

Kernstrukturrechnungen auf Basis realistischer NN-Wechselwirkungen



Robert Roth¹

**in Zusammenarbeit mit
H. Feldmeier² und T. Neff²**

¹ *Clarendon Laboratory, University of Oxford, UK*

² *Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt*

Mission Statement

Beschreibung der Struktur
von Kernen ausgehend von einer
realistischen Nukleon-Nukleon-
Wechselwirkung

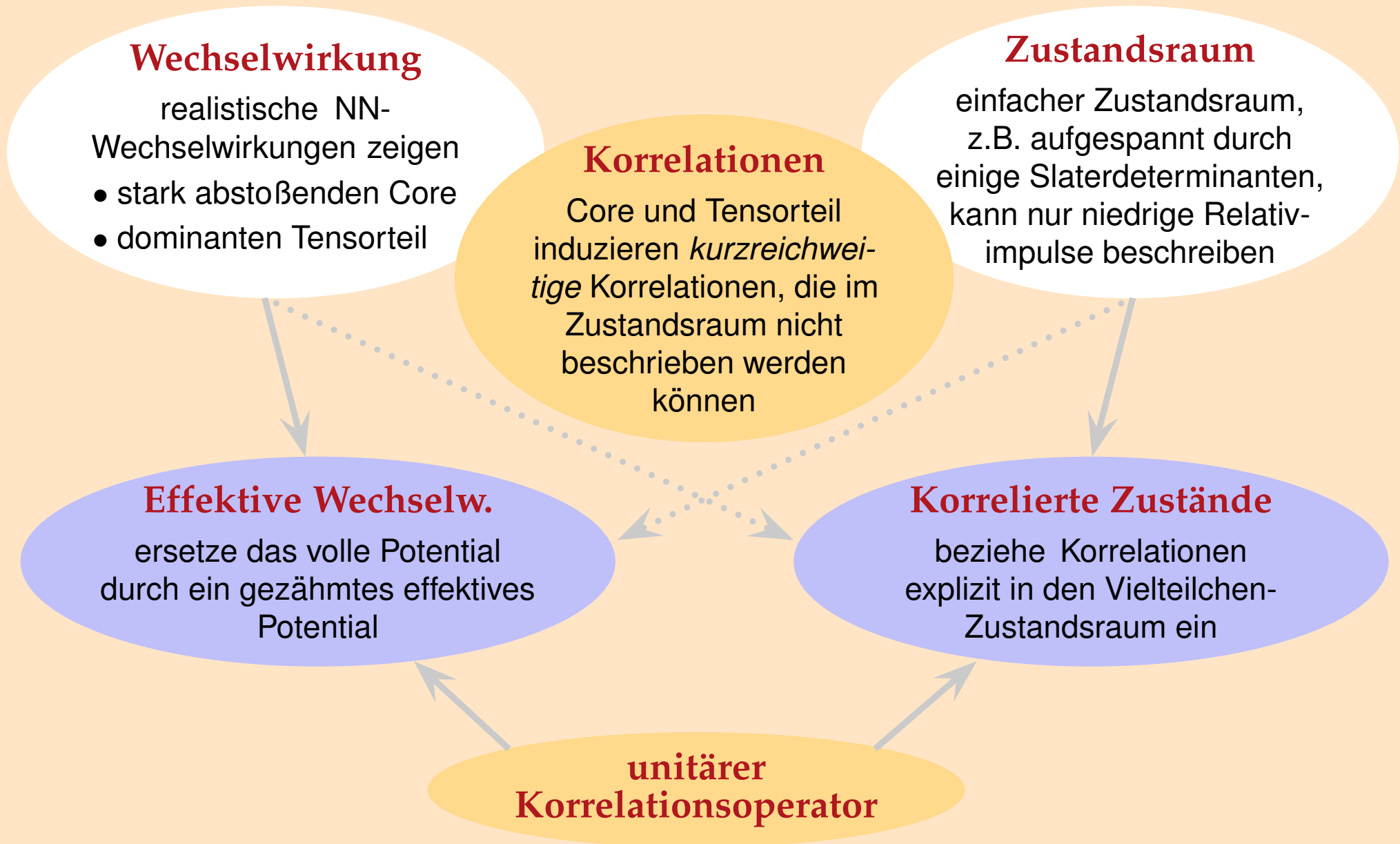
Ziele

- Verwendung eines realistischen NN-Potentials, das experimentelle Streudaten reproduziert: Bonn, Argonne,...
- Vielteilchenproblem in einem möglichst einfachen Zustandsraum behandeln, z.B. Basis aus einigen Slaterdeterminanten
- möglichst nahe an einer *ab initio* Beschreibung; maximale Vorhersagekraft

