektiv würde dies zu einer veränderten Form des Wellenpakets führen.

Der Standardformalismus der Quantenmechanik sieht jedoch leider keine physikalische Beschreibung einzelner Repräsentanten vor: Die Schrödingergleichung liefert lediglich die Zeitentwicklung der Amplitude des gesamten Ensembles. Einzelne Realisierungen erhält man erst im Verlauf eines schematisierten sog. *Meßprozesses*, der nicht der Dynamik der Schrödingergleichung unterworfen ist. In den früheren Kapiteln dieser Arbeit wurde der Meßprozess mit Hilfe des Monte Carlo - „Würfelns“ der Ereignisse aus den vorgegebenen Dichteverteilungen simuliert. Auf diesen Prozeß können wir jetzt nicht mehr zurückgreifen, denn wir benötigen die Phasenraumkoordinaten der Repräsentanten bereits zu Beginn der Zeitentwicklung und sind auf eine stetige Zeitpropagation angewiesen, um den Einfluß des Coulombfeldes und die Korrektur der Inhomogenität simulieren zu können, *ohne* auf einen analytischen Ausdruck des (sehr komplizierten) Zustandsvektors Bezug nehmen zu müssen. Von D. Bohm [47, 48] wurde zu Beginn der 50'er Jahre ein konsistenter Formalismus aufgestellt, der die zeitabhängige Behandlung einzelner Repräsentanten quantenmechanischer Ensemble erlaubt.

6.2 Bohm's Quantentheorie der Bewegung

6.2.1 Der Formalismus

Bohm's Ansatz besteht aus einem formalen Umschreiben der Schrödingergleichung und einem zusätzlichen Postulat, das die Standardinterpretation der Quantenmechanik nicht verwendet. Wir beginnen mit einem Einteilchensystem. Zunächst wird die Wellenfunktion geschrieben als

$$\Psi = R\, e^{iS/\hbar} \,, \tag{6.9}$$

woraus also folgt

$$R = (\Psi^* \Psi)^{\frac{1}{2}} \,, \tag{6.10}$$

$$S = \frac{\hbar}{2i} \log \left(\frac{\Psi}{\Psi^*} \right) \,. \tag{6.11}$$

Setzt man dies in die Schrödingergleichung ein, so erhält man eine Gleichung, die sich in einen Realteil,

$$0 = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + Q \tag{6.12}$$

mit

$$Q(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2 R}{2mR} \,, \tag{6.13}$$

und einen Imaginärteil,

$$0 = \frac{\partial R^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{R^2 \nabla S}{m} \right) \,, \tag{6.14}$$

aufspalten läßt. Wir haben es jetzt mit zwei gekoppelten partiellen Differentialgleichungen zu tun: Glng. (6.14) ist von der Form einer Kontinuitätsgleichung und gewährleistet die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit bzw. der Teilchenzahl. Glng. (6.12) jedoch beinhaltet ein Bewegungsgesetz. Zu einer Bewegungsgleichung im Sinne der klassischen Mechanik gelangt man über einen Schritt, der den Rahmen des quantenmechanischen Standardformalismus sprengt: Die Größe $(1/m)\nabla S$ ist ein Vektorfeld mit der Einheit einer Geschwindigkeit und kann daher als ein *Geschwindigkeitsfeld* aufgefaßt werden. Das Feld $(1/m)\nabla S$ repräsentiert eine Schar von Feldlinien, auf denen sich potentiell reale Partikel gemäß der Gleichung

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}(t)} = (1/m)\nabla S|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}(t)} \tag{6.15}$$

bewegen können. Anstatt jedoch die gesamte Schar (im Sinne eines Wahrscheinlichkeitstromes) als Repräsentation des quantenmechanischen Ensembles aufzufassen, geht man weiter, indem man behauptet, daß in einer konkreten Realisierung des Experiments genau ein lokalisiertes Teilchen existiert. Dessen Trajektorie $\mathbf{r}(t)$ erhält man durch Integration des Geschwindigkeitsfeldes nach Vorgabe der Anfangsposition $\mathbf{r}_0$. Letztere ist durch die Dichteverteilung der Wellenfunktion vorgegeben und kann nicht experimentell präpariert werden.

Die Bewegungsgleichung (6.12) läßt sich auch in eine Newton'sche Form überführen, indem man den Gradienten darauf anwendet:

$$\partial_t(\nabla S) + \frac{\nabla S \cdot \nabla}{m} \nabla S = -\nabla(V + Q) \,, \tag{6.16}$$

dann die Relation

$$d/dt = \partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \tag{6.17}$$

benutzt und schließlich die Identifikation (6.15) macht. Das Resultat ist die Bewegungsgleichung

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -\nabla(V+Q)\,, \tag{6.18}$$

die der klassischen Bewegungsgleichung ähnlich ist. Der Unterschied besteht in dem Auftreten des Terms Q als „zusätzliches Potential", auch *Quantenpotential* genannt. Um die Trajektorie des Teilchens zu erhalten, kann man entweder (6.15) oder (6.18) nach Vorgabe der Anfangsposition lösen.

Die Verallgemeinerung auf ein Mehrteilchensystem ist einfach; so erhält man den Real- und Imaginärteil der Schrödingergleichung zu

$$0 = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \frac{(\nabla_i S)^2}{2m_i} + V + Q \tag{6.19}$$

mit

$$Q = \sum_{i=1}^{n} -\frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{\nabla_i^2 R}{R}\,, \tag{6.20}$$

sowie

$$0 = \frac{\partial R^2}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \nabla_i \cdot \left(\frac{R^2\nabla_i S}{m_i}\right)\,. \tag{6.21}$$

Die Newton'sche Form der Bewegungsgleichung lautet dann

$$m_i\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = -\nabla_i(V+Q)\,, \tag{6.22}$$

für die Geschwindigkeiten gilt ferner

$$\mathbf{v}_j(t)|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j(t)} = (1/m)\nabla_j S|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j(t)}\,. \tag{6.23}$$

6.2.2 Beispiel: Testteilchen im Wellenpaket

Das ungewohnte Konzept eines lokalisierten Testteilchens, welches sich auf einer Trajektorie bewegt, wirft verständlicherweise Fragen auf:

1. Gilt weiterhin die Heisenberg'sche Unschärferelation?

2. Wie ist der Meßprozeß definiert?

3. Führt der Formalismus zu beobachtbaren Phänomenen, die in der Standard Quantenmechanik nicht enthalten sind?

Diese Fragen wurden von Bohm in voller Allgemeinheit untersucht [11, 47, 48]. Hier sollen die neuen Konzepte lediglich an einem einfachen Beispiel, das unserer Anwendung nahesteht, demonstriert werden. Das Gauß'sche Wellenpaket (6.2) kann man gemäß (6.9) zerlegen in

$$R(\mathbf{r},t) = (2\pi\sigma^2)^{-3/4} e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2/(4\sigma^2)} \tag{6.24}$$

und

$$S(\mathbf{r},t) = -\frac{3\hbar}{2}\tan^{-1}\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2}\right) + \mathbf{P}\cdot\mathbf{r} - Et + \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2\hbar^2 t}{8m\sigma_0^2\sigma^2} \ . \tag{6.25}$$

Damit erhalten wir

$$\nabla S = \mathbf{P} + \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})\,\hbar^2 t}{4m\sigma_0^2\sigma^2} \tag{6.26}$$

und für die Geschwindigkeit

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{P}}{m} + \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})\,\hbar^2 t}{4m^2\sigma_0^2\sigma^2} \ . \tag{6.27}$$

Zur Erinnerung: $\mathbf{P}/m$ ist die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets und $\mathbf{v}(\mathrm{t})$ die des Testteilchens. Die Gleichung läßt sich analytisch integrieren und ergibt als Trajektorie

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}(t) + \mathbf{r}_0\left[1 + (\hbar t/(2m\sigma_o^2))^2\right]^{1/2} \ . \tag{6.28}$$

Der erste Term repräsentiert die Bewegung des Wellenpakets als Ganzes, der zweite ist eine Folge der Dispersion. Falls $\mathbf{r}_0 = 0$, das Teilchen sich bei der Initialisierung also im Zentrum des Wellenpakets befindet, verschwindet der zweite Term und das Teilchen bewegt sich auf einer klassischen Trajektorie. Dies ist das Ehrenfest'sche Theorem. Andernfalls tritt eine zusätzliche Bewegungskomponente auf, die wir als Resultat einer neuen Kraft interpretieren können. Das entsprechende (Quanten-) Potential berechnet sich zu

$$Q = \frac{\hbar^2}{4m\sigma^2}\left(3 - \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2}{2\sigma^2}\right) \ , \tag{6.29}$$

dessen Gradient die Quantenkraft

$$\mathbf{F} = \frac{\hbar^2(\mathbf{r}-\mathbf{R})}{4m\sigma^4} \tag{6.30}$$

ergibt, die vom Zentrum des Wellenpakets wegzeigt. Da die Breite σ für große t proportional zu t wird (2.11), verschwindet die Quantenkraft schnell und das Testteilchen bewegt sich schließlich auf einer klassischen Trajektorie, wenn auch in eine andere Richtung als das Wellenpaketzentrum. Die zusätzlich erworbene Bewegungskomponente ist die Dispersion. Die Konsistenz des Formalismus mit der Ensembleinterpretation der Quantenmechanik prüfen wir, indem wir eine große Anzahl identisch präparierter Zustände betrachten. Konkret heißt das: Wir betrachten eine große Anzahl von Wellenpaketen, welche identische Anfangsbreiten σ_o besitzen und für die gilt: $\mathbf{P}_i(t) = \mathbf{P}(t)$ und $\mathbf{R}_i(t) = \mathbf{R}(t)$ für alle Mitglieder des Ensembles. Die Anfangskoordinaten $\mathbf{r}_i(0)$ der Testteilchen müssen laut Vorschrift aus der Dichteverteilung $|\psi(\mathbf{r},0)|^2$ (2.7) ausgewürfelt werden, die Anfangsimpulse $\mathbf{p}_i(0)$ sind durch (6.27) festgelegt und identisch mit dem des Zentrums $\mathbf{P}$. Der Einfachheit halber setzen wir uns in das Schwerpunktsystem des Wellenpakets und berechnen die statistische Verteilung der Testteilchen für eine beliebige Koordinatenrichtung, z. B. die x- Koordinate. Sei $x(t)$ also die x-Komponente aus (6.28), dann erhalten wir

$$\begin{aligned}\langle x^2(t)\rangle^{1/2} &= \left(\int x_o^2(t)\,(2\pi\sigma_o^2)^{-1/2}\exp\left(-\frac{x_o^2}{2\sigma_o^2}\right)\,dx_o\right)^{1/2} = \sigma_o\left[1+(\hbar t/(2m\sigma_o^2))^2\right]^{1/2} \\ &= \sigma(t)\,, \end{aligned} \tag{6.31}$$

d. h. eine zeitabhängige Breite der Verteilung, die mit der Breite des zeitabhängigen Wellenpakets (2.11) übereinstimmt. Im Ortsraum ist die Unschärferelation also erfüllt. Auf ähnliche Weise können wir auch die Energie ermitteln, mit der das Quantenpotential zur Gesamtenergie des Ensembles beiträgt. Dazu berechnen wir das mittlere Quantenpotential

$$\langle Q(t=0)\rangle = \int Q(\mathbf{r},0)\,|\psi(\mathbf{r},0)|^2\,d^3\mathbf{r} = \frac{3\hbar^2}{8m\sigma_o^2}\,, \tag{6.32}$$

und ein Vergleich mit Glng. (3.9) ergibt

$$\langle Q\rangle = \frac{3}{2}\,T_q\,. \tag{6.33}$$

Dies bedeutet, daß das Quantenpotential, in dem sich das einzelne Testteilchen bewegt, den quantenmechanischen Beitrag der Temperatur im Ensemblebild liefert, d. h. für die Nullpunktsenergie des Systems steht. Folglich ist die Unschärferelation auch im Impulsraum erfüllt.

Zusammenfassend können wir folgende Interpretation des Bohm'schen Formalismus festhalten: Obwohl jedes einzelne Testteilchen einer definierten Trajektorie folgt, genügt ein Ortsraumensemble solcher Testteilchen, das man aus identisch präparierten Zuständen gewinnt, den statistischen Eigenschaften des Standardformalismus der Quantenmechanik, einschließlich der Heisenberg'schen Unschärfe. Ursache dafür ist einerseits die Initialisierung der Systeme unter Zuhilfenahme eines Zufallsmechanismus und andererseits der Einfluß der Quantenkräfte. Zu jedem Zeitpunkt besitzt ein Testteilchen einen Ort, der mit dem Resultat eines (potentiell durchführbaren) Experiments übereinstimmt. Ein zusätzlicher Formalismus für den Meßprozeß im Ortsraum wird daher nicht benötigt.

6.2.3 Was ist ein Impulsraumzustand?

Dem aufmerksamen Leser des vorigen Abschnitts wird ein Faktum nicht entgangen sein: Zum Zeitpunkt der Initialisierung hat jedes Testteilchen den selben Impuls $\mathbf{p}_o = \mathbf{P}$, einen Wert, den man im Experiment nicht erwarten würde. Im Formalismus der Quantenmechanik wird festgelegt, wie man die Wahrscheinlichkeitsdichte eines Impulsraumzustands erhält: Eine Fouriertransformation der Ortsraumfunktion $\Psi(\mathbf{r},t)$ liefert die Impulsraumfunktion $\Phi(\mathbf{p},t)$, deren Betragsquadrat die gesuchte Dichte im Impulsraum darstellt.

Diesen Punkt müssen wir genauer analysieren. Dazu beschränken wir uns zunächst wieder auf das Beispiel eines einzelnen Wellenpakets der initialen Breite σ_o. Wegen der Dispersion ist die Breite $\sigma(t)$ im Ortsraum zeitabhängig, im Impulsraum jedoch nicht, denn hier gilt $\sigma_p = \hbar/(2\sigma_o)$ (2.5). Um dagegen zu sehen, wie sich $\sigma(t)$ zeitlich ändert, berechnen wir

$$m\frac{d}{dt}\sigma(t) = m\frac{d}{dt}\sigma_o\sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\right)^2} = \sigma_p\left[1+\left(\frac{2m\sigma_o^2}{\hbar t}\right)^2\right]^{-1/2} . \qquad (6.34)$$

Hier scheint es endgültig zu einem Widerspruch zu kommen, denn man sollte naiverweise erwarten, daß $m\,d\sigma/(dt)$ mit der Breite des Ensembles im Impulsraum übereinstimmt, stattdessen ist sie aber zeitabhängig! Wir erkennen auch, daß sich der Ausdruck (6.34) im Limes $t \to \infty$ dem Wert σ_p asymptotisch nähert. Eine Aufklärung erfordert die Analyse des Meßprozesses.

Wir benötigen für eine Impulsmessung mindestens zwei Ortsmessungen. Obwohl wir den Ort eines Teilchens beliebig genau bestimmen können, führt diese Messung zu einer Störung des Impulses, was unsere Impulsmessung ungenau macht. Der Ausweg besteht darin, daß man den Ort nur ungenau bestimmt und dafür sehr weite Flugwege benutzt, um aus der Flugzeit über eine große Distanz den Impuls zu bestimmen. Kurz gesagt: Impulsmessungen sind makroskopische Prozesse, weil es keine Möglichkeit einer instantanen Impulsmessung gibt. Bei der Propagation über große Distanzen ist das System jedoch bereits relaxiert, d. h. der oben erwähnte Limes ist erreicht und die gemessenen Impulse stimmen mit denen überein, die der Impulsraumzustand vorschreibt. In Bohm's Bild bedeutet dies, daß die Testteilchen längst das Quantenpotential durchlaufen haben, bevor man ihren Impuls experimentell erfassen kann.

In einem Mehrteilchensystem kommt ein analoger Effekt bei den Korrelationen zum Tragen: Wir können zwei Wellenpakete so im Ortsraum initialisieren, daß sie nicht überlappen, d. h. effektiv faktorisieren. Betrachtet man nach Fouriertransformation den zugehörigen Impulsraumzustand, so kann hier ohne weiteres ein Überlapp und somit eine Korrelation vorhanden sein. Die Frage ist erneut: Wie können zwei Pionen, die zu einem bestimmten Zeitpunkt voneinander separiert entstehen, im selben Augenblick bereits miteinander (Impuls-) korreliert sein? Gehen wir stattdessen davon aus, daß die Impulsmessung ein makroskopischer Vorgang ist, so klärt sich das Problem von selbst: Während der Messung haben die Wellenpakete genug Zeit, zu dispergieren und miteinander zu überlappen. Bohm's Formalismus zeigt, wie gleichzeitig mit dem Überlapp im Ortsraum zusätzliche Kräfte auf die Testteilchen wirken, die im Laufe der Zeit zu den Korrelationen im Impulsraum führen.

Unsere Beispiele legen einen Verdacht nahe: Für stark lokalisierte Systeme, d. h. Systeme, die nicht relaxiert sind und in denen die Nullpunktenergie nicht vernachlässigbar ist, ist der Impulsraumzustand keine wohldefinierte Größe. Der Ausdruck $\Phi(\mathbf{p}, t = 0)$ macht keinen Sinn, weil dieser Zustand nicht meßbar ist, denn jede Impulsmessung erfordert einen Flugweg und eine entsprechende Flugzeit. Es existiert stattdessen ein „wahrer“ Impulsraumzustand $\Phi^w(\mathbf{p}, t)$, der aus der zeitlichen Änderung des Ortsraum-zustands bestimmt werden muß und für den gilt:

$$\Phi^w(\mathbf{p},t) \stackrel{t\to\infty}{\longrightarrow} \Phi(\mathbf{p}) \,. \tag{6.35}$$

Um $\Phi^w(\mathbf{p},t)$ zu erhalten, muß man auf den Ortsraumzustand zurückgreifen, was bedeutet, daß die Quantenmechanik offenbar nicht so symmetrisch in Orts- und Impulsraum ist, wie die Lehrbücher vorgeben. Der Ortsraumzustand ist fundamentaler, denn er enthält mehr Information als der Impulsraumzustand, der nur asymptotisch korrekt ist.

