Schlußbetrachtung

In der vorliegenden Arbeit wurde das Auftreten von Schalen- und Superschalen-Oszillationen in endlichen Fermionen-Systemen untersucht. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Untersuchung der Materialabhängingkeit dieser Effekte im Rahmen des homogenen Jellium-Modells und der Interpretation der so gewonnenen Ergebnisse mittels einer semiklassischen Analyse.

Zunächst haben wir uns davon überzeugt, daß dem Cluster-Problem kein exakt lösbares Problem zugrundeliegt. Dazu versuchten wir, die postulierte Pseudoquantenzahl im Sinne einer klassischen Symmetrie bzw. einer Supersymmetrie zu deuten. Schließlich zeigten wir, daß sich auch mittels numerischer Rechnungen für große Cluster kein Potential mit der vermuteten Entartung konstruieren läßt.

Ein wichtiger Teil der Arbeit, der naturgemäß in der vorliegenden Niederschrift kaum vertreten ist, war die Entwicklung effizienter Programme, welche die numerische Arbeit geleistet haben. Daß die Umsetzung von Rechnungen, die auf dem Papier elegant sind, recht zeitaufwendig und anspruchsvoll sein kann, zeigte sich insbesondere bei der Implementierung der zentralen Elemente des Jellium-Programms: der Integrations-Routine für die radiale Kohn-Sham Gleichung bzw. bei der Quadratur der radialen Poisson-Gleichung für unstetige Ladungsdichten. Um den im Vergleich zur Gesamtenergie sehr kleinen oszillierenden Anteil $\tilde{E}(N)$ zu bestimmen, mußten besondere Anforderungen an die Numerik gestellt werden: Schon durch kleine Kontaminationen mit systematischen- oder Abschneide-Fehlern wurden sämtliche Resultate ruiniert.

Besonders für den Unerfahrenen hält solch eine Arbeit viele unerwartete Probleme bereit. Hat man jedoch Glück, will heißen einen Betreuer mit unglaublicher Intuition, so besteht die Aussicht, daß man schließlich selbst ein Gefühl dafür entwickelt, wie man mittels einfacher Abschätzungen Probleme *vor* ihrem Auftreten erkennt, und — falls das

Programm doch nicht so arbeitet, wie erwartet — welches die Größen sind, die man sich ansehen sollte. Nicht nur in diesem Sinne trifft folgende Einsicht zu (zitiert nach [68]):

> The road to wisdom? Well, it's plain
> and simple to express:
>
> Err
> and err
> and err again
> but less
> and less
> and less.
>
> Piet Hein

Nachdem wir schließlich einen sehr effizienten Code zur Verfügung hatten, konnten wir eine große Zahl von Rechnungen für Jellium-Cluster unterschiedlicher Dichten und in einem weiten Massenbereich durchführen. Das versetzte uns in die Lage, die Schalen und Superschalen-Struktur als Funktion der Jellium-Dichte zu untersuchen. Mittels einer Skalenanalyse kombiniert mit einer Thomas-Fermi-Abschätzung konnten wir den inversen Wigner-Seitz Radius als charakteristischen Parameter für $\tilde{E}(N)$ identifizieren. Die dadurch nahegelegte Analyse der Schalen und Superschalen als Funktion von $1/r_s$ ergab, daß die Minima in $\tilde{E}(N)$ praktisch unabhängig vom betrachteten Jellium sind, während die Superschalen eine Verschiebung proportional zu $1/r_s$ aufweisen.

Um dieses Verhalten zu verstehen, haben wir im zweiten Teil der Arbeit die semiklassische Bestimmung des oszillierenden Anteils der Gesamtenergie untersucht. Dabei verwendeten wir den Pfadintegral Formalismus von Gutzwiller. Wir konnten damit die Resultate von Balian und Bloch für die Zustandsdichte einer sphärischen Kavität reproduzieren. Anschließend bestimmten wir die für das Cluster-Problem relevante Größe: den oszillierenden Anteil der Gesamtenergie für eine Familie wachsender Cluster-Potentiale. Dabei fanden wir, daß die Entwicklung nach periodischen Bahnen für $\tilde{E}(N)$ rasch konvergiert, was die Einführung einer künstlichen Dämpfung (wie im Fall der Zustandsdichte) überflüssig macht.

Als erste Anwendung der semiklassischen Entwicklung untersuchten wir die Auswirkung einer Kontraktion der Cluster als Funktion ihrer Größe auf die Schalen- und Superschalen-Struktur. Eine solche Kontraktion war in einigen EXAFS-Untersuchungen an Clustern, die in eine Matrix eingebettet waren, gefunden worden, andere Untersuchungen kamen dagegen zu dem Ergebnis, daß keine Kontraktion auftritt. Mit Hilfe unserer semiklassischen Formel und mittels numerischer Rechnungen konnten wir zeigen, daß selbst eine starke Kontraktion der Cluster keinen Einfluß auf die Position der Oszillationen in $\tilde{E}(N)$ hat. Daher ist es für die Untersuchung der Schalen- und Superschalen-Struktur unerheblich, ob eine Gitter-Kontraktion für kleine Cluster auftritt oder nicht.

Als nächste Anwendung betrachteten wir die Abhängigkeit des oszillierenden Anteils der Gesamtenergie von der Potential-Form an der Cluster-Oberfläche. Die Grundidee war dabei, die Cluster-Potentiale um den Grenzfall der sphärischen Kavität zu entwickeln (leptoderme Entwicklung). Unter der Annahme, daß die radiale Wirkung eine Entwicklung nach der Ausdehnung a des Potential-Randes besitzt, konnten wir ableiten, daß eine Änderung des Potentials an der Cluster-Oberfläche in führender Ordnung lediglich eine Phasenverschiebung in der POE hervorruft.

Konkrete Formeln für diese Verschiebung haben wir für Potentiale vom Woods-Saxon Typ hergeleitet. Im Sinne einer leptodermen Entwicklung haben wir dabei die semiklassischen Integrale im Randparameter a linearisiert. Um zu zeigen, daß die leptoderme Entwicklung im physikalisch relevanten Bereich anwendbar ist, haben wir die Cluster-Potentiale aus unseren selbstkonsistenten Rechnungen mit Woods-Saxon Potentialen gefittet. Der Vergleich der Verschiebung der Superschalen aus den Jellium-Rechnungen mit den aus der Semiklassik bestimmten Werten zeigte, daß unsere Linearisierung im Randparameter a tatsächlich zulässig ist.

Nachdem wir uns so von der Gültigkeit der leptodermen Entwicklung überzeugt haben, können wir umgekehrt von unseren Formeln ablesen, durch welche Eigenschaften des Cluster-Potentials die Position der Superschalen bestimmt ist: einerseits (und hauptsächlich) durch die Ausdehnung a des Potential-Randes in Einheiten des Wigner-Seitz Radius sowie durch den Topftiefe-Parameter P_F.