Vermeiden

- rein phänomenologische Wechselwirkung, die allein durch Anpassung an eine große Zahl von Kernen bestimmt ist
- numerisch extrem aufwendige Verfahren zu Behandlung des Vielteilchenproblems (große Basen, Monte Carlo, etc.)
- keine „Black-Box“, die Zusammenhänge und Anschaulichkeit verbirgt

Problem: kurzreichweitige Korrelationen



Konzept des unitären Korrelators

Korrelationsoperator

kurzreichweitige Korrelationen werden durch einen zustandsunabhängigen unitären Korrelationsoperator \mathbf{C} repräsentiert, der eine abstandsabhängige Transformation in der Relativkoordinate des Zweiteilchensystems beschreibt

$$\mathbf{C} = \exp[-i \mathbf{G}] = \exp\left[-i \sum_{i < j} \mathbf{g}_{ij}\right]$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{g}(\vec{r}, \vec{q}; \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\tau}_1, \vec{\tau}_2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^\dagger &= \mathbf{G} \\ \mathbf{C}^\dagger \mathbf{C} &= 1 \end{aligned}$$

korrelierte Operatoren

$$\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C}$$

korrelierte Zustände

$$|\tilde{\psi}\rangle = \mathbf{C} |\psi\rangle$$

$$\langle \psi | \tilde{\mathbf{O}} | \psi' \rangle = \langle \psi | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C} | \psi' \rangle = \langle \tilde{\psi} | \mathbf{O} | \tilde{\psi}' \rangle$$

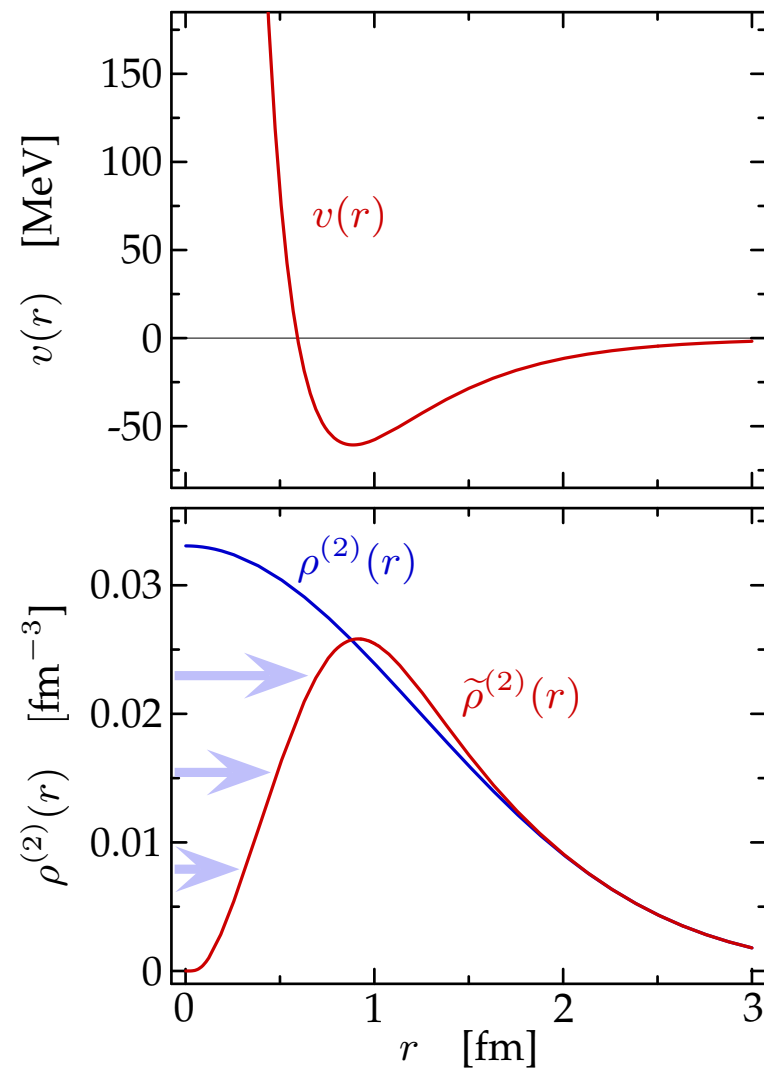
Zentralkorrelationen



- **Zentral-Korrelationsoperator**
- **korrelierte Wellenfunktion**
- **korrelierte Operatoren und Clusterentwicklung**
- **korrelierter Hamiltonoperator**