Bemerkenswert ist, daß sich der scheinbare Widerspruch, den der Unterschied zwischen $\Phi^w(\mathbf{p},t)$ und $\Phi(\mathbf{p})$ hervorruft, im Falle des 1- Teilchen Zustands mit einem klassischen Modell noch auflösen läßt. Dieses wurde in Abschnitt 2.2 diskutiert. Wir konnten dort ein Ensemble konstruieren, dessen Impulsverteilung stationär und dessen räumliche Expansionsgeschwindigkeit dennoch zeitabhängig war. Ebenso bemerkenswert ist, daß eine ähnliche Vorgehensweise in einem Mehrteilchensystem nicht mehr möglich zu sein scheint. Die zusätzliche Superauswahlregel, die dem System eine Permutationssymmetrie aufzwingt, verhindert die Anwendbarkeit klassischer Bewegungsmodelle auf Systeme identischer Teilchen: Stets treten im Ortsraum zusätzliche Quantenkräfte auf, die auch in ein wechselwirkungsfreies Ensemble eine Beschleunigung induzieren, so daß sich die Frage nach der Stationarität des Impulsraumzustands erneut stellt.

Es stellt sich aber auch die Frage, wie akademisch solch eine Diskussion ist: Da jeder Impulsraumzustand nur asymptotisch meßbar ist, macht es dann überhaupt einen Sinn, zwischen einer „wahren“ und einer asymptotischen Impulsraumverteilung zu unterscheiden? Im Falle von Systemen ohne Wechselwirkung ist diese Unterscheidung in der Tat sinnlos. Wir werden in Abschnitt 6.4.2 jedoch erkennen, daß die Korrelationssignale im Coulombfeld falsch berechnet werden, falls man als Ausgangszustand $\Phi(\mathbf{p},t=0)$ anstelle von $\Phi^w(\mathbf{p},t=0)$ verwendet.

6.3 Das Molekulardynamik - Verfahren

Gegeben ist ein System aus N Teilchen mit Anfangsbedingungen und Kräften. Gesucht ist die Phasenraumbelegung der Teilchen zu einem späteren Zeitpunkt. Es handelt sich um einen typischen Vertreter einer Klasse von Problemen, zu deren Lösung ein Molekulardynamik Verfahren herangezogen werden kann. Kern eines solchen Verfahrens ist der sogenannte *Integrator*, der die Entwicklung des Systems von einem Zeitschritt zum nächsten definiert ([26], s. 276). Der simpelste Integrator ist der Euler'sche

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{x}_n + \Delta t\,\mathbf{v}_n + \frac{1}{2}(\Delta t)^2\mathbf{F}_n \,, \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + \Delta t\,\mathbf{F}_n \,,\end{aligned} \tag{6.36}$$

der eine Taylor-Entwicklung bis zur 2. Ordnung des Zeitschritts Δt darstellt und im Vergleich zu Integratoren höherer Ordnung bei gleichen Schrittweiten als relativ ungenau und instabil gilt. Besser ist der Verlet Integrator [49]

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{n+1} &= 2\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1} + (\Delta t)^2 \mathbf{F}_n \ , \\ \mathbf{v}_n &= \frac{\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_{n-1}}{2\Delta t} \ , \end{aligned} \tag{6.37}$$

von dem man zeigen kann, daß er die Dynamik bis zur dritten Ordnung in Δt korrekt entwickelt.

Die Quantenkräfte könnten wir durch Ableitung des Potentials (6.20) gewinnen, einfacher ist es jedoch, die Geschwindigkeiten der Testteilchen aus der Phase der n-Teilchen Wellenfunktion zu berechnen: Aus (6.23) erhält man durch Umformung

$$\mathbf{v}_j(t) = \frac{\hbar}{m\,|\Psi|^2}\, Im\left\{\Psi^* \nabla_j \Psi\right\} \ . \tag{6.38}$$

Die n- Teilchen Wellenfunktion ist die Permanente

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) = per(\mathcal{A}) = \sum_\sigma \psi_{\sigma(1)}(\mathbf{x}_1) \cdot \psi_{\sigma(2)}(\mathbf{x}_2) \cdots \psi_{\sigma(n)}(\mathbf{x}_n) \tag{6.39}$$

der Matrix

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}_1) & \psi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \psi_1(\mathbf{x}_n) \\ \psi_2(\mathbf{x}_1) & \psi_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & \psi_2(\mathbf{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n(\mathbf{x}_1) & \psi_n(\mathbf{x}_2) & \cdots & \psi_n(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix} \tag{6.40}$$

mit den Einteilchenfunktionen $\psi_i(\mathbf{x}_j)$ gemäß (6.2), wobei der Index i sich wiederum auf die Phasenraumkoordinaten des Schwerpunkts bezieht. Den Gradienten einer Permanente berechnet man auf folgende Weise:

$$\begin{aligned} \nabla_k \Psi &= \nabla_k \left(\sum_\sigma \psi_{\sigma(1)}(\mathbf{x}_1)\, \psi_{\sigma(2)}(\mathbf{x}_2) \cdots \psi_{\sigma(n)}(\mathbf{x}_n) \right) \\ &= \sum_\sigma \nabla_k(\psi_{\sigma(k)}(\mathbf{x}_k))\, \psi_{\sigma(1)}(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_{\sigma(k-1)}(\mathbf{x}_{k-1}) \\ &\qquad \times \psi_{\sigma(k+1)}(\mathbf{x}_{k+1}) \cdots \psi_{\sigma(n)}(\mathbf{x}_n) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \nabla_k(\psi_i(\mathbf{x}_k)) \Bigg(\sum_{\sigma \neq i} \psi_{\sigma(1)}(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_{\sigma(k-1)}(\mathbf{x}_{k-1}) \\ &\qquad \times \psi_{\sigma(k+1)}(\mathbf{x}_{k+1}) \cdots \psi_{\sigma(n)}(\mathbf{x}_n) \Bigg) \\ &\equiv \sum_{i=1}^{n} \nabla_k(\psi_i(\mathbf{x}_k))\, \Psi^{(i,k)}(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) \ , \end{aligned} \tag{6.41}$$

wobei $\Psi^{(i,k)}(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n)$ die Permanente einer Matrix bezeichnet, deren i'te Zeile und k'te Spalte gestrichen worden sind. Der Gradient einer Permanente ist folglich eine Summe von Permanenten der Untermatrizen, gewichtet mit den Gradienten der jeweils

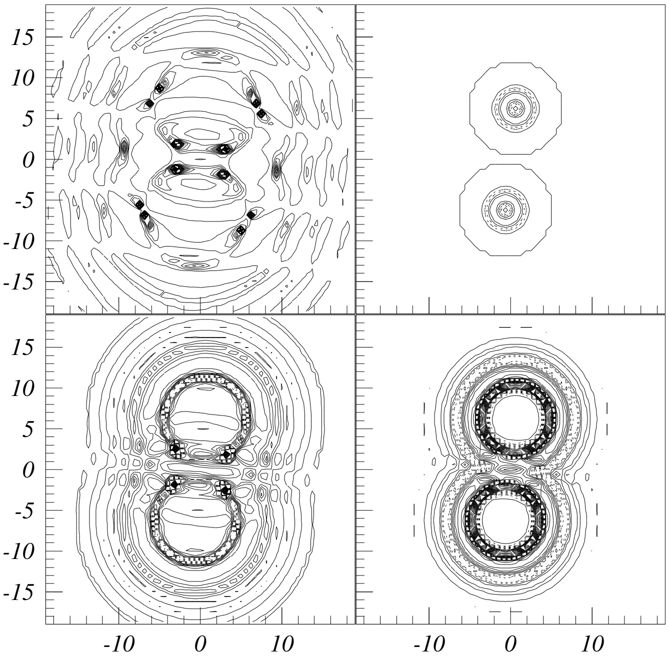

Abbildung 6.1: Das Quantenpotential zweier Wellenpakete zu den Zeitpunkten t = 0 fm/c (oben rechts), t = 10 fm/c, t = 15 fm/c und t = 25 fm/c (im Urzeigersinn fortfahrend)

gestrichenen Einteilchenfunktionen. Die Berechnung der Permanenten erfolgt wiederum mit dem Code, der in [24] beschrieben wird. Schließlich erhält man die Quantenkräfte auf numerischem Wege aus den Änderungen der Geschwindigkeiten im Verlauf eines infinitesimalen Zeitschritts.

Um einen Eindruck zu bekommen, wurden die Quantenpotentiale der Mehrteilchensysteme berechnet und analysiert. Die Berechnung der Glng. (6.20) erfolgt mittels der Relationen

$$\nabla_k R = \nabla_k \left(\sqrt{\Psi^*\Psi}\right) = \frac{1}{2R}\left(\Psi^*\nabla_k\Psi + \Psi\nabla_k\Psi^*\right) \tag{6.42}$$

und

$$\begin{aligned}\nabla_k^2 R = \frac{1}{2R}\Big[&\nabla_k^2\Psi\,\Psi^* + \nabla_k\Psi\,\nabla_k\Psi^* + \nabla_k^2\Psi^*\,\Psi \\ &- \frac{1}{2R^2}\left\{\left(\nabla_k\Psi\right)^2\Psi^{*2} + \Psi^2\left(\nabla_k\Psi^*\right)^2\right\}\Big] \ .\end{aligned} \tag{6.43}$$

Die zweiten Ableitungen der Permanenten erhält man sofort zu

$$\nabla_k^2\Psi(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N) = \sum_{i=1}^{N}\nabla_k^2(\psi_i(\mathbf{x}_k))\Psi^{(i,k)}(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N) \ , \tag{6.44}$$

und die der Einteilchenfunktionen wurden bereits in Glng. (6.6) hergeleitet.

Als Beispiel wurde in Abb. 6.1 das Quantenpotential zweier Wellenpakete visualisiert. Beide Wellenpakete waren auf der xy- Ebene fixiert, so daß die Dynamik des Systems lediglich in der Dispersion bestand. Die Bilder wurden mit Hilfe eines Tricks berechnet: Eigentlich ist das Quantenpotential ein hochdimensionales Gebilde, das sich nicht in 2 Dimensionen darstellen läßt. Zur numerischen Berechnung wurden die Testteilchen beider Zustände im Zentrum der Wellenpakete initialisiert und ein drittes Wellenpaket (mit ebenfalls zentriertem Testteilchen) zum Abtasten der Ebene verwendet. Der jeweilige Wert des resultierenden (3-Teilchen) Quantenpotentials wurde aufgezeichnet. Die Figuren in Abb. 6.1 zeigen also eher, welches Quantenpotential ein drittes Teilchen „fühlen" würde, falls es an der jeweiligen Stelle plaziert würde. Die Skala ist in fm Einheiten geteilt, die initiale Breite der Wellenpakete betrug $\sigma_o = 2$ fm. Zu Beginn sind die Zustände lokalisiert, im Verlauf der Zeitentwicklung jedoch beginnen sie zu überlappen, eine Folge der Dispersion. Die Interferenzen führen zu einem sehr irregulären Verhalten des Potentials und damit auch der Kräfte, welche die Korrelationen der Testteilchen untereinander induzieren. Mit zunehmender Breite der Zustände dünnen die Potentiale mehr und mehr aus und die Bewegung der Testteilchen nähert sich zunehmend den klassischen Bewegungsgesetzen, d. h. im Falle des wechselwirkungsfreien Systems laufen sie schließlich auf geradlinigen Trajektorien. Ihre Impulskorrelationen behalten sie jedoch bei; diese werden später im Detektor, in makroskopischen Distanzen von der Quelle, nachgewiesen.

Die Gegenwart solch unregelmäßiger Kräfte verursacht eine Reihe numerischer Probleme, denen man mit kleinen Schrittweiten begegnen muß. Der Algorithmus ist daher nur für kleine Systeme geeignet: Die Integration eines 5- Teilchen Systems benötigt im Schnitt 3 Sekunden, eines 10- Teilchen Systems dagegen schon 15 Minuten (Werte erzielt auf einem PC mit PPro 200 Prozessor). In Testsimulationen führten der Verlet- (6.37) und der Euler- Integrator (6.36) bei hinreichend kleinen Schrittweiten zu identischen Resultaten. Die Tatsache, daß das Verlet Verfahren eine konstante Schrittweite verlangt, hat sich jedoch als Nachteil erwiesen. Treten zu Beginn der Propagation noch sehr starke Kräfte auf (bis zu einigen 100 MeV/fm), lassen diese schnell nach und in späteren Phasen kann mit wesentlich größeren Schrittweiten gerechnet werden. Es stellte sich schließlich heraus, daß der Euler Algorithmus, obwohl intrinsisch ungenauer als der Verlet Algorithmus, wegen seiner Flexibilität in der Wahl des Zeitschrittes das geeignetere Verfahren ist. Der Zeitschritt wird zu jedem Zeitpunkt neu bestimmt, in einer Weise, daß die maximale Energieänderung eines Pions während des Zeitschritts einen Wert von 0.1 MeV nicht überschreitet.

Das Hinzufügen des klassischen Coulomb Potentials erfolgt nun trivial: Als Bewegungsgleichung der Wellenpakete erhalten wir

$$m_i \frac{d^2\mathbf{R}_i}{dt^2} = -\nabla_i V(\mathbf{R}_i) \;, \tag{6.45}$$

für die Testteilchen gilt

$$m_i \frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = -\nabla_i (V + Q) \;. \tag{6.46}$$

Hier handelt es sich um eine Näherung: In Wirklichkeit ändert sich mit Auftreten zusätzlicher Kräfte die Amplitude der Wellenfunktion, und somit auch das Quantenpotential Q, das folglich in eine funktionale Abhängigkeit von V gerät. In Abschnitt 6.1 haben wir jedoch den Fall betrachtet, in dem dieser Ansatz exakt ist: Falls das Feld homogen ist (zumindest in einem Bereich, der der Dimension des Wellenpakets entspricht), bleibt das Quantenpotential unabhängig vom äußeren Feld, da sich die Form des Wellenpakets nicht ändert. Die Bewegungsgleichung (6.46) enthält jedoch bereits die erste Korrektur in Richtung Inhomogenität: Jedes einzelne Testteilchen erfährt eine zusätzliche Beschleunigung durch das äußere Feld, was effektiv zu einer Deformation der Wahrscheinlichkeitsdichte führt. Die Näherung besteht darin, daß das Rückwirken dieser Deformation auf die Quantenkräfte nicht berücksichtigt wird, da letztere weiterhin in einem Formalismus berechnet werden, der einer Lösung im homogenen Feld entspringt.

Ein typisches Ereignis spielt sich folgendermaßen ab: Nach der Initialisierung überlappen die Einteilchenzustände meist noch nicht und die Testteilchen erfahren eine Kraft, die sich aus der Beschleunigung durch das Coulombfeld und der Dispersion zusammensetzt. Nach etwa 10–20 fm/c beginnen einige Zustände infolge der Dispersion zu überlappen und weitere, z. T. stark fluktuierende Kräfte treten in Erscheinung. Nach einer gewissen Relaxationszeit der Quantenpotentiale, typischerweise nach $50 - 100$ fm/c, verschwinden die Quantenkräfte allmählich und die Testteilchen bewegen sich nahezu ausschließlich im Feld der langreichweitigen Coulombkräfte. Nach etwa 400 fm/c sind auch diese Kräfte auf Werte unter 10^{-3} MeV/fm abgefallen und die Simulation kann abgebrochen werden. Die Impulskoordinaten der Testteilchen können nun direkt zur Berechnung der Korrelationsfunktion herangezogen werden: Ein nachgeschalteter „Meßprozeß", d. h. ein Würfeln der Impulskoordinaten aus einer Dichteverteilung, ist nicht nötig. Mit anderen Worten: Der finale Impulsraumzustand, der Komponenten sowohl der quantenmechanischen Korrelationen als auch der Coulomb Kräfte enthält und daher sehr kompliziert ist, wird bei diesem Verfahren niemals explizit benötigt, da die Testteilchen selbst die Impulsraumverteilung definieren und nicht „gemessen" werden müssen.

6.4 Resultate

6.4.1 Pion–Pion Wechselwirkung

Zu Beginn soll ein bereits bekanntes System untersucht werden: In Abschnitt 5.7.2 wurden Simulationen eines Systems zweier Coulomb- wechselwirkender Teilchen mit unterschiedlichen Ladungszahlen vorgenommen. Die Wellenpakete entstammen einer Gauß-förmigen Quelle mit $R_s = 5.0$ fm und einer Temperatur von $T = 50$ MeV. Dieses System soll nun mit dem Molekulardynamik-Verfahren berechnet werden.

Der Freiheitsgrad, der bisher mit der Anregung höherer Basisfunktionen ins Spiel kam, tritt jetzt in der Bewegung der Testteilchen auf, die von der Bewegung der Wellenpakete teilweise entkoppelt ist. Es wurden die folgenden Bewegungsgleichungen angesetzt:

$$m\frac{d^2\mathbf{r}_j}{dt^2} = -\nabla_{r_j}(V_{ij} + Q) \quad \text{Testteilchen} \tag{6.47}$$

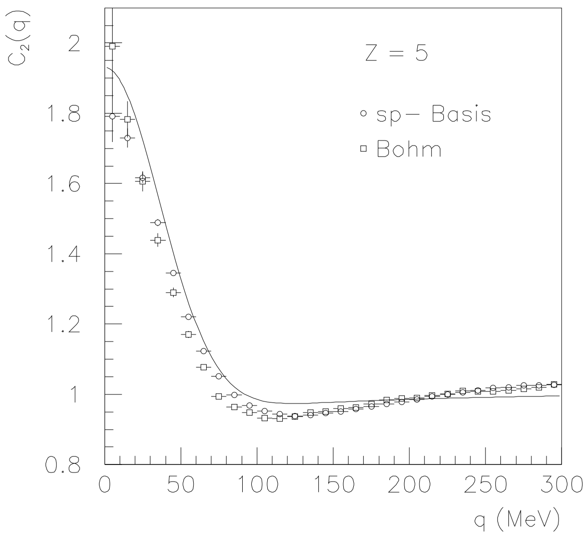

Abbildung 6.2: Die Korrelationsfunktionen für die Ladungszahl $Z = 5$ und zwei verschiedene Verfahren. Die durchgezogene Linie ist die theoretische Korrelationsfunktion (3.13) für ungeladene Bosonen.

und

$$m \frac{d^2 \mathbf{R}_j}{dt^2} = -\nabla_{R_j} \tilde{V}_{ij} \quad \text{(Wellenpakete)}\,. \tag{6.48}$$

Das Potential, das auf die lokalisierten Testteilchen wirkt, ist das klassische Coulombpotential

$$V_{ij} = \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\,, \tag{6.49}$$

während für die Wellenpakete infolge der Delokalisierung und Interferenz die Wechselwirkungsenergie $\tilde{V}_{ij}$ aus dem Matrixelement Glng. (C.4) ermittelt werden muß. Es wurden $3 \cdot 10^6$ Paare berechnet. Die Berechnung eines jeden Ereignisses wurde abgebrochen, sobald die auftretenden Kräfte (Coulomb- + Quantenkraft) den Wert 0.001 MeV/fm unterschritten. Dies war im Mittel nach einer Zeit von 230 fm/c (350 fm/c) bzw. 460 (600) Zeitschritten der Fall, wobei die Zahlen in Klammern wiederum bedeuten, daß in 10% der Ereignisse der entsprechende Wert überschritten wurde.