Zentralkorrelationen

Bsp.: Softcore-Potential und ${}^4\text{He}$



Korrelationen

- starke kurzreichweitige Abstoßung erzeugt Korrelationsloch in der Zweiteilchendichte
- Slaterdeterminanten können diese kurzreichweitigen Korrelationen nicht beschreiben

Korrelationsoperator C_r

- Korrelationsoperator soll die Teilchen radial aus dem Wirkungsbereich des Cores herauschieben
- Generator für radiale abstandsabhängige Verschiebung in der Relativkoordinate

$$\mathbf{g}_r = \frac{1}{2} \left[s(\mathbf{r}) \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\mathbf{q}} \right) + \left(\vec{\mathbf{q}} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) s(\mathbf{r}) \right]$$

$$\vec{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} (\vec{\mathbf{p}}_1 - \vec{\mathbf{p}}_2)$$

- $s(r)$ bestimmt Abstandsabhängigkeit

- Zentralkorrelationen
- **Korrelierte Wellenfunktion**

Korrelierte Wellenfunktion

- Korrelationsoperator angewendet auf Zweiteilchenwellenfunktion

$$\langle \vec{r}, \vec{X} | \mathbf{C}_r | \psi \rangle = \sqrt{R'_-(r)} \frac{R_-(r)}{r} \langle R_-(\vec{r}) \frac{\vec{r}}{r}, \vec{X} | \psi \rangle$$

$$\langle \vec{r}, \vec{X} | \mathbf{C}_r^\dagger | \psi \rangle = \sqrt{R'_+(r)} \frac{R_+(r)}{r} \langle R_+(\vec{r}) \frac{\vec{r}}{r}, \vec{X} | \psi \rangle$$

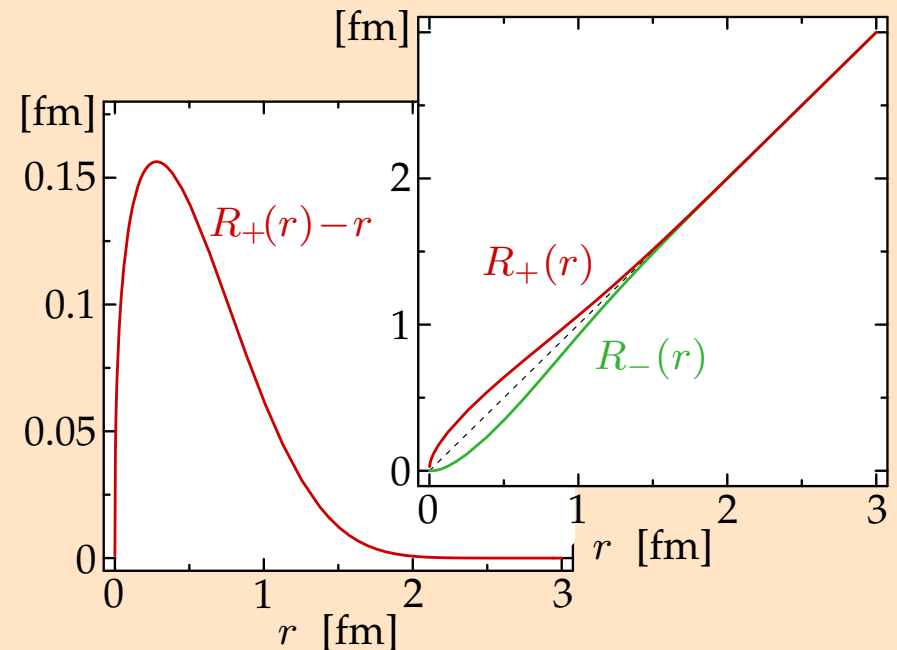
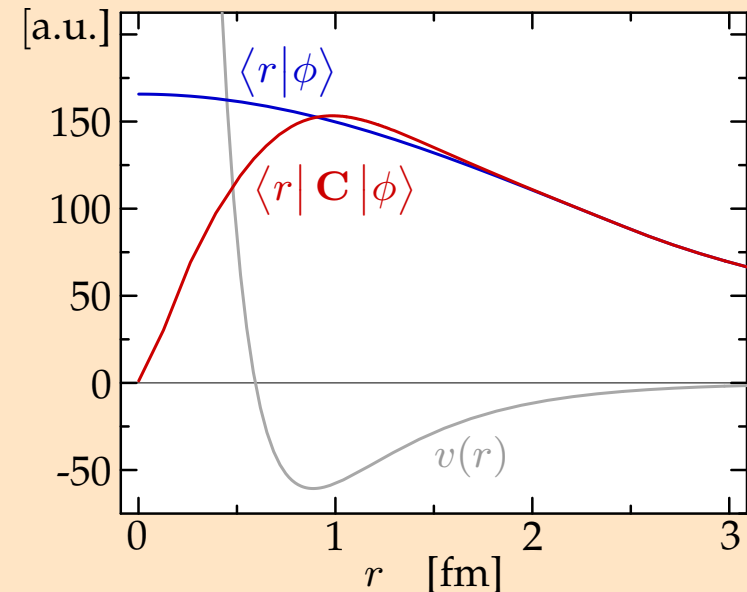
- normerhaltende Koordinatentransformation mit Korrelationsfunktion $R_\pm(r)$