Abbildung 6.2 zeigt das Resultat für die Ladungszahl $Z = 5$. Die Kreise repräsentieren erneut das Resultat der *sp*- Basis Berechnung aus Abschnitt 5.7.2, die Quadrate das Resultat des Molekulardynamik Verfahrens. Das qualitative Verhalten beider Korrelationsfunktionen ist sehr ähnlich: Für $q < 200$ MeV/c liegen sie unterhalb der ladungsfreien Korrelationsfunktion (durchgezogene Kurve), für $q > 200$ MeV/c darüber. Bei kleinen Impulsdifferenzen ($q < 100$ MeV/c) gibt es eine geringe, aber signifikante und systematische Abweichung zwischen beiden Resultaten. Dies ist nicht überraschend, denn für das betrachtete System sind beide Näherungen eher schlecht: Wir haben bereits in Abschnitt 5.8 gezeigt, daß bei einer Ladungszahl von $Z = 5$ die verwendete *sp*-Basis zu klein ist, um der Deformation des Zustands in angemessener Weise Rechnung tragen zu können. Auf der anderen Seite hatten wir als Voraussetzung für die Richtigkeit der Bewegungsgleichungen (6.47) und (6.48) ein näherungsweise homogenes Feld gefordert, was im Falle der Pion-Pion Wechselwirkung sehr schlecht erfüllt ist.

Angesichts dieser Verhältnisse ist die Ähnlichkeit beider Resultate sogar erstaunlich. Die Simulation wurde für $Z = 1$ wiederholt und ließ keine Abweichungen von dem Ergebnis der *sp*- Rechnung und der wechselwirkungsfreien Korrelationsfunktion erkennen. Zwei Dinge können wir festhalten:

1. Die Idee, zusätzliche Freiheitsgrade in Form von Testteilchen einzuführen anstatt durch Basisentwicklung, scheint zu brauchbaren Resultaten zu führen.
2. Wir haben eine erneute Bestätigung der These, daß die Pion-Pion Coulombwechselwirkung ($Z = 1$) keine sichtbaren Spuren in der Korrelationsfunktion hinterläßt.

Im Folgenden werden wir ausschließlich die Wechselwirkung zwischen den Pionen und der zentralen Quelle behandeln.

6.4.2 Pion–Quelle Wechselwirkung

Für die Simulationen wurden Quellen unterschiedlicher Ladungszahl verwendet. Der Einfachheit halber wurde angenommen, daß die elektrische Ladung sich in einer homogenen Kugel mit dem rms-Radius $R_{\text{rms}} = \sqrt{3/2}R_s$ befindet. Das elektrische Potential der Testteilchen ergibt sich dann zu

$$V(r) = \frac{Ze^2}{R_{\text{rms}}}\left(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R_{\text{rms}}^2}\right) \quad (r \leq R_{\text{rms}})\,, \qquad V(r) = \frac{Ze^2}{r} \quad (r \geq R_{\text{rms}})\,. \tag{6.50}$$

Zur Berechnung der Kraft auf das Wellenpaketzentrum wurde das selbe Potential verwendet, d. h. eine Mittelung über die Ausdehnung des Zustands wurde nicht vorgenommen. Der Quellenradius wurde zu $R_s(0) = 5.0$ fm initialisiert, eine konsistente zeitabhängige Simulation verlangt jedoch eine thermische Expansion der Quelle, die gemäß Glng. (2.19) mit dem Ansatz

$$R_s(t)^2 = R_s(0)^2 + \frac{2Tt^2}{m_n} \tag{6.51}$$

modelliert wurde. m_n ist die Masse eines Nukleons. Die Temperatur war stets $T = 50$ MeV und die initiale Wellenpaketbreite $\sigma_o = 1.8$ fm. Für jedes System und jede Pionsorte wurden 50000 Ereignisse berechnet, jeweils mit 5 Pionen.

Abbildung 6.3 zeigt die resultierenden Korrelationsradien (links). Man erkennt, daß die Korrelationsradien der negativen Pionen mit der Ladung der Quelle stark zunehmen, ferner, daß die Korrelationsradien der positiven Pionen abnehmen, jedoch in einem weit geringenen Maße.

Ähnliche Effekte wurden bereits anhand semiklassischer Analysen vorhergesagt [42], jedoch erwartet man dort eher ein symmetrisches Verhalten der π^+ zu den π^- Verschiebungen. Eine naheliegende Erklärung für das unsymmetrische Verhalten der Pionsorten ist mit der dynamischen Entwicklung des Systems verbunden. Es geht um die Frage,

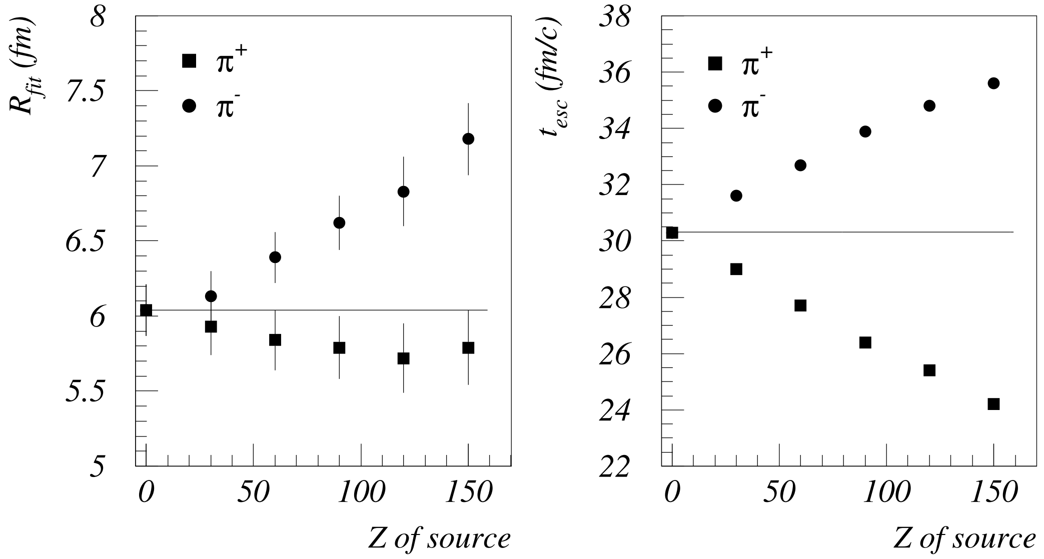

Abbildung 6.3: Links: Korrelationsradien für unterschiedliche Quellenladungen. Rechts: Mittlere Aufenthaltsdauer der Testteilchen innerhalb des 20 fm Radius. Die durchgezogene Linie ist das Resultat für $Z = 0$.

wann genau die Pionen miteinander korrelieren, d. h. *bevor* sie das Coulomb Potential durchlaufen haben oder *nachdem* sie der Quelle weitgehend entkommen sind. Dahinter steht die Beobachtung, daß ein zentrales Coulombfeld keine Korrelationen erzeugen kann. Werden also unkorrelierte Partikel in dem Feld beschleunigt, so bleibt die Korrelationsfunktion auch hinterher flach [42]. Sind jedoch bereits Korrelationen vorhanden, so werden sie durch das Coulombfeld verändert.

Abbildung 6.3 zeigt auf der rechten Seite die mittlere Verweildauer eines Testteilchens innerhalb einer Kugel mit 20 fm Radius um die Quelle herum. Für die Statistik werden nur diejenigen Teilchen i verwendet, die schließlich zum Korrelationssignal beitragen, d. h. für die es einen Partner j gibt, so daß $|\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j| < 60$ MeV/c erfüllt ist. Man erkennt, daß die positiven Pionen sich mit wachsendem Z zunehmend kürzer im Nahbereich der Quelle aufhalten, da sie beschleunigt werden. Für die negativen Pionen ist es umgekehrt. Der quantenmechanische Anteil der Dynamik, die Dispersion und das Ausbilden der Korrelationen, ist jedoch weitgehend unabhängig von Z. Dies führt zu folgender Konsequenz: Die Dynamik der positiven Pionen entspricht eher dem Extremfall „erst beschleunigen, dann korrelieren“, weshalb der Einfluß des Coulombfeldes auf das Korrelationssignal gering ist. Bei den negativen Pionen ist der Fall „erst korrelieren, dann beschleunigen“ naheliegender, daher der stärkere Effekt auf die Korrelationssignale.

Die semiklassischen Verfahren gehen davon aus, daß die Pionen bereits zum Zeitpunkt ihrer Erzeugung korreliert sind. Man versucht dies mit dem Impulsraumzustand $\Phi(\mathbf{p}, t = 0)$ zu rechtfertigen. Dann werden die Partikel auf klassischen Trajektorien

Tabelle 6.1: Vergleich der Korrelationsradien aus der Analyse der π^o, π^+ und π^- Simulationen mit einer Ladung der zentralen Quelle von $Z = 88$. Alle Angaben in fm.

	R_{π^o}	R_{π^+}	R_{π^-}
R	6.3±0.1	6.2±0.1	6.8±0.1
R_t	6.4±0.2	6.2±0.2	6.8±0.3
R_l	6.2±0.3	6.0±0.3	6.5±0.2

im Coulombfeld propagiert. Infolge dessen werden die positiven und negativen Pionen gleich behandelt und die Einflüsse auf das Korrelationssignal symmetrisch. Unsere Diskussion in Abschnitt 6.2.3 hat jedoch gezeigt, daß der Impulsraumzustand $\Phi(\mathbf{p}, t)$ bei endlichen Zeiten durch den „wahren" Bewegungszustand des Ensembles, $\Phi^w(\mathbf{p}, t)$, ersetzt werden muß. Dieser existiert zu jedem Zeitpunkt t, auch wenn er niemals direkt gemessen werden kann. In $\Phi^w(\mathbf{p}, t)$ sind die Zustände solange unkorreliert, bis die entsprechenden Ortsraumzustände aufgrund ihrer Dispersion zu überlappen beginnen. Erst von diesem Zeitpunkt an können die Coulombeffekte Signaturen in den Korrelationen hervorrufen. Auf der anderen Seite weist der Zustand $\Phi(\mathbf{p}, t)$ bereits zum Zeitpunkt $t = 0$ Korrelationen auf, was den Eindruck erweckt, die Coulomb Effekte könnten während der gesamten Phase der Zeitentwicklung ihre Signaturen in dem Impulsraumzustand hinterlassen. Hier haben wir folglich einen Fall vorliegen, bei dem die „wahren" Ensembleeigenschaften und der formale Zustand $\Phi(\mathbf{p}, t = 0)$ zu meßbaren Unterschieden in den Resultaten führen, auch wenn erstere nicht direkt gemessen werden können. Es wird darauf hingewiesen, daß es sich hier nicht um eine Inkonsistenz im quantenmechanischen Formalismus handelt, sondern lediglich um eine Fehlinterpretation von $\Phi(\mathbf{p}, t = 0)$: Es ist verboten, die Dichte $|\Phi(\mathbf{p}, t = 0)|^2$, die das Resultat einer Impulsmessung an einem *wechselwirkungsfreien System* bei $t \rightarrow \infty$ repräsentiert, als initiale Impulsraumverteilung des *wechselwirkenden Systems* bei $t = 0$ zu interpretieren, auch wenn eine formale Fouriertransformation des initialen Ortraumzustands zu $|\Phi(\mathbf{p}, t = 0)|^2$ führt. Korrekt ist hingegen, den initialen Ortsraumzustand *zunächst* solange im Coulombfeld zu propagieren, bis der asymptotische Zustand $t \rightarrow \infty$ hinreichend gut approximiert ist, und *dann* die Fouriertransformation in den Impulsraum vorzunehmen. Auf diese Weise wird man stets zu dem Resultat in Abb. 6.3 (links) kommen, unabhängig davon, ob mit Bohm's Formalismus oder mit dem Standardformalismus gearbeitet wurde.

In einer weiteren Simulation wurde der Coulombeffekt in der YKP-Darstellung (vergl. Abschnitt 4.6) analysiert. Dazu wurden 250000 Ereignisse mit jeweils 5 Pionen simuliert, und zwar mit positiven, negativen und neutralen Pionen. Der Quellenradius betrug $R_s(0) = 5.5$ fm und die Ladung $Z = 88$, was einer zentralen Ru+Ru Kollision entspricht. Die Temperatur betrug $T = 50$ MeV, die initiale Wellenpaketbreite wieder $\sigma_o = 1.8$ fm.

Tabelle 6.2: Vergleich der Korrelationsradien aus der Analyse der π^o, π^+ und π^- Simulationen mit unterschiedlichen Schnitten in dem Impulsbetrag. Alle Radien in fm Einheiten.

p (MeV/c)	R_{π^o}	R_{π^+}	R_{π^-}
$[0, 100]$	5.8±0.3	5.6±0.5	6.5±0.2
$[100, 140]$	6.5±0.4	5.6±0.5	7.1±0.4
$[140, 220]$	6.1±0.3	6.1±0.3	6.3±0.3
> 220	6.5±0.6	6.6±0.5	6.7±0.7

Die Resultate findet man in Tab. 6.1. Der Einfluß des Coulomb Feldes scheint sich gleichermaßen auf R, R_t und R_l auszuwirken. Im Rahmen der statistischen Fehler sind keinerlei unterschiedliche Signaturen erkennbar.

Für dieselbe Simulation wurde ferner die Impulsabhängigkeit des Coulombeffektes untersucht. Tabelle 6.2 zeigt den Korrelationsradius R in unterschiedlichen Schnitten der Impulsbeträge $|\mathbf{p}_i|$ beider Pionen. Wie zu erwarten, nimmt der Unterschied zwischen den verschiedenen Pionsorten mit wachsenden Impulsen ab. Die Pionen mit Impulsen > 150 MeV/c zeigen keine signigikanten Unterschiede mehr in den Korrelationssignalen. Damit eröffnet sich die Möglichkeit, den Einfluß des zentralen Coulombpotentials auf die Korrelationsradien durch Schnitte in den Impulsen herauszufiltern. Grundsätzlich gilt hier jedoch dasselbe, was wir bereits in Abschnitt 4.8 festgestellt haben: Ein Schnitt in den Impulskoordinaten führt bei komplexen Quellenfunktionen zu einer komplizierten Überlagerung dynamischer Abhängigkeiten, die nur sehr schwer zu entfalten sind.

Es bleibt noch zu ergänzen, daß im Rahmen der statistischen Fehler kein signifikanter Einfluß des Colombfeldes auf die Chaotizität λ beobachtet wurde.

Das Verfahren, das wir in diesem Kapitel entwickelt und angewendet haben, profitiert von der Eigenart, mit der ein quantenmechanisches System in Bohm's Formalismus behandelt wird. Der komplizierte Impulsraumzustand wird an keiner Stelle direkt berechnet. Stattdessen wird er durch ein Ensemble von Testteilchen (in unserem Verfahren näherungsweise) repräsentiert, das seine Eigenschaften aus dem Wechselspiel von Kräften im Ortsraum erhält. Die Impulse der Teilchen verwenden wir direkt zur Berechnung der Korrelationsfunktion, ohne Umweg über einen Meßprozeß. Im abschließenden Teil wollen wir noch ein paar grundsätzliche Punkte bzgl. Bohm's Formalismus in Relation zur Standardinterpretation der Quantenmechanik diskutieren.

6.5 Bohm's Formalismus: Die bessere Quantenmechanik oder überflüssiger Formelzauber?

Der von Bohm vorgestellte Formalismus führt zu den selben Vorhersagen über beobachtbare Phänomene wie der Standardformalismus der Quantenmechanik. Vom Standpunkt der Physik aus sind beide Formalismen folglich gleichberechtigt; es handelt sich nicht um verschiedene Theorien, sondern um verschiedene Interpretationen ein und derselben Theorie. Eine vergleichende Beurteilung beider Interpretationen ist ein metaphysikalischer Vorgang und als solcher weit mehr von Einflüssen wie Zeitgeist und philosophische Hintergründe geprägt als eine physikalische Analyse. Nach Erscheinen von Bohm's Arbeiten im Jahre 1952 hat der dort vorgeschlagene Zugang einer individualistischen Beschreibungsweise von zeitabhängigen Quantensystemen keinen nennenswerten Zuspruch gefunden. Dies hängt zumindest teilweise mit dem großen Erfolg zusammen, der zur selben Zeit mit der konsequenten Erweiterung der Standardinterpretation auf relativistische Systeme erzielt werden konnte: Die Quantenelektrodynamik hatte kurz zuvor ihren endgültigen Durchbruch erfahren und man ritt auf einer Welle von Erfolgen, welche die Beschreibung der Phänomene in Form von zeitunabhängigen Störungsrechnungen mit sich zog. Der Terminus „alles ist Streuung" hatte Konjunktur und man ging dazu über, die Physik eines Systems in die Elemente von Matrizen zu stecken, anstatt, wie seit Galilei üblich, als Zusammenspiel von Kräften zu interpretieren. Bohm's Ansatz mußte dagegen wie ein Rückschritt erscheinen, insbesondere, da er keine Lösungen für relativistische Probleme anzubieten hatte und seine Quantenpotentiale nichtlokale Eigenschaften besitzen. Inzwischen hat man jedoch erfahren, daß nicht jede Störungsreihe konvergiert und daher die Klasse der störungstheoretisch behandelbaren Phänomene beschränkt bleiben wird.

Für die Physik fundamentaler Probleme kann Bohm's Formalismus nur wenig Neues liefern: Er stellt nicht, wie vielfach behauptet, einen deterministischen Zugang zur Quantenphysik dar, denn er liefert kein Rezept dafür, wie die Anfangsbedingungen ohne Zuhilfenahme probabilistischer Mechanismen präpariert werden könnten. Ferner bietet Bohm keinerlei Erklärungen an, warum die Quantenkräfte sich gerade so verhalten, wie es sein Formalismus verlangt. Da die Ergebnisse identisch sind mit denen des Standardformalismus, hat man den dynamischen Anteil in Bohm's Ansatz meist als überflüssigen Appendix aufgefaßt und gefordert, ihn Ockham's Skalpell zu opfern[1]. Bei aller Kritik scheint man jedoch aus den Augen verloren zu haben, daß die Probleme, die Bohm's dynamische Beschreibung mit sich zieht, keineswegs ein Produkt dieses spezifischen Ansatzes sind, sondern inhärent in der Art und Weise, wie wir nichtklassische Systeme beschreiben: So ist bereits die Hamilton'sche Beschreibung der Phasenraumtrajektorien zweier wechselwirkender Punktteilchen nicht Lorentz-invariant formulierbar [50], und daher ist es nicht verwunderlich, daß dasselbe auch in einer quantenmechanischen Be-

[1] Der Term „Ockham's razor" repräsentiert eine Grundregel der Wissenschaftstheorie, gemäß derer von mehreren Theorien, die identische Vorhersagen über empirisch zugängliche Phänomene machen, diejenige vorzuziehen ist, welche am wenigsten Annahmen benötigt

schreibung nicht funktioniert. Als Konsequenz daraus die Dynamik aus relativistischen Systemen ganz zu verbannen und nur noch Störungstheorie zu betreiben, wird auch in Zukunft nicht dazu beitragen, das Wesen relativistischer Vorgänge besser zu verstehen. Ein weiteres Beispiel ist das notorische Problem der „Messung“ in der Quantenmechanik, ein Begriff, der „gänzlich aus der Quantenmechanik verbannt werden sollte“ [51]. Die Standardinterpretation der Quantenmechanik schiebt viele ihrer fundamentalen Probleme in diesen Vorgang, indem sie den „Meßprozeß“ axiomatisiert, anstatt physikalische Mechanismen anzugeben. Der an Bohm's Interpretation häufig gerichtete Vorwurf, die Quantenpotentiale seien nichtlokal und daher zu unkonventionell, geht ins Leere, da diese Nichtlokalität eine fundamentale Eigenschaft der Quantenmechanik ist und normalerweise, gut verpackt im „Meßprozeß“, lediglich nicht so auffällt. Letzterer ist in Bohm's Formalismus ohne ein zusätzliches Reduktionspostulat beschreibbar [52], so daß es, was Ockham's Skalpell angeht, wohl eher „fifty–fifty“ mit der Standardinterpretation steht.

Für den pragmatisch orientierten Physiker könnte Bohm's Ansatz eine Reihe von Eigenschaften mit sich bringen, auf die er im Standardformalismus verzichten muß. Die Tatsache, daß man eine Bewegungsgleichung zur Verfügung hat, macht diesen Zugang besonders geeignet für Forschungsgebiete, die sich im Grenzbereich zur klassischen Mechanik bewegen. So kann man bei der Analyse eines Systems, dessen klassisches Gegenstück chaotisches Verhalten zeigt, die Observablen in beiden Grenzfällen sehr viel einfacher in Relation zueinander setzen als mit dem Standardformalismus. Darüberhinaus ist das Verhalten von lokalisierten Teilchen in Kraftfeldern, selbst wenn diese kompliziert sind, intuitiver als das numerische Lösen einer partiellen Differentialgleichung. Ein solcher Fehler wie die Fehldeutung des Impulsraumzustands, der in Abschnitt 6.2.3 und 6.4.2 diskutiert wurde, tritt hier nicht auf, da die Testteilchen zu jedem Zeitpunkt, mit oder ohne Messung, einen wohldefinierten Phasenraumzustand besitzen. Schließlich kann ein alternativer Formalismus dann nützlich sein, wenn es darum geht, Näherungen für spezielle Systeme vorzunehmen. Unterschiedliche Methoden liefern oft unterschiedliche Ansatzpunkte für solche Näherungen, und daher sollte der Physiker aus einem möglichst großen Reservoir schöpfen können. Einen Ansatz zu verwerfen, weil er keine neuen Phänomene vorhersagt und alternative Ansätze bereits etabliert sind, ist daher kontraproduktiv. Wir beantworten die eingangs gestellte Frage dahingehend, daß Bohm's Formalismus weder besser ist noch überflüssig, sondern anders und deshalb nützlich.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Diskussion

7.1 Was erreicht wurde

In dieser Arbeit wurden numerische Simulationen eines quantenmechanischen Systems von Bosonen entwickelt und auf die Physik der Pionkorrelationen in Schwerionenkollisionen angewendet. Es wurde demonstriert (Kapitel 2 und 3), daß die Einführung eines Wellenpaket Modells zu einer reichhaltigeren physikalischen Beschreibung des Systems führt als das übliche, semiklassische Modell ebener Wellen. Der zusätzliche Parameter, die initiale Wellenpaketbreite σ_o, erlaubt eine konsistente Beschreibung der Kohärenzeffekte im Ortsraum und damit der Chaotizität λ, für die im Falle einer thermischen Quelle ein analytischer Ausdruck gefunden werden konnte (Glng. 3.33). Als eine naheliegende physikalische Interpretation des Parameters σ_o wurde die mittlere freie Weglänge der Pionen in der Quelle vor dem Freeze-out herangezogen: In dem sie umgebenden Medium können die Pionen nicht als freie Teilchen beschrieben werden. Stattdessen erfahren ihre Zustände eine effektive Lokalisierung, ähnlich wie Elektronen, die in einem mit Störstellen versehenen Leiter eine (Anderson-) lokalisierte Wellenfunktion aufbauen. Die damit verbundene Lokalisierungsenergie sorgt für einen nennenswerten Beitrag zur Temperatur der Pionen (Glng. 3.9 und Abb. 4.1).

Mit dem in Kapitel 4 entwickelten Metropolisverfahren zur Simulation freier Pionen bzw. mittels numerischer Integration wurden die Korrelationsfunktionen für eine Reihe unterschiedlicher Quellen erzeugt und die markantesten Korrelationsparameter bestimmt. Es wurde gezeigt, daß die wichtigsten Quellenparameter, zu denen die Expansionsgeschwindigkeit, die Lebensdauer und die Absorption zählen, Signaturen in den Korrelationsparametern hinterlassen, die jedoch im kombinierten Auftreten dieser Effekte nicht eindeutig entfaltet werden können. Die Analyse des Transportmodells IQMD, das unter den in der Schwerionenphysik verfügbaren Simulationen zu den realistischeren gezählt werden kann, hat gezeigt, daß es immerhin möglich ist, den geometrischen Radius des Pionproduktionsortes und die Lebensdauer der Quelle durch Vergleich mit einer einfachen Modell zu ermitteln. Schnitte in den Impulskoordinaten enthalten jedoch Signaturen der dynamischen Evolution des Systems und führen zu Korrelationssignalen, deren Interpretation erheblich schwieriger ist. Dies ist zu beachten, falls im Experiment Detektoren verwendet werden, die nur einen Teil des Impulsraumes abdecken. Eine Detailanalyse einzelner Impulsraumabschnitte erfordert zur Interpretation der gewonnenen Korrelationssignale eine entsprechend zuverlässige Quellensimulation, die es zur Zeit noch nicht gibt.

Auf eine Darstellung der Zustände als Wellenpakete kann nicht verzichtet werden, sobald es um die Modellierung wechselwirkender Pionen geht. Ursache dafür ist, daß das System mit dem Auftreten von Potentialen durch zusätzliche Randbedingungen geprägt wird: Die exakte Verteilung der Zustände im Ortsraum bestimmt die potentielle Energie. Diese ist jedoch nicht allein von dem Coulombpotential bestimmt, sondern in weit größerem Maße von der Lokalisierungsenergie der Zustände. In Kapitel 5 wurde gezeigt, daß das Auftreten der Lokalisierungsenergie die Coulombeffekte der Pion-Pion Wechselwirkung in der Korrelationsfunktion maskiert. Dies steht im Widerspruch zu den Ergebnissen, die man mittels Streutheorie gewonnen hat und die in der Fachliteratur vorherrschend sind. Dabei wird übersehen, daß die Streuung ebener Wellen an einem Streuzentrum nicht den Randbedingungen des Systems gerecht wird. Dies wird besonders deutlich, wenn man sich das Beispiel eines Wellenpakets in einem externen Potential $V(\mathbf{r})$ in Bohm's Formalismus (Abschnitt 6.2.2) vor Augen führt. Auf das Testteilchen am Ort $\mathbf{r}$ wirkt zum Zeitpunkt der Initialisierung die Kraft

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2(\mathbf{r}-\mathbf{R})}{4m\sigma_o^4} - \nabla V(\mathbf{r}) \, , \tag{7.1}$$

wobei der erste Term die Quantenkraft Glng. (6.30) ist, die von dem Wellenpaket mit Zentrum $\mathbf{R}$ ausgeht. Im Grenzfall ebener Wellen, $\sigma_o \to \infty$, verschwindet dieser Term und ein klassischer Grenzfall ist erreicht, in dem nur noch die Coulombkraft auf das Testteilchen wirkt. Beim Coulombpotential tauchen auch zu späteren Zeitpunkten keine Quantenkräfte mehr auf, so daß es sich bei der Streuung ebener Wellen um ein rein klassisches Problem handelt. Es wurde jedoch gezeigt (Abschnitt 5.1), daß die Quantenkräfte in unserem System eine dominierende Rolle spielen und eine klassische Beschreibung des Streuvorgangs daher fehlschlagen muß.

Die Analysen des Kapitels 6 zeigen, daß die Coulombwechselwirkung der Pionen mit der zentralen Quelle zu signifikanten Veränderungen der Korrelationsradien führt. Dieser Effekt ist jedoch nicht, wie erwartet, symmetrisch für beide Ladungen, sondern bei den negativen Pionen wesentlich stärker ausgeprägt. Als Erklärung dafür wurde die Dynamik des Systems im Verlauf der Coulombphase herangezogen: Der Zeitpunkt, zu dem die Bose-Einstein Korrelationen einsetzen, entscheidet über die Stärke des beobachtbaren Coulombeffekts. Die Tatsache, daß mit dem Bohm'schen Molekulardynamik-Verfahren eine Simulation mit einer physikalischen Zeitskala zur Verfügung steht, ermöglicht es erstmals, die dynamische Entwicklung der Schwerionenreaktion in Hinblick auf die Pionkorrelation zu analysieren. Man kommt dabei zu folgendem Gesamtbild:

1. Die Produktionsphase spielt sich im wesentlichen in den ersten 30 fm/c nach Beginn der Kollision ab (Abb. 4.7 b).

2. Die Coulombphase läßt sich in zwei Teile spalten. Im ersten Teil, der nach 50–100 fm/c abgeschlossen ist, entstehen die Bose-Einstein Korrelationen. Hier wird jedoch gleichzeitig der entscheidende Teil des zentralen Coulombpotentials durchlaufen, von den positiven Pionen schneller als von den negativen Pionen, was zu der erwähnten Asymmetrie in den Korrelationsradien führt. Im folgenden Teil, der sich über einen weiteren Zeitraum von ca. 300 fm/c hinzieht, wird das Coulombpotential bis auf einen Rest von wenigen Prozent durchlaufen.

3. Die freie Phase beginnt ca. 400 fm/c nach der Kollision.

Diese Werte können je nach System und Initialisierung der Wellenpaketbreiten schwanken.

7.2 Was nicht erreicht wurde

Zu den wichtigsten Systemeigenschaften, denen in der vorliegenden Arbeit nicht Rechnung getragen wurde, zählen die relativistischen Effekte. Da die Pionen mit einer Masse von 140 MeV und einem typischen Impuls von 150 MeV/c bereits Geschwindigkeiten von 0.7 c besitzen, erscheint die Verwendung kovarianter Formalismen bei der Beschreibung der Dynamik zwingend notwendig. Deren Abwesenheit ist daher weniger mit der Auffassung verknüpft, relativistische Effekte seien vernachlässigbar, als vielmehr mit der peinlichen Erkenntnis, daß es eine adequate relativistische Beschreibung bosonischer Vielteilchensysteme bis heute nicht gibt[1]. Dies schließt die relativistische Quantenfeldtheorie ein, mit der sich zwar formal Systeme relativistischer Mesonen beschreiben lassen, deren numerische Behandlung jedoch die leistungsfähigsten Rechner überfordert. Man sollte auch im Auge behalten, daß die starken Prozesse (z. B. Teilchenproduktion) in dem vorliegenden System von zweitrangiger Bedeutung sind, da es um die Modellierung der Pionen nach dem Freeze-out geht. Der Physik des Systems scheint daher in einem Einteilchenbild bereits Rechnung getragen zu sein, aber die naheliegende Wellengleichung, die Klein-Gordon Gleichung

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = \left(-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4\right) \Psi \; , \tag{7.2}$$

führt nicht eimal im wechselwirkungsfreien Fall zu positiv definiten Wahrscheinlichkeitsdichten, selbst wenn man sich auf den Raum der positiven Energielösungen beschränkt [53]. Da diese Pathologie nicht nur auf kleine räumliche und zeitliche Bereiche beschränkt bleibt [54], ist die Klein-Gordon Gleichung zur Beschreibung jeglicher Art lokalisierter Zustände ungeeignet.

Als vielversprechender könnte sich ein weiterer Ansatz, den man aus der Klein-Gordon Gleichung durch „Wurzelziehen“ erhält und der zur *relativistischen Schrödingergleichung* [53]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4}\, \Psi \tag{7.3}$$

[1] Nach einer Diskussion mit R. Bishop (Manchester, R.F.BISHOP@UMIST.AC.UK), 1997

führt, herausstellen. Hier ist der Lösungsraum von vornherein auf Zustände positiver Energie beschränkt, dafür hat man es jedoch mit dem nichtlokalen Wurzeloperator zu tun. Es wurde immerhin gezeigt [55], daß man eine Interpretation lokalisierter Einteilchenzustände für skalare Teilchen finden kann. Diese besitzen exponentiell gedämpfte raumartige Anteile und somit z. T. akausale Eigenschaften, was man in Kauf nehmen sollte. Ob es möglich ist, auf diese Weise ein numerisches Verfahren zur Berechnung der Pionkorrelationen zu entwickeln, bedarf jedoch weiterer Analysen.

Schließlich gibt es Ansätze, das Transportmodell IQMD (Abschnitt 4.8) mit einer relativistischen Dynamik auszustatten („RQMD“, [56]). Hier wird die Lorentzinvarianz nur auf Ebene der klassischen Bewegungsgleichungen eingeführt, da das Programm keine quantenmechanischen Zustände beschreibt. Ferner muß man bei den Wechselwirkungen Inkonsistenzen in Kauf nehmen, da jedes Teilchen eine individuelle Eigenzeit besitzt. Als ersten Schritt einer relativistischen Näherung könnte man diesen Formalismus für die Pionkorrelationen übernehmen, um zumindest die Dynamik der Wellenpaketzentren relativistisch zu formulieren, während der quantenmechanische Anteil der Dynamik, d. h. die Dynamik der Testteilchen, weiterhin nichtrelativistisch bliebe. Es muß jedoch daran erinnert werden, daß eine der wichtigsten Lehren dieser Arbeit die ist, daß das vorliegende System hochgradig von quantenmechanischen Eigenschaften dominiert wird. Das Beispiel der Coulomb Effekte sollte eine Ermahnung sein, semiklassische Ansätze mit äußerstem Mißtrauen zu betrachten, denn schließlich sind die Bose-Einstein Korrelationen quantenmechanischer Natur.

Das Bild, das man sich von den Pionen in der Schwerionenphysik macht, ist in vielerlei Hinsicht zu stark vereinfacht. Die Trennung der Zeitentwicklung in 3 Phasen ist willkürlich. Insbesondere ist das „Freeze-out“ weder ein wohldefinierter Zeitpunkt noch ein Ort noch eine Dichte, denn das System ist weder homogen noch äquilibriert. Die Vernachlässigung der starken Wechselwirkung bei der Modellierung der Pionkorrelationen ist daher nicht selbstverständlich. Ferner spekuliert man darüber, ob die Quanteneigenschaften der Pionen bereits den Produktionsprozeß beeinflussen und u. a. zu Lasereffekten führen könnten [57]. Eine zuverlässige Modellierung der Pionkorrelationen sollte sich nicht auf die Phase 2 beschränken, sondern die Physik der Phase 1 mit einschließen. Es ist daher nicht verwunderlich, sondern hilfreich, daß man angesichts solcher Vereinfachungen nicht alle experimentellen Resultate zwanglos erklären kann. So wurden positive Korrelationen zwischen unterschiedlich geladenen Pionen gemessen, die man bisher als Coulombeffekt interpretiert hat [58]. Die Resultate aus Kapitel 5 schließen diese Interpretationsmöglichkeit aus. Hier muß folglich eine andere Erklärung gefunden werden.

Die Einsicht, daß nicht alle Näherungen sich als physikalisch motiviert rechtfertigen lassen, sondern teilweise lediglich den Zwängen des numerischen Realismus entspringen, mag ein ungutes Gefühl hinterlassen. Tatsache ist jedoch, daß man Resultate auch für sehr komplexe Systeme benötigt, und zwar jetzt, und nicht in 10 Jahren. Man muß daher nehmen, was zur Verfügung steht, die Ergebnisse mit dem notwendigen Mißtrauen beurteilen und stets Offenheit für alternative Ansätze an den Tag legen.