$$\vec{r} \mapsto R_\pm(r) \frac{\vec{r}}{r}$$

- Verbindung mit Verschiebefunktion $s(r)$

$$\pm 1 = \int_r^{R_\pm(r)} \frac{d\xi}{s(\xi)}, \quad R_\pm(r) \approx r \pm s(r)$$

- Korrelationsfunktion bestimmt durch Abbildung eines unkorrelierten Ansatzzustandes auf exakten Zweiteilchenzustand oder durch Energieminimierung



- Vielteilchensystem
- **Korrelierte Operatoren & Clusterentwicklung**

Clusterentwicklung

zerlege den korrelierten Operator in eine Summe von irreduziblen k -Teilchenoperatoren

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{C}_r^\dagger \mathbf{H} \mathbf{C}_r = \tilde{\mathbf{H}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[3]} + \dots$$

$$V_C = \int d^3r [\langle r | \mathbf{C}_r | 1 \rangle - \langle r | 1 \rangle]^2$$

Kleinheitsparameter

$$\kappa = \rho V_C$$

Clusterzerlegungsprinzip

wenn die Reichweite der Korrelationen klein gegen den mittleren Teilchenabstand ist, dann sind höhere Clusterordnungen vernachlässigbar

$\kappa \ll 1$

$\kappa \not\ll 1$

Zweiteilchennäherung

$$\tilde{\mathbf{H}}^{C2} = \tilde{\mathbf{H}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[2]}$$

Dreiteilchennäherung

$$\tilde{\mathbf{H}}^{C3} = \tilde{\mathbf{H}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[3]}$$

Effektive Korrekturen

- Zentralkorrelationen
- Korrelierter Hamiltonoperator

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{C}_r^\dagger \mathbf{H} \mathbf{C}_r = \tilde{\mathbf{H}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[3]} + \dots$$

$$\stackrel{\text{C2}}{=} \mathbf{T} + \sum_{i < j} \left[\tilde{v}(\mathbf{r}_{ij}) + \tilde{u}(\mathbf{r}_{ij}) + \vec{\mathbf{q}}_{ij} \frac{1}{2\tilde{\mu}_\nabla(\mathbf{r}_{ij})} \vec{\mathbf{q}}_{ij} + \vec{\mathbf{q}}_{ij} \frac{\vec{\mathbf{r}}_{ij}}{r_{ij}} \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(\mathbf{r}_{ij})} \frac{\vec{\mathbf{r}}_{ij}}{r_{ij}} \vec{\mathbf{q}}_{ij} \right]$$