Anhang A

Pacman: Die Routine zur Identifikation von Clustern

Nicht alle Einteilchenzustände im Impulsraum überlappen einander. Abbildung A.1 zeigt eine typische Situation (links): Die 6 Zustände sind derart angeordnet, daß sie zwei einander disjunkte Cluster bilden. Teilchen, die unterschiedlichen Clustern angehören, korrelieren nicht miteinander, da der wechselseitige Überlapp verschwindet und die Interferenzbeiträge zu den Wahrscheinlichkeitsdichten vernachlässigbar sind. Dieses Phänomen nennt man „effektive Faktorisierung“ des Zustands. Eine Symmetrisierung ist daher nur innerhalb der Cluster erforderlich.

Um die Cluster in dem System zu identifizieren, muß zunächst definiert werden, von welchem Abstand $\Delta\mathbf{P}_{\mathrm{grenz}}$ an zwei Zustände als faktorisiert gelten sollen. Bei den Simulationen in dieser Arbeit wurde ein Wert von $\Delta\mathbf{P}_{\mathrm{grenz}} = 3.5\sigma_p$ verwendet, wobei σ_p die Breite des Wellenpaketes im Impulsraum ist. Damit kann ein Tableau aufgestellt werden (Abb.A.1 rechts), dessen Einträge indizieren, ob zwei Zustände überlappen oder nicht. Schließlich wird ein „Spürhund“, der *Pacman*, durch das Tableau geschickt, um die Cluster aufzuspüren. Eigentlich ist die volle Information über das System bereits in dem linken unteren oder wahlweise rechten oberen Dreieck des Tableaus enthalten, aber die Bewegungsvorschriften für den Pacman werden einfacher in einem quadratischen System, weshalb die Information redundant gehalten wird, d. h. als Punkt und dessen Spiegelpunkt. Die Startposition des Pacman ist das linke obere Quadrat (in der rechten Abbildung). Sein Weg durch das Tableau auf seiner Suche nach der ersten Cluster ist durch die gestrichelte Linie markiert. Es gelten folgende Regeln für den Pacman:

1. Der Pacman darf nur geradeaus laufen, mit einer Ausnahme: Falls er einen Punkt (oder Spiegelpunkt) erreicht, darf er von dort aus in jede beliebige Richtung abbiegen.

2. Nachdem er einen solchen Punkt erreicht hat, frißt er ihn (= löscht er diesen Eintrag) und merkt sich das Indexpaar, das mit dieser Koordinate verbunden ist. Der Spiegelpunkt verschwindet auch.

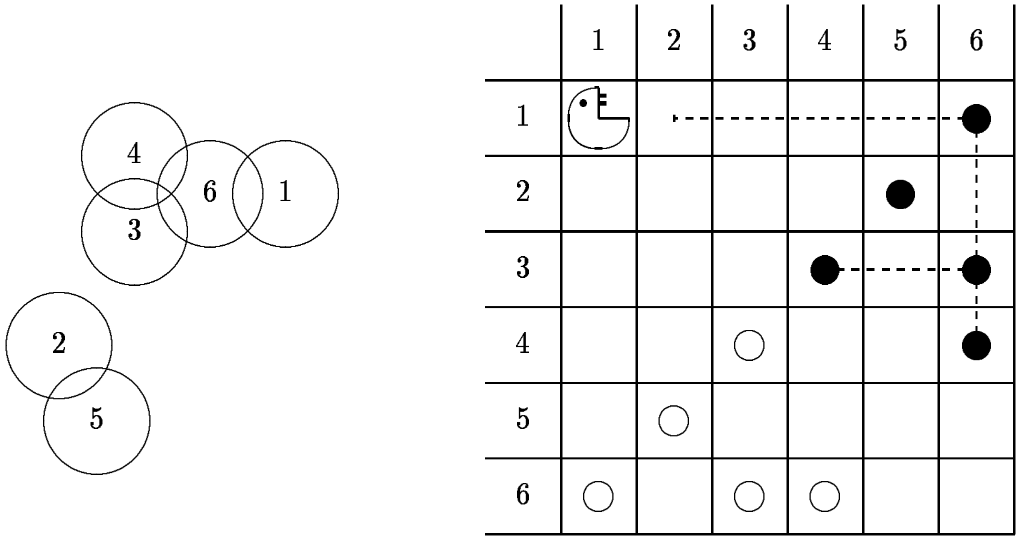

Abbildung A.1: Links: Konfiguration eines Systems von 6 Pionen im Impulsraum. Mit dem hier gewählten Grenzradius (Kreise) erhält man zwei Cluster. Rechts: Das entsprechende Tableau. Die ausgefüllten Kreise markieren einen Überlapp eines Pions (Spaltenindex) mit dem anderen (Zeilenindex). Die offenen Kreise sind die Spiegelpunkte. Die gestrichelten Linien zeigen den Weg des Pacman während des ersten Zyklus.

3. Wenn er auf diese Weise keinen Punkt mehr finden kann, ist die Identifikation eines Clusters abgeschlossen. Dieser ist durch die Menge der eingesammelten Indizes definiert.

4. Der Pacman setzt seine Suche fort auf dem nächsten Quadrat, das er noch nicht betreten hat.

In Wirklichkeit muß der Pacman nicht ganz blind suchen. Es wird Buch geführt über die noch verbleibende Anzahl von Punkten in jeder Zeile und Spalte sowie im gesamten Tableau, damit die Suche rechtzeitig unterbrochen werden kann.

Anhang B

Chaotizität und Multiplizität

Wir zeigen, daß die partielle Kohärenz der Quelle nicht von der Multiplizität des Systems (d. h. von der Intensität der Quelle) abhängt. Wir erinnern uns daran, daß die Quelle genau dann inkohärent (oder chaotisch) ist, wenn die Teilchen unabhängig voneinander emittiert werden, d. h. ihre Zustände im Ortsraum nicht überlappen. In der Quantenstatistik haben wir es mit Ortsraumzellen zu tun. Wir definieren, daß zwei Partikel genau dann unabhängig voneinander sind, wenn sie sich in verschiedenen Zellen aufhalten. Wir definieren ferner die Chaotizität der 2- Teilchen Korrelationsfunktion folgendermaßen:

$$\lambda = 1 - \frac{\text{Anzahl der Paare in identischen Zellen}}{\text{Gesamtzahl aller Paare}}\,. \tag{B.1}$$

Es sei K die Anzahl der Zellen, N die Anzahl der Pionen, die bereits auf die Zellen verteilt sind, m die Anzahl aller Paare und m_c die Anzahl kohärenter Paare, d. h. die Anzahl der Paare, die man aus Pionen identischer Zustände bilden kann. Es sei ferner $\mathcal{P}_c$ die Wahrscheinlichkeit, daß ein beliebiges Paar des Systems kohärent ist, $n(i)$ die Anzahl der Pionen in der i'ten Zelle und

$$w(i) = \frac{n(i)+1}{K+N} \tag{B.2}$$

das statistische Gewicht der i'ten Zelle, das aus der Bose Statistik stammt. Wir müssen zeigen, daß $\mathcal{P}_c$ nicht von N abhängt.

Wir beginnen mit $N = 1$. Es sei die j'te Zelle belegt, so daß sie nun ein statistisches Gewicht $w(j) = 2/(K+1)$ hat, während für alle anderen Zellen $w(i) = 1/(K+1)$ mit $i \neq j$ gilt. Für das zweite Pion gilt daher

$$\mathcal{P}_c(N=2) = w(j) = \frac{2}{K+1}\,. \tag{B.3}$$

Wir nehmen an, (B.3) gelte für ein bestimmtes $N \geq 2$. Es gilt also

$$\mathcal{P}_c(N) = \frac{m_c}{m} = \frac{\sum_{i=1}^{K} n(i)(n(i)-1)/2}{N(N-1)/2} \equiv \frac{2}{K+1}\,. \tag{B.4}$$

Wir betrachten nun das $N+1$'te Pion und berechnen, wie groß der Erwartungswert für die Anzahl kohärenter Paare ist, die es mit den restlichen Pionen bilden kann:

$$\langle m_c \rangle_{\text{new}} = \sum_{i=1}^{K} w(i)\, n(i) = \sum_{i=1}^{K} \frac{(n(i)+1)n(i)}{K+N} \,. \tag{B.5}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_c(N+1) &= \frac{m_c + \langle m_c \rangle_{\text{new}}}{m_{\text{new}}} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{K} \left(\frac{n(i)(n(i)-1)}{2} + \frac{(n(i)+1)n(i)}{K+N} \right)}{\frac{N(N-1)}{2} \frac{(N+1)}{(N-1)}} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{K} \frac{(n(i)-1)n(i)}{2} \left(1 + \frac{2}{K+N}\right) + \frac{2N}{K+N}}{\frac{N(N-1)}{2} \frac{(N+1)}{(N-1)}} \,,
\end{aligned} \tag{B.6}$$

wobei wir $\sum_{i=1}^{K} n(i) = N$ benutzt haben. Wir setzen (B.4) ein und erhalten

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_c(N+1) &= \frac{2}{K+1} \left(1 + \frac{2}{K+N}\right) \frac{(N-1)}{(N+1)} + \frac{4}{(K+N)(N+1)} \\
&= \frac{2}{K+1} \,,
\end{aligned} \tag{B.7}$$

unabhängig von N.

Anhang C

Berechnung der Matrixelemente

Wir berechnen die Wechselwirkungsmatrixelemente für unsere zeitabhängigen Basisfunktionen. Dazu beginnen wir mit den s - Funktionen und behandeln die komplizierteren Fälle in den folgenden Abschnitten. Die $\boxed{\text{gerahmten}}$ Formeln stammen aus [39].

C.1 s - Typ Funktionen

Wir beginnen mit der 2-Teilchenfunktion

$$\Psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 2^{-1/2}\sqrt{\mathcal{N}_{s,s}}\,\Big(\chi_{s,1}(\mathbf{r}_1, t)\,\chi_{s,2}(\mathbf{r}_2, t) + \chi_{s,2}(\mathbf{r}_1, t)\,\chi_{s,1}(\mathbf{r}_2, t)\Big) \tag{C.1}$$

und den 1-Teilchen Amplituden[1]

$$\chi_{s,i}(\mathbf{r}, t) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{P}_i(t)\cdot\mathbf{r} - \phi_{s,i}(t)\right) - \frac{\left(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)\right)^2}{4s(t)\sigma_\circ}\right) \tag{C.2}$$

mit der zeitabhängigen Phase

$$\phi_{s,i}(t) = \int_0^t E_i^{\mathrm{kin}}(\tau)\,d\tau + \frac{3\hbar}{2}\arctan\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\right)\ . \tag{C.3}$$

Die Normierung $\mathcal{N}_{s,s}$ ist in Gleichung (C.94) angegeben. Zu berechnen ist das Wechselwirkungs - Matrixelement

$$\langle\Psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}|\Psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)\rangle = \frac{e^2}{2}\mathcal{N}_{s,s}\left(J_s + \tilde{J}_s + K_s + \tilde{K}_s\right) \tag{C.4}$$

mit den Coulomb- und Austausch Matrixelementen

$$J_s = \langle\chi_{s,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{s,2}(\mathbf{r}_2)|\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}|\chi_{s,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{s,2}(\mathbf{r}_2)\rangle\ , \tag{C.5}$$

[1]Man unterscheide zwischen dem Index i und der imaginären Einheit i

$$\tilde{J}_s = \langle \chi_{s,2}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{s,1}(\mathbf{r}_2)| \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\chi_{s,2}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{s,1}(\mathbf{r}_2)\rangle \ , \tag{C.6}$$

$$K_s = \langle \chi_{s,1}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{s,2}(\mathbf{r}_2)| \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\chi_{s,2}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{s,1}(\mathbf{r}_2)\rangle \ , \tag{C.7}$$

$$\tilde{K}_s = \langle \chi_{s,2}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{s,1}(\mathbf{r}_2)| \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\chi_{s,1}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{s,2}(\mathbf{r}_2)\rangle \ . \tag{C.8}$$

Wir erkennen sofort, daß $K_s = \tilde{K}_s^*$ gelten muß. Wir schreiben die Integrale aus:

$$J_s = \iint e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1)^2}{2\sigma^2}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2)^2}{2\sigma^2}}\, d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2 \ , \tag{C.9}$$

$$\tilde{J}_s = \iint e^{-\frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1)^2}{2\sigma^2}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2)^2}{2\sigma^2}}\, d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2 \ . \tag{C.10}$$

Dabei wurde $\sigma^2 = ss^*$ verwendet. Für das Austauschmatrixelement benutzen wir die Gauß'sche Produktformel

$$\boxed{e^{-\alpha_1(\mathbf{r}-\mathbf{R}_1)^2}\, e^{-\alpha_2(\mathbf{r}-\mathbf{R}_2)^2} = e^{-\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1+\alpha_2}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}\, e^{-(\alpha_1+\alpha_2)(\mathbf{r}-\mathbf{Q})^2}} \tag{C.11}$$

mit

$$\mathbf{Q} = \frac{\alpha_1\mathbf{R}_1 + \alpha_2\mathbf{R}_2}{\alpha 1 + \alpha 2} \tag{C.12}$$

Wir erhalten auf diese Weise

$$K_s = e^{-\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}{4\sigma_o^2}} \iint e^{-\frac{(\mathbf{r}_1-\mathbf{Q})^2}{2\sigma^2}}\, e^{-\frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{Q}^*)^2}{2\sigma^2}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)}\, d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2 \tag{C.13}$$

mit

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{2\sigma_o}\,(\mathbf{R}_1 s + \mathbf{R}_2 s^*) \ . \tag{C.14}$$

Der nächste Schritt soll den lästigen Coulomb - Term beseitigen. Dazu benutzen wir die Fourier - Transformation

$$\boxed{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{2\pi^2} \int k^{-2}\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1}\, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_2}\, d^3\mathbf{k}} \tag{C.15}$$

und erweitern den Nenner derart, daß die Variablen zentriert werden, für J_s beispielsweise:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{|(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) - (\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2) + (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)|} \ . \tag{C.16}$$

Wir erhalten

$$J_s = \frac{1}{2\pi^2} \iiint e^{-\frac{(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_1)^2}{2\sigma^2}}\, k^{-2}\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_1)}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_2)}\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)}\, e^{-\frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_2)^2}{2\sigma^2}}, \quad (C.17)$$

$$\tilde{J}_s = \frac{1}{2\pi^2} \iiint e^{-\frac{(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_2)^2}{2\sigma^2}}\, k^{-2}\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_2)}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_1)}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)}\, e^{-\frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_1)^2}{2\sigma^2}}, \quad (C.18)$$

$$K_s = \frac{1}{2\pi^2} e^{-\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}{4\sigma_o^2}}\, e^{\frac{-t}{2m\sigma_o^2}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)\cdot(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)} \iiint e^{-\frac{(\mathbf{r}_1-\mathbf{Q})^2}{2\sigma^2}}\, e^{-\frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{Q}^*)^2}{2\sigma^2}}\, k^{-2}$$

$$\cdot\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{Q})}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{Q}^*)}\, e^{-\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)} \quad (C.19)$$

mit $\mathbf{k}' = \mathbf{k}+(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)/\hbar$. Die Integrationen müssen über die Ortskoordinaten $d^3\mathbf{r}_1$, $d^3\mathbf{r}_2$ und den Wellenvektor $d^3\mathbf{k}$ ausgeführt werden. Wir beginnen mit der Ortsintegrationen, wobei wir die folgende allgemeine Formel benutzen:

$$\boxed{\int dx\, x^n\, e^{-ax^2+ibx} = \left(\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{4a}}\right)^n \mathrm{H}_n\left(\frac{b}{\sqrt{4a}}\right)\sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp\left(-\frac{b^2}{4a}\right)} \quad (C.20)$$

mit den Hermite Polynomen

$$\mathrm{H}_n(z) = n! \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} \frac{(-1)^k (2z)^{n-2k}}{k!(n-2k)!}\ . \quad (C.21)$$

Hier bezeichnet $[y]$ die größte ganze Zahl, die kleiner als y ist. Wir erhalten nach Integration über $\mathbf{r}_1$ und $\mathbf{r}_2$:

$$J_s = \frac{(2\pi\sigma^2)^3}{2\pi^2} \int k^{-2}\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)}\, e^{-k^2\sigma^2}\, d^3\mathbf{k}\ , \quad (C.22)$$

$$\tilde{J}_s = \frac{(2\pi\sigma^2)^3}{2\pi^2} \int k^{-2}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)}\, e^{-k^2\sigma^2}\, d^3\mathbf{k}\ , \quad (C.23)$$

$$K_s = \frac{(2\pi\sigma^2)^3}{2\pi^2} e^{-\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}{4\sigma_o^2}}\, e^{\frac{-t}{2m\sigma_o^2}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)\cdot(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)} \int k^{-2}\, e^{-k'^2\sigma^2}\, e^{-\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)} \quad (C.24)$$

Bei der Integration über $d^3\mathbf{k}$ stört noch der k^{-2} - Term. Wir benutzen daher einen Trick:

$$\boxed{e^{-\sigma^2k^2} = 2\sigma^2k^2 \int_0^1 \lambda^{-3}\, e^{-\frac{\sigma^2k^2}{\lambda^2}}\, d\lambda} \quad (C.25)$$

und erhalten

$$J_s = \frac{(2\pi\sigma^2)^3 2\sigma^2}{2\pi^2} \iint_0^1 e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)}\, e^{-\frac{k^2\sigma^2}{\lambda^2}}\, \lambda^{-3}\, d^3\mathbf{k}\, d\lambda\ , \quad (C.26)$$

$$\tilde{J}_s = \frac{(2\pi\sigma^2)^3 2\sigma^2}{2\pi^2} \iint_0^1 e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)}\, e^{-\frac{k^2\sigma^2}{\lambda^2}}\, \lambda^{-3}\, d^3\mathbf{k}\, d\lambda\ , \quad (C.27)$$

$$K_s = \frac{(2\pi\sigma^2)^3 2\sigma^2}{2\pi^2} e^{-\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}{4\sigma_o^2}} e^{\frac{-t}{2m\sigma_o^2}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)\cdot(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)} e^{-\frac{(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)^2\sigma^2}{\hbar^2}}$$
$$\cdot \iint_0^1 e^{-\frac{k^2\sigma^2}{\lambda^2}} \lambda^{-3} e^{-\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)} e^{-\frac{2\sigma^2}{\hbar}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)} d^3\mathbf{k}\, d\lambda \,. \tag{C.28}$$

Wir können nun die $d^3\mathbf{k}$ - Integration ausführen und erhalten

$$J_s = \tilde{J}_s = (8\sigma^5\pi^{5/2})\, \mathrm{F}_0\left(\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}{4\sigma^2}\right) , \tag{C.29}$$

$$K_s = \tilde{K}_s = (8\sigma^5\pi^{5/2})\, e^{-\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}{4\sigma_o^2}} e^{\frac{-t}{2m\sigma_o^2}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)\cdot(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)} e^{-\frac{(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)^2\sigma^2}{\hbar^2}}$$
$$\cdot\, \mathrm{F}_0\left(-\left(\frac{(\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1)\sigma}{\hbar} + \frac{\hbar t(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)}{4m\sigma_o^2\sigma}\right)^2\right) \tag{C.30}$$

mit der unvollständigen Gamma Funktion

$$\boxed{\mathrm{F}_\nu(t) = \int_0^1 d\lambda\, \lambda^{2\nu}\, e^{-t\lambda^2} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-t)^j}{j!\,(2\nu+2j+1)}} \tag{C.31}$$

C.2 Coulomb Integrale für generalisierte Gauß-Funktionen

Zu berechnen sind die Integrale der Form[2]

$$J^{11,22}_{12,34} = \langle \chi_{\vec{l}_1,1}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{\vec{l}_3,2}(\mathbf{r}_2)| \frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} |\chi_{\vec{l}_2,1}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{\vec{l}_4,2}(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{C.32}$$

mit

$$\chi_{\vec{l}_1,1}(\mathbf{r}_2,t) = x_{21}^{l_{1x}}\, y_{21}^{l_{1y}}\, z_{21}^{l_{1z}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{P}_1(t)\cdot\mathbf{r}_2 - \phi_{\vec{l}_1,1}(t)\right) - \frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_1(t))^2}{4s(t)\sigma_\mathrm{o}}\right) , \tag{C.33}$$

der zeitabhängigen Phase

$$\phi_{\vec{l}_1,1}(t) = \int_0^t E_1^{\mathrm{kin}}(\tau)\, d\tau + \hbar\,(l_{1x}+l_{1y}+l_{1z}+3/2)\, \arctan\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\right) \tag{C.34}$$

und $x_{21}^{l_{1x}} = (\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_1)_x^{l_{1x}}$, analog die anderen Ausdrücke. Wir ersetzen

$$i = l_{1x}+l_{2x}\ ,\ j = l_{1y}+l_{2y}\ ,\ k = l_{1z}+l_{2z}\ ,\ i' = l_{3x}+l_{4x}\ ,\ j' = l_{3y}+l_{4y}\ ,\ k' = l_{3z}+l_{4z}\ . \tag{C.35}$$

[2]Die hochgestellten Indizes bezeichnen an J die Phasenraumkoordinaten, die tiefgestellten bezeichnen die Exponentenvektoren

Damit folgt

$$J^{11,22}_{12,34} = e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\phi} \iint x^i_{11} y^j_{11} z^k_{11} x^{i'}_{22} y^{j'}_{22} z^{k'}_{22}\, e^{-\frac{(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_1)^2}{2\sigma^2}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} e^{-\frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_2)^2}{2\sigma^2}}\, d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2 \tag{C.36}$$

mit

$$\Delta\phi = \phi_{\vec{l}_1,1}(t) + \phi_{\vec{l}_3,2}(t) - \phi_{\vec{l}_2,1}(t) - \phi_{\vec{l}_4,2}(t)\,. \tag{C.37}$$

Wir verwenden wieder die Substitution (C.15) und (C.16) und erhalten

$$J^{11,22}_{12,34} = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\phi}}{2\pi^2} \int d^3\mathbf{k}\, k^{-2}\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)} I_x I_y I_z I'_x I'_y I'_z \tag{C.38}$$

mit

$$I_y = \int dy_{11}\, y^j_{11}\, e^{-\frac{y^2_{11}}{2\sigma^2}}\, e^{ik_y y_{11}} \tag{C.39}$$

$$I'_y = \int dy_{22}\, y^{j'}_{22}\, e^{-\frac{y^2_{22}}{2\sigma^2}}\, e^{-ik_y y_{22}}\ , \tag{C.40}$$

analog die anderen Integrale. Die Integration führen wir unter Verwendung von (C.20) und (C.21) aus und erhalten z. B.

$$I_y = \left(\frac{i\sigma}{\sqrt{2}}\right)^j \sqrt{2\pi\sigma^2}\, e^{-\frac{k_y^2\sigma^2}{2}}\, j! \sum_{s=0}^{[\frac{j}{2}]} \frac{(-1)^s(\sqrt{2}k_y\sigma)^{j-2s}}{s!(j-2s)!}\ . \tag{C.41}$$

Um die Integration über $d^3\mathbf{k}$ ausführen zu können, benutzen wir den Trick (C.25) und erhalten

$$J^{11,22}_{12,34} = \frac{\sigma^2}{\pi^2}\, e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\phi} \int_0^1 d\lambda\, \lambda^{-3} J_x J_y J_z \tag{C.42}$$

mit

$$\begin{aligned} J_y = {} & \left(\frac{i\sigma}{\sqrt{2}}\right)^j \left(\frac{i\sigma}{\sqrt{2}}\right)^{j'} (2\sigma^2\pi)\, j!\, j'! \sum_{s=0}^{[\frac{j}{2}]} \sum_{s'=0}^{[\frac{j'}{2}]} \frac{(-1)^{s-s'+j'}(\sqrt{2}\sigma)^n}{s!s'!(j-2s)!(j'-2s')!} \\ & \cdot \int dk_y\, k_y^n\, e^{ik_y(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)_y}\, e^{-\frac{k_y^2\sigma^2}{\lambda^2}} \end{aligned} \tag{C.43}$$

mit $n = j + j' - 2s - 2s'$. Die Integration liefert dann

$$\begin{aligned} J_y = {} & (2\sigma\pi^{3/2})\, \lambda\, j!\, j'! \sum_{s=0}^{[\frac{j}{2}]} \sum_{s'=0}^{[\frac{j'}{2}]} \frac{n!\, 2^{s+s'-j-j'}}{s!\, s'!\, (j-2s)!\, (j'-2s')!} \\ & \cdot \sum_{v=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{(-1)^{j+v}\, \sigma^{2(s+s'+v)}\, (\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)_y^{n-2v}}{v!(n-2v)!}\, e^{-\frac{\lambda^2}{4\sigma^2}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)_y^2}\, \lambda^{2(n-v)}\ , \end{aligned} \tag{C.44}$$

so daß wir schließlich erhalten:

$$J^{11,22}_{12,34} = (8\sigma^5\pi^{5/2})\, e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\phi} \sum_{r,r',u} B_{i,i',r,r',u} \sum_{s,s',v} B_{j,j',s,s',v} \sum_{t,t',w} B_{k,k',t,t',w}\, \mathrm{F}_\kappa \left(\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)^2}{4\sigma^2}\right) \tag{C.45}$$

mit

$$B_{j,j',s,s',v} = j!\, j'! \frac{n!\, 2^{s+s'-j-j'}}{s!\, s'!\,(j-2s)!\,(j'-2s')!} \frac{(-1)^{j+v}\, \sigma^{2(s+s'+v)}\, (\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)_y^{n-2v}}{v!(n-2v)!} \tag{C.46}$$

und

$$\kappa = m+n+o-u-v-w\ , \tag{C.47}$$
$$m = i+i'-2r-2r'\ , \tag{C.48}$$
$$n = j+j'-2s-2s'\ , \tag{C.49}$$
$$o = k+k'-2t-2t'\ . \tag{C.50}$$

F_κ ist wieder die unvollständige Gamma Funktion (C.31).

C.3 Austausch-Integrale für generalisierte Gauß-Funktionen

Zu berechnen sind die Integrale der Form

$$K^{12,21}_{12,34} = \langle \chi_{\vec{l}_1,1}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{\vec{l}_3,2}(\mathbf{r}_2)| \frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} |\chi_{\vec{l}_2,2}(\mathbf{r}_1)\, \chi_{\vec{l}_4,1}(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{C.51}$$

$$= \iint x_{11}^{l_{1x}} y_{11}^{l_{1y}} z_{11}^{l_{1z}} x_{22}^{l_{3x}} y_{22}^{l_{3y}} z_{22}^{l_{3z}} x_{12}^{l_{2x}} y_{12}^{l_{2y}} z_{12}^{l_{2z}} x_{21}^{l_{4x}} y_{21}^{l_{4y}} z_{21}^{l_{4z}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}$$
$$\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\phi}\, e^{\frac{-\mathbf{r}_{11}^2}{4s^*\sigma_o}}\, e^{\frac{-\mathbf{r}_{22}^2}{4s^*\sigma_o}}\, e^{\frac{-\mathbf{r}_{12}^2}{4s\sigma_o}}\, e^{\frac{-\mathbf{r}_{21}^2}{4s\sigma_o}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\cdot\mathbf{P}_{21}}\ . \tag{C.52}$$

Dabei haben wir die Bezeichnungen $x_{21} = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1)_x$ und $\mathbf{P}_{21} = \mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1$ verwendet, ferner

$$\Delta\phi = \phi_{\vec{l}_1,1}(t) + \phi_{\vec{l}_3,2}(t) - \phi_{\vec{l}_2,2}(t) - \phi_{\vec{l}_4,1}(t)\ . \tag{C.53}$$

Problematisch ist, daß in (C.52) dasselbe Pion einmal um $\mathbf{R}_1$ und gleichzeitig auch um $\mathbf{R}_2$ zentriert ist. Wir verwenden daher eine verallgemeinerte Gauß'sche Produktformel:

$$\boxed{x_{11}^{l_{1x}}\, x_{12}^{l_{2x}}\, e^{-\alpha_1\mathbf{r}_{11}^2}\, e^{-\alpha_2\mathbf{r}_{12}^2} = e^{-\frac{\alpha_1\alpha_2}{\gamma}\mathbf{R}_{12}^2} \sum_{i=0}^{l_{1x}+l_{2x}} f(i, l_{1x}, l_{2x}, Q_{1x}, Q_{2x})\, x_{1Q}^i\, e^{-\gamma\mathbf{r}_{1Q}^2}} \tag{C.54}$$

mit

$$f(i,l,m,A,B) = \sum_{j=\max(0,i-m)}^{\min(i,l)} \frac{l!\,m!\,A^{l-j}\,B^{m-i+j}}{j!\,(l-j)!\,(i-j)!\,(m-i+j)!}\,, \tag{C.55}$$

$$\mathbf{Q} = \frac{\alpha_1\mathbf{R}_1 + \alpha_2\mathbf{R}_2}{\alpha_1+\alpha_2}\,, \tag{C.56}$$

sowie $Q_{1x} = (\mathbf{Q}-\mathbf{R}_1)_x$, $\gamma = \alpha_1+\alpha_2$, $\mathbf{R}_{12} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ und $\mathbf{r}_{1Q} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{Q}$. Wir erhalten daher:

$$\begin{aligned} K_{12,34}^{12,21} = {} & e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\phi}\, e^{-\frac{\mathbf{R}_{12}^2}{4\sigma_o^2}} \sum_{i=0}^{l_{1x}+l_{2x}} f(i,l_{1x},l_{2x},Q_{1x}^*,Q_{2x}^*) \sum_{j=0}^{l_{1y}+l_{2y}} f(j,l_{1y},l_{2y},Q_{1y}^*,Q_{2y}^*) \\ & \sum_{k=0}^{l_{1z}+l_{2z}} f(k,l_{1z},l_{2z},Q_{1z}^*,Q_{2z}^*) \sum_{i'=0}^{l_{3x}+l_{4x}} f(i',l_{3x},l_{4x},Q_{2x},Q_{1x}) \\ & \sum_{j'=0}^{l_{3y}+l_{4y}} f(j',l_{3y},l_{4y},Q_{2y},Q_{1y}) \sum_{k'=0}^{l_{3z}+l_{4z}} f(k',l_{3z},l_{4z},Q_{2z},Q_{1z}) \cdot I \end{aligned} \tag{C.57}$$

mit dem Integralteil

$$\mathrm{I} = \iint x_{1Q^*}^i y_{1Q^*}^j z_{1Q^*}^k x_{2Q}^{i'} y_{1Q}^{j'} z_{1Q}^{k'}\, e^{-\frac{\mathbf{r}_{1Q^*}^2}{2\sigma^2}}\, e^{-\frac{\mathbf{r}_{2Q}^2}{2\sigma^2}}\, \frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_{1Q^*}-\mathbf{r}_{2Q}+\mathbf{Q}^*-\mathbf{Q})\cdot\mathbf{P}_{21}}\,. \tag{C.58}$$

Aus

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{2\sigma_o}(s^*\mathbf{R}_1 + s\mathbf{R}_2) \tag{C.59}$$

folgt

$$\mathbf{Q}^* - \mathbf{Q} = \frac{-i\hbar t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{R}_{21}\,. \tag{C.60}$$

Zur Elimination des Coulomb - Terms benutzen wir wieder (C.15):

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} = \frac{1}{2\pi^2}\int k^{-2}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{1Q^*}}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{2Q}}\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{Q}^*-\mathbf{Q})}\, d^3\mathbf{k}\,. \tag{C.61}$$

Einsetzen ergibt

$$I = \frac{1}{2\pi^2} e^{\frac{t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{R}_{21}\cdot\mathbf{P}_{21}} \int d^3\mathbf{k}\, k^{-2}\, e^{\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{21}}\, I_x I_y I_z I_x' I_y' I_z' \tag{C.62}$$

mit

$$I_y = \iint dy_{1Q^*}\, y_{1Q^*}^j\, e^{\frac{-y_{1Q^*}^2}{2\sigma^2}}\, e^{ik_y y_{1Q^*}}\, e^{\frac{i}{\hbar}y_{1Q^*}(\mathbf{P}_{21})_y}\,, \tag{C.63}$$

$$I_y' = \iint dy_{2Q}\, y_{2Q}^{j'}\, e^{\frac{-y_{2Q}^2}{2\sigma^2}}\, e^{-ik_y y_{2Q}}\, e^{\frac{-i}{\hbar}y_{2Q}(\mathbf{P}_{21})_y}\,. \tag{C.64}$$

Die Ortsintegration unter Verwendung von (C.20) liefert

$$I_y = \left(\frac{\mathrm{i}\sigma}{\sqrt{2}}\right)^j \sqrt{2\pi\sigma^2}\, e^{-\frac{(\mathbf{k}')_y^2\sigma^2}{2}} j! \sum_{s=0}^{\left[\frac{j}{2}\right]} \frac{(-1)^s(\sqrt{2}k'_y\sigma)^{j-2s}}{s!(j-2s)!}\,, \tag{C.65}$$

$$I'_y = \left(\frac{\mathrm{i}\sigma}{\sqrt{2}}\right)^{j'} \sqrt{2\pi\sigma^2}\, e^{-\frac{(\mathbf{k}')_y^2\sigma^2}{2}} j'! \sum_{s'=0}^{\left[\frac{j'}{2}\right]} \frac{(-1)^{j'-s'}(\sqrt{2}k'_y\sigma)^{j'-2s'}}{s'!(j'-2s')!} \tag{C.66}$$

mit $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1)/\hbar$. Mit der Substitution (C.25) erhalten wir

$$I = \frac{\sigma^2}{\pi^2} e^{\frac{t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{R}_{21}\cdot\mathbf{P}_{21}}\, e^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}\mathbf{P}_{21}^2} \int_0^1 d\lambda\, \lambda^{-3}\, J_x J_y J_z \tag{C.67}$$

mit

$$J_y = \left(\frac{\mathrm{i}\sigma}{\sqrt{2}}\right)^j \left(\frac{\mathrm{i}\sigma}{\sqrt{2}}\right)^{j'} (2\sigma^2\pi)\, j!\, j'! \sum_{s=0}^{\left[\frac{j}{2}\right]} \sum_{s'=0}^{\left[\frac{j'}{2}\right]} \frac{(-1)^{s-s'+j'}(\sqrt{2}\sigma)^n}{s!s'!(j-2s)!(j'-2s')!}$$
$$\cdot \int dk_y\, (k'_y)^n e^{-\frac{k_y^2\sigma^2}{\lambda^2}}\, e^{\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}k_y(\mathbf{R}_{21})_y}\, e^{-\frac{2\sigma^2}{\hbar}k_y(\mathbf{P}_{21})_y} \tag{C.68}$$

und $n = j + j' - 2s - 2s'$. Wir führen eine Binomialentwicklung gemäß

$$(k'_y)^n = \left(k_y + \frac{(\mathbf{P}_{21})_y}{\hbar}\right)^n = n! \sum_{\nu=0}^{n} \frac{1}{\nu!(n-\nu)!} k_y^\nu \left(\frac{(\mathbf{P}_{21})_y}{\hbar}\right)^{n-\nu} \tag{C.69}$$

durch und erhalten nach Integration über dk_y

$$J_y = (2\sigma\pi^{3/2})\,\lambda\, j!\, j'! \sum_{s=0}^{\left[\frac{j}{2}\right]} \sum_{s'=0}^{\left[\frac{j'}{2}\right]} \frac{\mathrm{i}^{j+j'}\,(-1)^{s-s'+j'}\, n!}{s!\, s'!\, (j-2s)!\, (j'-2s')!}$$
$$\cdot \sum_{\nu=0}^{n} \frac{2^{-(s+s'+\nu)}}{(n-\nu)!} \left(\frac{(\mathbf{P}_{21})_y}{\hbar}\right)^{n-\nu} \sum_{v=0}^{\left[\frac{\nu}{2}\right]} \frac{\sigma^{2(j+j'-s-s'+v-\nu)}\, b_y^{\nu-2v}}{v!\,(\nu-2v)!} \lambda^{2(\nu-v)}\, e^{\frac{\lambda^2 b_y^2}{4\sigma^2}} \tag{C.70}$$

mit

$$b_y = \frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}(\mathbf{R}_{21})_y - \frac{2\sigma^2}{\hbar}(\mathbf{P}_{21})_y\,. \tag{C.71}$$