Lokale Potentiale

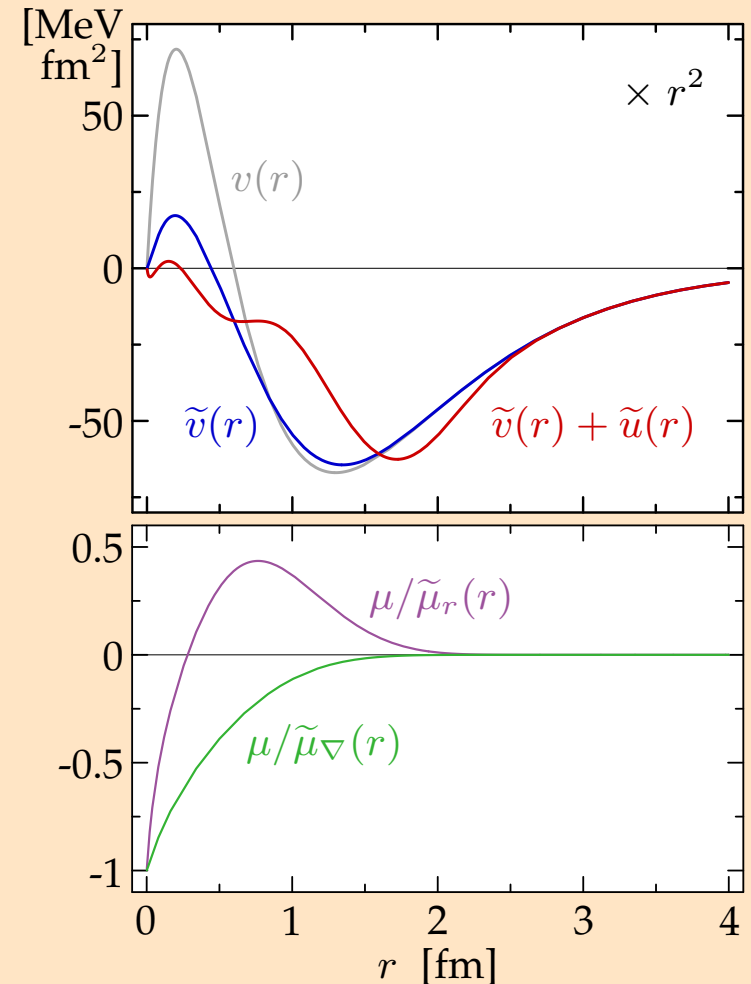
$$\tilde{v}(r) = v[R_+(r)]$$

$$\tilde{u}(r) = \frac{1}{2\mu R_+^2(r)} \left(\frac{2R_+''(r)}{rR_+'(r)} - \frac{5R_+''^2(r)}{4R_+^2(r)} + \frac{R_+'''(r)}{2R_+'(r)} \right)$$

Effektive Massekorrekturen

$$\frac{\mu}{\tilde{\mu}_\nabla(r)} = \frac{r^2}{R_+^2(r)} - 1$$

$$\frac{\mu}{\tilde{\mu}_r(r)} = \frac{1}{R_+^2(r)} - \frac{r^2}{R_+^2(r)}$$



Tensorkorrelationen

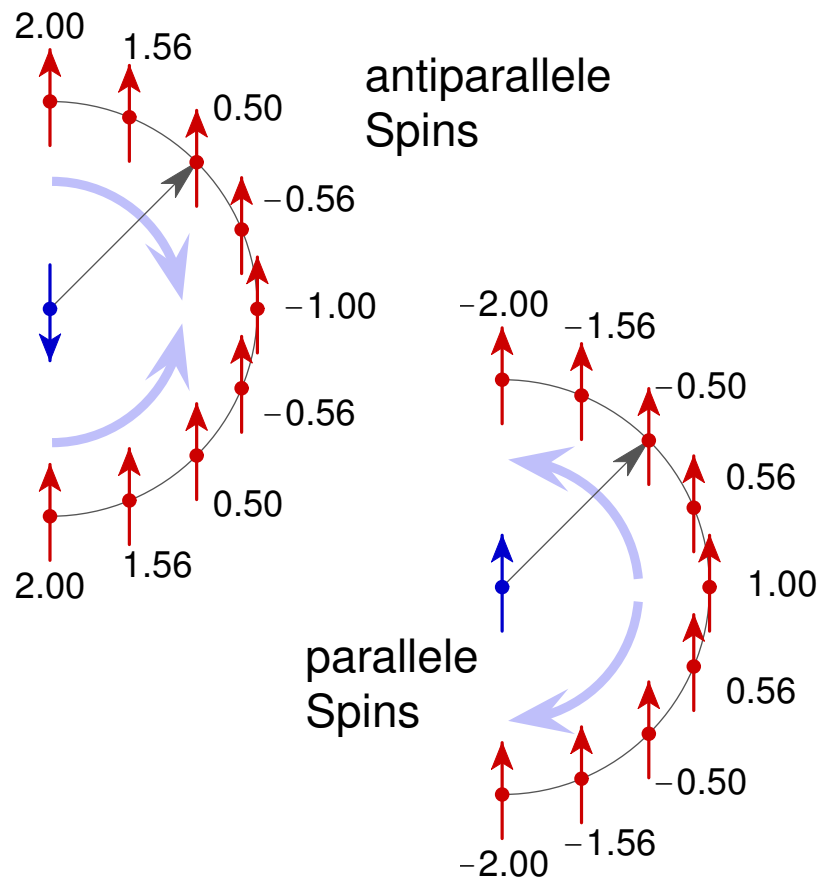


- **Tensor-Korrelationsoperator**
- **korrelierte Wellenfunktion**

Tensorkorrelationen

Analogie: klassische mag. Dipole

$$V_{\text{tensor}} \sim - \left(3 \frac{(\vec{\sigma}_1 \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \vec{r})}{r^2} - \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \right)$$