Damit wird

$$I = (8\sigma^5\pi^{5/2})\, e^{\frac{t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{R}_{21}\cdot\mathbf{P}_{21}}\, e^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}\mathbf{P}_{21}^2} \sum_{r,r',\mu,u} i!\, i'!\, \mathrm{C}_{i,i',r,r',\mu,u}$$
$$\cdot \sum_{s,s',\nu,v} j!\, j'!\, \mathrm{C}_{j,j',s,s',\nu,v} \sum_{t,t',\rho,w} k!\, k'!\, \mathrm{C}_{k,k',t,t',\rho,w}\, \mathrm{F}_\kappa \left(\frac{-b^2}{4\sigma^2}\right) \tag{C.72}$$

mit

$$\mathrm{C}_{j,j',s,s',\nu,v} = \frac{\mathrm{i}^{j+j'}\,(-1)^{s-s'+j'}\,n!}{s!\,s'!\,(j-2s)!\,(j'-2s')!}\,\frac{2^{-(s+s'+\nu)}}{(n-\nu)!}\left(\frac{(\mathbf{P}_{21})_y}{\hbar}\right)^{n-\nu}\frac{\sigma^{2(j+j'-s-s'+v-\nu)}\,b_y^{\nu-2v}}{v!\,(\nu-2v)!} \tag{C.73}$$

und

$$\kappa = \mu+\nu+\rho-u-v-w\;. \tag{C.74}$$

Wir definieren

$$\begin{aligned}
\Theta_i &= i!\,f(i,l_{1x},l_{2x},Q^*_{1x},Q^*_{2x})\;, \quad \Theta_{i'} = i'!\,f(i',l_{3x},l_{4x},Q_{2x},Q_{1x})\;,\\
\Theta_j &= j!\,f(j,l_{1y},l_{2y},Q^*_{1y},Q^*_{2y})\;, \quad \Theta_{j'} = j'!\,f(j',l_{3y},l_{4y},Q_{2y},Q_{1y})\;,\\
\Theta_k &= k!\,f(k,l_{1z},l_{2z},Q^*_{1z},Q^*_{2z})\;, \quad \Theta_{k'} = k'!\,f(k',l_{3z},l_{4z},Q_{2z},Q_{1z})\;.
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
K^{12,21}_{12,34} = (8\sigma^5\pi^{5/2})\,e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta\phi}\,e^{-\frac{\mathbf{R}^2_{12}}{4\sigma_o^2}}\,e^{\frac{t}{2m\sigma_o^2}\mathbf{R}_{21}\cdot\mathbf{P}_{21}}\,e^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}\mathbf{P}^2_{21}} \sum_{i,i',r,r',\mu,u}\Theta_i\,\Theta_{i'}\,\mathrm{C}_{i,i',r,r',\mu,u}\\
\cdot\sum_{j,j',s,s',\nu,v}\Theta_j\,\Theta_{j'}\,\mathrm{C}_{j,j',s,s',\nu,v}\sum_{k,k',t,t',\rho,w}\Theta_k\,\Theta_{k'}\,\mathrm{C}_{k,k',t,t',\rho,w}\,\mathrm{F}_\kappa\left(\frac{-b^2}{4\sigma^2}\right)\;.
\end{aligned} \tag{C.75}$$

C.4 Normierung und Überlapp

Aus der Einteilchenamplitude

$$\chi_{\vec{l}}(\mathbf{r},t) = (\mathbf{r}-\mathbf{R})_x^{l_x}(\mathbf{r}-\mathbf{R})_y^{l_y}(\mathbf{r}-\mathbf{R})_z^{l_z}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{P}(t)\cdot\mathbf{r}-\phi_{\vec{l}}(t)\right)-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R}(t))^2}{4s(t)\sigma_o}\right) \tag{C.76}$$

mit

$$\phi_{\vec{l}}(t) = \int_0^t E^{\mathrm{kin}}(\tau)\,d\tau + \hbar\,(l_x+l_y+l_z+3/2)\,\arctan\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_o^2}\right) \tag{C.77}$$

berechnen wir die Normierung

$$\mathcal{N}_{\vec{l}}^{-1} = \int(\mathbf{r}-\mathbf{R})_x^{2l_x}(\mathbf{r}-\mathbf{R})_y^{2l_y}(\mathbf{r}-\mathbf{R})_z^{2l_z}\,e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})^2}{2\sigma^2}}\,d^3(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \tag{C.78}$$

mittels

$$\boxed{\int dx\,x^n\,e^{-ax^2} = \begin{cases} 0 & \text{falls n ungerade}\\ a^{-\frac{n+1}{2}}\,\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) & \text{falls n gerade}\end{cases}} \tag{C.79}$$

und

$$\Gamma(n) = (n-1)!\;, \tag{C.80}$$

$$\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi}\;, \tag{C.81}$$

$$n!! = n\,(n-2)\,(n-4)\ldots\;. \tag{C.82}$$

Wir erhalten

$$\mathcal{N}_{\vec{l}} = \frac{(2\pi\sigma^2)^{-3/2}\,\sigma^{-2(l_x+l_y+l_z)}}{(2l_x-1)!!\,(2l_y-1)!!\,(2l_z-1)!!}\,. \tag{C.83}$$

Die 2- Teilchenfunktion sei

$$\Psi_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t) = 2^{-1/2}\sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_1,\vec{l}_2}}\left(\chi_{\vec{l}_1,1}(\mathbf{r}_1,t)\,\chi_{\vec{l}_2,2}(\mathbf{r}_2,t) + \chi_{\vec{l}_2,2}(\mathbf{r}_1,t)\,\chi_{\vec{l}_1,1}(\mathbf{r}_2,t)\right)\,. \tag{C.84}$$

Ihre Norm ist

$$\mathcal{N}^{-1}_{\vec{l}_1,\vec{l}_2} = \mathcal{N}^{-1}_{\vec{l}_1}\,\mathcal{N}^{-1}_{\vec{l}_2} + |S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2}|^2 \tag{C.85}$$

mit dem Überlappintegral

$$S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2} \equiv \langle\chi_{\vec{l}_1,1}|\chi_{\vec{l}_2,2}\rangle\,. \tag{C.86}$$

Ausgeschrieben erhalten wir

$$S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2} = e^{\frac{i}{\hbar}(\phi_{\vec{l}_1,1}-\phi_{\vec{l}_2,2})}\int d^3\mathbf{r}\,x_1^{l_{1x}}\,y_1^{l_{1y}}\,z_1^{l_{1z}}\,x_2^{l_{2x}}\,y_2^{l_{2y}}\,z_2^{l_{2z}}\,e^{\frac{-\mathbf{r}_1^2}{4s^*\sigma_o}}\,e^{\frac{-\mathbf{r}_2^2}{4s\sigma_o}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\mathbf{P}_{21}} \tag{C.87}$$

mit $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}-\mathbf{R}_1$, $x_1 = (\mathbf{r}-\mathbf{R}_1)_x$ und $\mathbf{P}_{21} = \mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1$. Wir definieren

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{2\sigma_o}(\mathbf{R}_1\,s + \mathbf{R}_2\,s^*) \tag{C.88}$$

und erhalten unter Verwendung des Produktsatzes (C.54)

$$\begin{aligned} S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2} &= e^{\frac{i}{\hbar}(\phi_{\vec{l}_1,1}-\phi_{\vec{l}_2,2})}\,e^{-\frac{R_{21}^2}{8\sigma_o^2}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{P}_{21}} \\ &\cdot \sum_{i=0}^{l_{1x}+l_{2x}} f(i,l_{1x},l_{2x},Q_{1x},Q_{2x}) \sum_{j=0}^{l_{1y}+l_{2y}} f(j,l_{1y},l_{2y},Q_{1y},Q_{2y}) \\ &\cdot \sum_{k=0}^{l_{1z}+l_{2z}} f(k,l_{1z},l_{2z},Q_{1z},Q_{2z})\,\cdot I_x\cdot I_y\cdot I_z \end{aligned} \tag{C.89}$$

mit $\mathbf{R}_{21} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1$, $Q_{1x} = (\mathbf{Q}-\mathbf{R}_1)_x$ und der Funktion $f()$ aus (C.55). Wir berechnen

$$\begin{aligned} I_y &= \int dy_Q\,y_Q^j\,e^{-\frac{y_Q^2}{2\sigma^2}}\,e^{\frac{i y_Q}{\hbar}(\mathbf{P}_{21})_y} \\ &= \sqrt{2\pi\sigma^2}\,e^{\frac{-\sigma^2}{2\hbar^2}(\mathbf{P}_{21})_y^2}\left(\frac{i\sigma}{\sqrt{2}}\right)^j j!\sum_{v=0}^{[\frac{j}{2}]}\frac{(-1)^v(\sqrt{2}\sigma(\mathbf{P}_{21})_y/\hbar)^{j-2v}}{v!\,(j-2v)!} \end{aligned} \tag{C.90}$$

mit $y_Q = (\mathbf{r}-\mathbf{Q})_y$. Daraus folgt

$$S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2} = (2\pi\sigma^2)^{3/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}(\phi_{\vec{l}_1,1}-\phi_{\vec{l}_2,2})}\,e^{-\frac{R_{21}^2}{8\sigma_o^2}}\,e^{\frac{-\sigma^2}{2\hbar^2}\mathbf{P}_{21}^2}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{P}_{21}}\sum_{i,u}D_{i,u}\sum_{j,v}D_{j,v}\sum_{k,w}D_{k,w} \tag{C.91}$$

mit

$$D_{j,v} = \left(\frac{\mathrm{i}\sigma}{\sqrt{2}}\right)^j j!\,\frac{(-1)^v(\sqrt{2}\sigma(\mathbf{P}_{21})_y/\hbar)^{j-2v}}{v!\,(j-2v)!}\,f(j,l_{1y},l_{2y},Q_{1y},Q_{2y})\;. \tag{C.92}$$

Das Betragsquadrat lautet

$$|S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2}|^2 = (2\pi\sigma^2)^3\, e^{\frac{-1}{4\sigma_o^2}\left(\mathbf{R}_{21}-\frac{t}{m}\mathbf{P}_{21}\right)^2}\, e^{-\frac{\sigma_o^2}{\hbar^2}\mathbf{P}_{21}^2}\left|\sum_{i,u} D_{i,u}\right|^2\left|\sum_{j,v} D_{j,v}\right|^2\left|\sum_{k,w} D_{k,w}\right|^2 . \tag{C.93}$$

Unter Verwendung von (C.85) geben wir explizit die Norm der 2-Teilchen s-Funktion (C.1) an:

$$\mathcal{N}_{s,s}^{-1} = \mathcal{N}_s^{-2}\left(1 + e^{\frac{-1}{4\sigma_o^2}\left(\mathbf{R}_{21}-\frac{t}{m}\mathbf{P}_{21}\right)^2}\, e^{-\frac{\sigma_o^2}{\hbar^2}\mathbf{P}_{21}^2}\right) \tag{C.94}$$

mit der 1-Teilchen Normierung

$$\mathcal{N}_s^{-1} = (2\pi\sigma^2)^{3/2}\;. \tag{C.95}$$

Abschließend berechnen wir den Überlapp zweier beliebiger 2- Teilchen Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned} S_{1234}^{1212} &= \langle \Psi_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 2}|\Psi_{\vec{l}_3 1,\vec{l}_4 2}\rangle \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_1,\vec{l}_2}\mathcal{N}_{\vec{l}_3,\vec{l}_4}} \times \\ &\quad \langle \chi_{\vec{l}_1,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_2,2}(\mathbf{r}_2) + \chi_{\vec{l}_2,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_1,1}(\mathbf{r}_2)\,|\,\chi_{\vec{l}_3,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_4,2}(\mathbf{r}_2) + \chi_{\vec{l}_4,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_3,1}(\mathbf{r}_2)\rangle \\ &= \sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_1,\vec{l}_2}\mathcal{N}_{\vec{l}_3,\vec{l}_4}}\,\left(S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_3 1}\,S_{\vec{l}_2 2,\vec{l}_4 2} + S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_4 2}\,S_{\vec{l}_2 2,\vec{l}_3 1}\right)\;. \end{aligned} \tag{C.96}$$

Uns fehlt noch das Überlappintegral bei identischen Phasenraumkoordinaten:

$$\begin{aligned} S_{\vec{l}_1 1,\vec{l}_2 1} &= e^{\frac{i}{\hbar}(\phi_{\vec{l}_1,1}-\phi_{\vec{l}_2,1})}\int d^3\mathbf{r}\, x_1^i\, y_1^j\, z_1^k\, e^{\frac{-\mathbf{r}_1^2}{2\sigma^2}} \\ &= \begin{cases} e^{\frac{i}{\hbar}(\phi_{\vec{l}_1,1}-\phi_{\vec{l}_2,1})}\,\mathcal{N}_{(\vec{l}_1+\vec{l}_2)/2}^{-1} & \text{falls } i,\, j \text{ und } k \text{ gerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned} \tag{C.97}$$

mit $i = l_{1x} + l_{2x}$, $j = l_{1y} + l_{2y}$ und $k = l_{1z} + l_{2z}$.

C.5 Integrale der kinetischen Energie

Zu berechnen sind die Matrixelemente

$$T_{ij,kl} = \frac{-\hbar^2}{2m}\langle \Psi_{\vec{l}_i 1,\vec{l}_k 2}|\Delta_1 + \Delta_2|\Psi_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2}\rangle\;, \tag{C.98}$$

die wir auf folgende Weise separieren:

$$\begin{aligned}
T_{ij,kl} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_i,\vec{l}_k}\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}} \Big(&\langle\, \chi_{\vec{l}_i,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_k,2}(\mathbf{r}_2)|\Delta_1+\Delta_2|\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_l,2}(\mathbf{r}_2)\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_k,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_i,1}(\mathbf{r}_2)|\Delta_1+\Delta_2|\chi_{\vec{l}_l,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_2)\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_i,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_k,2}(\mathbf{r}_2)|\Delta_1+\Delta_2|\chi_{\vec{l}_l,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_2)\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_k,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_i,1}(\mathbf{r}_2)|\Delta_1+\Delta_2|\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_l,2}(\mathbf{r}_2)\rangle\Big) \\
= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_i,\vec{l}_k}\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}} \Big(&\langle\, \chi_{\vec{l}_i,1}|\Delta|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle\, S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_l,2} + S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_j,1}\,\langle\chi_{\vec{l}_k,2}|\Delta|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_k,2}|\Delta|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle\, S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_j,1} + S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_l,2}\,\langle\chi_{\vec{l}_i,1}|\Delta|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_i,1}|\Delta|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle\, S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_j,1} + S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\,\langle\chi_{\vec{l}_k,2}|\Delta|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_k,2}|\Delta|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle\, S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_j,1}\,\langle\chi_{\vec{l}_i,1}|\Delta|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle\Big) \qquad \text{(C.99)}
\end{aligned}$$

Wir führen die folgende Notation ein:

$$\begin{aligned}
\chi^{x++}_{\vec{l},2} &\equiv \chi_{(l_x+2,l_y,l_z),2}\ , \qquad & \chi^{x+}_{\vec{l},2} &\equiv \chi_{(l_x+1,l_y,l_z),2}\ , \\
\chi^{x--}_{\vec{l},2} &\equiv \chi_{(l_x-2,l_y,l_z),2}\ , \qquad & \chi^{x-}_{\vec{l},2} &\equiv \chi_{(l_x-1,l_y,l_z),2}\ ,
\end{aligned} \qquad \text{(C.100)}$$

analog für die anderen Komponenten. Wir berechnen ferner

$$\begin{aligned}
\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\chi_{\vec{l},2} = &\frac{-2\hbar^2\alpha^2}{m}\Big(\chi^{x++}_{\vec{l},2}+\chi^{y++}_{\vec{l},2}+\chi^{z++}_{\vec{l},2}\Big) \\
&+\frac{2\mathrm{i}\hbar\alpha}{m}\Big(P_{2x}\chi^{x+}_{\vec{l},2}+P_{2y}\chi^{y+}_{\vec{l},2}+P_{2z}\chi^{z+}_{\vec{l},2}\Big) \\
&+\Big(\frac{\hbar^2\alpha}{m}(2l_x+2l_y+2l_z+3)+\frac{P_2^2}{2m}\Big)\chi_{\vec{l},2} \\
&-\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\Big(l_xP_{2x}\chi^{x-}_{\vec{l},2}+l_yP_{2y}\chi^{y-}_{\vec{l},2}+l_zP_{2z}\chi^{z-}_{\vec{l},2}\Big) \\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(l_x(l_x-1)\,\chi^{x--}_{\vec{l},2}+l_y(l_y-1)\,\chi^{y--}_{\vec{l},2}+l_z(l_z-1)\,\chi^{z--}_{\vec{l},2}\Big)\ , \qquad \text{(C.101)}
\end{aligned}$$

wobei wir die Abkürzung

$$\alpha \equiv \frac{1}{4s(t)\sigma_o} \qquad \text{(C.102)}$$

verwendet haben. Wir erkennen, daß der Δ- Operator eine Basisfunktion in eine Linearkombination weiterer Basisfunktionen transformiert. Als Resultat erhalten wir folglich eine Linearkombination von Überlappintegralen, beispielsweise

$$\begin{aligned}
&\frac{-\hbar^2}{2m}\langle\chi_{\vec{l}_i,1}|\Delta|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle = \\
&\frac{-2\hbar^2\alpha^2}{m}\Big(S^{x++}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l2}+S^{y++}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l2}+S^{z++}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\Big)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \frac{2\mathrm{i}\hbar\alpha}{m}\left(P_{2x}\, S^{x+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + P_{2y}\, S^{y+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + P_{2z}\, S^{z+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\right)\\
&+ \frac{\hbar^2}{2m}\Big(2\alpha\,(2l_{lx} + 2l_{ly} + 2l_{lz} + 3) + \frac{P_2^2}{\hbar^2}\Big) S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\\
&- \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\left(l_{lx}P_{2x}\, S^{x-}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + l_{ly}P_{2y}\, S^{y-}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + l_{lz}P_{2z}\, S^{z-}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\right)\\
&- \frac{\hbar^2}{2m}\Big(l_{lx}(l_{lx}-1)\, S^{x--}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + l_{ly}(l_{ly}-1)\, S^{y--}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + l_{lz}(l_{lz}-1)\, S^{z--}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\Big) \qquad \text{(C.103)}
\end{aligned}
$$

mit

$$
S^{x++}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} \equiv S_{\vec{l}_i,1,(l_{lx}+2,l_{ly},l_{lz}),2} \quad \text{u. s. w.}, \qquad \text{(C.104)}
$$

Integrale einer Form, die wir bereits in (C.91) und (C.97) berechnet haben.

C.6 Integrale der Zeitableitungen

Zu berechnen sind die Matrixelemente

$$
D_{ij,kl} = \mathrm{i}\hbar\, \langle \Psi_{\vec{l}_i 1,\vec{l}_k 2} | \partial_t | \Psi_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2} \rangle\,. \qquad \text{(C.105)}
$$

Es gilt

$$
\partial_t \Psi_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2} = \left(\partial_t \sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}}\right)\, \tilde{\Psi}_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2} + \sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}}\, \left(\partial_t \tilde{\Psi}_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2}\right) \qquad \text{(C.106)}
$$

mit der unnormierten Wellenfunktion

$$
\tilde{\Psi}_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_l,2}(\mathbf{r}_2)\, + \chi_{\vec{l}_l,2}(\mathbf{r}_1)\,\chi_{\vec{l}_j,1}(\mathbf{r}_1)\Big)\,. \qquad \text{(C.107)}
$$

Den ersten Term in (C.106) schreiben wir um in

$$
\left(\partial_t \sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}}\right)\, \tilde{\Psi}_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2} = \frac{\partial_t \mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}}{2\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}}\, \Psi_{\vec{l}_j 1,\vec{l}_l 2} \qquad \text{(C.108)}
$$

und erhalten als ersten Beitrag des Matrixelements

$$
D^a_{ij,kl} = \frac{\mathrm{i}\hbar\, \left(\partial_t \mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}\right)}{2\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}}\, S^{1212}_{ikjl} \qquad \text{(C.109)}
$$

mit S^{1212}_{ikjl} aus (C.96). Wir berechnen

$$
\begin{aligned}
\partial_t \mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l} = -(\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l})^2 \Big(\; & S_{\vec{l}_l,2,\vec{l}_l,2}\, \mathrm{Re}\{\langle \chi_{\vec{l}_j,1} | \partial_t | \chi_{\vec{l}_j,1}\rangle\} + S_{\vec{l}_j,1,\vec{l}_j,1}\, \mathrm{Re}\{\langle \chi_{\vec{l}_l,2} | \partial_t | \chi_{\vec{l}_l,2}\rangle\}\\
+\; & S_{\vec{l}_l,1,\vec{l}_l,1}\, \mathrm{Re}\{\langle \chi_{\vec{l}_j,2} | \partial_t | \chi_{\vec{l}_j,2}\rangle\} + S_{\vec{l}_j,2,\vec{l}_j,2}\, \mathrm{Re}\{\langle \chi_{\vec{l}_l,1} | \partial_t | \chi_{\vec{l}_l,1}\rangle\}\\
+\; & S_{\vec{l}_j,2,\vec{l}_l,1}\, (\langle \partial_t\, \chi_{\vec{l}_j,1} | \chi_{\vec{l}_l,2}\rangle + \langle \chi_{\vec{l}_j,1} | \partial_t | \chi_{\vec{l}_l,2}\rangle)\\
+\; & S_{\vec{l}_j,1,\vec{l}_l,2}\, (\langle \partial_t\, \chi_{\vec{l}_j,2} | \chi_{\vec{l}_l,1}\rangle + \langle \chi_{\vec{l}_j,2} | \partial_t | \chi_{\vec{l}_l,1}\rangle)\Big)\,. \qquad \text{(C.110)}
\end{aligned}
$$

Den zweiten Term in (C.106) separieren wir auf dieselbe Weise, wie wir es mit dem kinetischen Term (C.99) getan haben, und erhalten

$$\begin{aligned}
D^b_{ij,kl} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sqrt{\mathcal{N}_{\vec{l}_i,\vec{l}_k}\mathcal{N}_{\vec{l}_j,\vec{l}_l}}\Big(& \langle\, \chi_{\vec{l}_i,1}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle\, S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_l,2} + S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_j,1}\,\langle\chi_{\vec{l}_k,2}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_k,2}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle\, S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_j,1} + S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_l,2}\,\langle\chi_{\vec{l}_i,1}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_i,1}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle\, S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_j,1} + S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\,\langle\chi_{\vec{l}_k,2}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle \\
&+ \langle\, \chi_{\vec{l}_k,2}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_j,1}\rangle\, S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + S_{\vec{l}_k,2,\vec{l}_j,1}\,\langle\chi_{\vec{l}_i,1}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle\Big)\ . \qquad \text{(C.111)}
\end{aligned}$$

Die Zeitableitung der Einteilchenfunktionen ergibt

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\chi_{\vec{l},1} = & \frac{-2\hbar^2\alpha^2}{m}\Big(\chi^{x++}_{\vec{l},2} + \chi^{y++}_{\vec{l},2} + \chi^{z++}_{\vec{l},2}\Big) \\
&+ \frac{2\mathrm{i}\hbar\alpha}{m}\Big(P_{2x}\chi^{x+}_{\vec{l},2} + P_{2y}\chi^{y+}_{\vec{l},2} + P_{2z}\chi^{z+}_{\vec{l},2}\Big) \\
&+ \Big(\frac{\hbar^2}{4m\sigma^2}(2l_x + 2l_y + 2l_z + 3) + \frac{P_2^2}{2m}\Big)\chi_{\vec{l},2} \\
&- \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\Big(l_xP_{2x}\chi^{x-}_{\vec{l},2} + l_yP_{2y}\chi^{y-}_{\vec{l},2} + l_zP_{2z}\chi^{z-}_{\vec{l},2}\Big) \\
&- \dot{\mathbf{P}}_2\mathbf{R}_2\,\chi_{\vec{l},2} - \Big(\dot{\mathbf{P}}_{2x}\chi^{x+}_{\vec{l},2} + \dot{\mathbf{P}}_{2y}\chi^{y+}_{\vec{l},2} + \dot{\mathbf{P}}_{2z}\chi^{z+}_{\vec{l},2}\Big)\ . \qquad \text{(C.112)}
\end{aligned}$$

Wir erhalten daher

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\,\langle\chi_{\vec{l}_i,1}|\partial_t|\chi_{\vec{l}_l,2}\rangle = & \frac{-2\hbar^2\alpha^2}{m}\Big(S^{x++}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + S^{y++}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + S^{z++}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\Big) \\
&+ \frac{2\mathrm{i}\hbar\alpha}{m}\Big(P_{2x}S^{x+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + P_{2y}S^{y+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + P_{2z}S^{z+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\Big) \\
&+ \Big(\frac{\hbar^2}{4m\sigma^2}(2l_x + 2l_y + 2l_z + 3) + \frac{P_2^2}{2m}\Big)S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} \\
&- \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\Big(l_xP_{2x}S^{x-}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + l_yP_{2y}S^{y-}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + l_zP_{2z}S^{z-}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\Big) \\
&- \dot{\mathbf{P}}_2\mathbf{R}_2\,S_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} - \Big(\dot{\mathbf{P}}_{2x}S^{x+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + \dot{\mathbf{P}}_{2y}S^{y+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2} + \dot{\mathbf{P}}_{2z}S^{z+}_{\vec{l}_i,1,\vec{l}_l,2}\Big) \qquad \text{(C.113)}
\end{aligned}$$

Literaturverzeichnis

[1] R. Hanbury Brown and R. Q. Twiss, Proc. Roy. Soc. (London) **A243**, 291 (1957)

[2] L. Mandel, E. Wolf, „Optical Coherence and Quantum Optics“, Cambridge University Press (1995)

[3] G. Goldhaber et al., Phys. Rev. **120**, 300 (1960)

[4] W. A. Zajc, Phys. Rev. D **35**, 11 (1987)

[5] H. Merlitz, D. Pelte, „Quantum correlations of bosons and fermions produced in heavy ion collisions“, Z. Phys. A **351**, 187 (1995)

[6] H. Merlitz, „Pionkorrelationen in der relativistischen Schwerionenphysik“, Diplomarbeit, Heidelberg (1994)

[7] G. Goebels, „Untersuchung der Bose-Einstein Korrelationen geladener Pionen in relativistischen Schwerionenkollisionen der Systeme Au+Au und Ni+Ni im Energiebereich von 1 AGeV bis 2 AGeV“, Dissertation, Heidelberg (1995)

[8] E. Häfele, „Untersuchung der Produktion geladener Pionen im System Au+Au bei 1 AGeV“, Dissertation, Heidelberg (1995)

[9] H. Merlitz and D. Pelte, „Bose-Einstein correlations of pion wavepackets“, Z. Phys. A **357**, 175 (1997)

[10] H. Merlitz and D. Pelte, „The role of the quantum dispersion in the Coulomb correction of Bose-Einstein correlations“, nucl-th/9708009, accepted for publication in Phys. Lett. B

[11] P. R. Holland, „The Quantum Theory of Motion“, Cambridge University Press (1993)

[12] S. Chandrasekhar, „Stochastic Problems in Physics and Astronomy“, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943)

[13] E. Nelson, „Derivation of the Schrödinger Equation from Newtonian Mechanics“, Phys. Rev. **150**, 1079 (1966)

[14] W. Weizel, „Ableitung der Quantentheorie aus einem klassischen, kausal determinierten Modell“, Z. Phys. **134**, 264 (1953)

[15] G. G. Comisar, „Brownian-Motion Model of Nonrelativistic Quantum Mechanics“, Phys. Rev. **138**, 1332 (1965)

[16] R. Balescu, „Statistical Dynamics“, Imperial College Press (1997)

[17] O. Nachtmann, „Elementarteilchenphysik“, 1991 Vieweg-Verlag

[18] A. Valentini, „Signal-locality, uncertainty and the subquantum Θ-theorem, II“, Phys. Lett. A **158**, 1 (1991)

[19] H. Primas, "Quantum mechanics, Chemistry and Reductionism“, Springer Verlag (1982)

[20] D. H. Boal, C. K. Gelbke and B. K. Jennings, „Intensity interferometry in subatomic physics“, Rev. Mod. Phys. **63**, 553 (1990)

[21] H. Stöcker, A. Gallmann and J. H. Hamilton, „Structure of Vacuum & Elementary Matter“, Proceedings of the International Conference on Nuclear Physics at the Turn of the Millenium, World Scientific (1997)

[22] R. Holzmann and the **TAPS** collaboration, GSI report GSI-94-1, 79 (1995)

[23] C. Sturtivant, Linear Multilinear Algebra **33**, 145 (1993)

[24] A. Nijenhuis and H. S. Wilf, "Combinatorial Algorithms", Academic Press, New York (1978).

[25] N. Metropolis, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)

[26] K. H. Hoffmann, M. Schreiber, „Computational Physics“, Springer Verlag (1996)

[27] W. Reisdorf and the **FOPI** collaboration, Nucl. Phys. A **612**, 493 (1997)

[28] P. J. Siemens and J. O. Rasmussen, Phys. Rev. Lett. **42**, 880 (1979)

[29] S. Pratt, Phys. Rev. Lett. **53**, 1219 (1984)

[30] W. A. Zajc, Nuclear Physics A **525**, 315c (1991)

[31] F. Yano and S. Koonin, Phys. Lett. **78** B, 556 (1978)

[32] M. I. Podgoretsky, Sov. J. Nucl. Phys. **37**, 272 (1983)

[33] U. Heinz, B. Tomasik, U. A. Wiedemann und Wu Y. F., Acta Phys. Slov. **47** 81 (1997)

[34] M. C. Chu, S. Gardner, T. Matsui and R. Seki, Phys. Rev. C **50**, 3079 (1994)

[35] C. Hartnack, „Beschreibung von Flußeffekten und Teilchenproduktion in relativistischen Schwerionenstößen“, Dissertation, GSI Report 93-05 (1993)

[36] T.H.R. Skyrme, Nucl. Phys. **9**, 615 (1959)

[37] J. Aichelin and H. Stöcker, Phys. Lett. B **176**, 14 (1986)
J. Aichelin, Phys. Rep. **202**, 233 (1991)

[38] P. Danielewicz, Phys. Rev. C **53**, 249 (1996)

[39] E. Clementi, „Modern Techniques in Computational Chemistry: MOTECC-89“, ESCOM Science Publishers B.V. (1989)

[40] R. W. Hockney and J. W. Eastwood, „Computer Simulation using Particles“, New York, (1981)

[41] C. Leforestier et al., „A Comparison of Different Propagation Schemes for the Time Dependent Schrödinger Equation“, Journal of Computational Physics **94**, 59 (1991)

[42] G. Baym and P. Braun-Munzinger, „Physics of Coulomb Corrections in Hanbury-Brown Twiss Interferometry in Ultrarelativistic Heavy Ion Collisions“, in den Proceedings zur „Quark Matter '96“, Elsevier Science B.V., S. 286c (1996)

[43] R.G. Newton, „Scattering Theory of Waves and Particles“, Mc Graw-Hill (1966)

[44] J. S. Arponen, R. F. Bishop, E. Pajanne and N. I. Robinson, „Extended coupled-cluster method I...“ and „...II“, Phys. Rev. A **36**, 2519 and 2539 (1987)

[45] U. Manthe, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, „Wave-packet dynamics within the multiconfiguration Hartree framework: General aspects and application to NOCl“, J. Chem. Phys. **97**, 3199 (1992)

[46] D. Pelte and the FOPI Collaboration, „Charged pion production in Au on Au collisions at 1 AGeV“, Z. Phys. A **357**, 215 (1997)

[47] D. Bohm, „A suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of „Hidden“ Variables, I and II“, Phys. Rev. **85**, 166 and 180 (1952)

[48] D. Bohm, „Proof that Probability Density Approaches $|\Psi|^2$ in Causal Interpretation of the Quantum Theory“, Phys. Rev. **89**, 458 (1953)

[49] L. Verlet, Phys. Rev. **159**, 88 (1967)

[50] D. G. Currie, T. F. Jordan and E. C. G. Sudarshan, „Relativistic invariance and Hamiltonian Theories of interacting particles“, Rev. Mod. Phys. **35**, 350 (1963)

[51] J. S. Bell, „Wider die Messung“, Phys. Blätter Jahrgang 48, S. 267 (1992)

[52] T. Maudlin, „Discussion: Why Bohm's theory solves the measurement problem“, Philosophy of Science **62**, 479 (1995)

[53] J. D. Bjorken, S. D. Drell, „Relativistische Quantenmechanik“, B·I- Verlag, Mannheim (1966)

[54] B. Gerlach, D. Gromes, J. Petzold, „Eine kritische Analyse der Ladungsdichte des Klein-Gordon-Feldes“, Z. Phys. **202**, 401 (1967)

[55] J. Tolksdorf, „Das Pfadintegral eines relativistisch bewegten Teilchens“, Diplomarbeit, Heidelberg (1989)

[56] R. K. Puri, E. Lehmann, A. Faessler, S. W. Huang, „Relativistic effects in heavy-ion collisions at SIS energies“, Z. Phys. A **351**, 59 (1995)

[57] S. Pratt, Phys. Lett. B **301**, 159 (1993)

[58] J. Barette and the E877 Collaboration, Phys. Rev. Lett. **78**, 2916 (1997)

Danksagung

Hiermit sei allen Personen gedankt, die in irgendeiner Form zur Durchführung dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. D. Pelte für die gute Betreuung der Arbeit und seine ständige Diskussionsbereitschaft.

Den Mitgliedern der Heidelberger Arbeitsgruppe, M. Eskef, G. Goebels, E. Haefele, M. Korolija, Y. Leifels, S. Mohren und M. Stockmeier danke ich für die angenehme und freundliche Arbeitsatmosphäre.

Mein Dank gilt ebenso den übrigen Mitgliedern der FOPI-Kollaboration, insbesondere Z. Basrak, N. Herrmann, K. D. Hildenbrand, B. Hong, J. Kecskemeti, R. Kotte, R. Kutsche, W. Reisdorf und Z. Seres, sowie den anderen, die nicht namentlich erwähnt werden können.

Darüberhinaus danke ich für fachliche Diskussionen den Frankfurter Theoretikern J. Konopka, S. Soff und H. Stöcker, weiter C. Hartnack (Nantes), I. Bender (Heidelberg), Heidelberg's Theoretischen Chemikern W. Becken, L. Cederbaum, H.-D. Meyer und J. Schirmer, sowie T. Csörgő (Budapest), R. Bishop (Manchester) und D. Mukherjee (Kalkutta), ferner den Heidelberger Wissenschaftsphilosophen M. Carrier und J.-H. Rhee.

Ich danke der Gruppe *Biophysik der Makromoleküle* von J. Langowski am Deutschen Krebsforschungszentrum, in der ich 6 Monate mitarbeiten durfte, für die freundliche Arbeitsatmosphäre und für die ausgezeichnete Zusammenarbeit. Ohne die dort gelernten Programmiertechniken wäre die Realisierung der vorliegenden Arbeit erheblich schwieriger gewesen.

M. Stockmeier hat beim Korrekturlesen geholfen und ist daher selbstverständlich für alle noch verbliebenen Tippfehler verantwortlich.