Korrelationen

- Tensorwechselwirkung korreliert die relative räumliche Orientierung der Teilchen mit deren Spinausrichtung
- Slaterdeterminanten können diese Tensor-korrelationen nicht beschreiben

Korrelationsoperator C_Ω

- Korrelationsoperator soll in Abhängigkeit von den Spins eine Verschiebung hin zum Äquator oder zu den Polen beschreiben
- Generator für Transformation in den Winkelkoordinaten (T. Neff, Diss.)

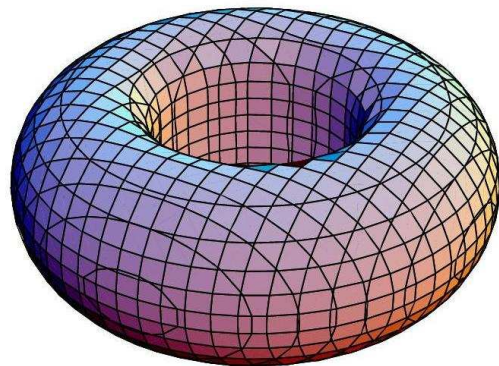
$$g_\Omega = \frac{\vartheta(\mathbf{r})}{2} \left[3(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{q}_\Omega)(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}) - (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)(\vec{q}_\Omega \cdot \vec{r}) + \vec{q}_\Omega \leftrightarrow \vec{r} \right]$$

$$\vec{q}_\Omega = \frac{1}{2r} \left(\vec{1} \times \frac{\vec{r}}{r} - \frac{\vec{r}}{r} \times \vec{1} \right)$$

Tensorkorrelationen

Zweiteilchendichte des Deuterons

- Isodichteplots der Deuteron-Zweiteilchendichte $\rho_{S=1, M_S}^{(2)}(\vec{r})$

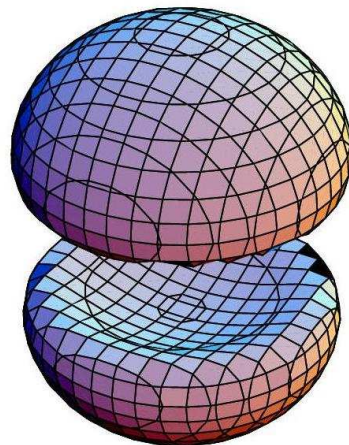


$$M_S = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$M_S = \pm 1$$

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$$



Korrelationen

- Tensorwechselwirkung korreliert die relative räumliche Orientierung der Teilchen mit deren Spinausrichtung
- Slaterdeterminanten können diese Tensorkorrelationen nicht beschreiben

Korrelationsoperator C_Ω

- Korrelationsoperator soll in Abhängigkeit von den Spins eine Verschiebung hin zum Äquator oder zu den Polen beschreiben
- Generator für Transformation in den Winkelkoordinaten (T. Neff, Diss.)

$$\mathbf{g}_\Omega = \frac{\vartheta(\mathbf{r})}{2} \left[3(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\mathbf{q}}_\Omega)(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\mathbf{r}}) - (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)(\vec{\mathbf{q}}_\Omega \cdot \vec{\mathbf{r}}) + \vec{\mathbf{q}}_\Omega \leftrightarrow \vec{\mathbf{r}} \right]$$

$$\vec{\mathbf{q}}_\Omega = \frac{1}{2\mathbf{r}} \left(\vec{\mathbf{1}} \times \frac{\vec{\mathbf{r}}}{\mathbf{r}} - \frac{\vec{\mathbf{r}}}{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{1}} \right)$$

- Tensorkorrelationen
- **Korrelierte Wellenfunktion**

Korrelierte Wellenfunktion

- tensorkorrelierter Zweiteilchenzustand

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_\Omega |\phi_0; (L = 0, S = 1) J = 1\rangle \\ = |\tilde{\phi}_0; (L = 0, S = 1) J = 1\rangle \\ + |\tilde{\phi}_2; (L = 2, S = 1) J = 1\rangle \end{aligned}$$

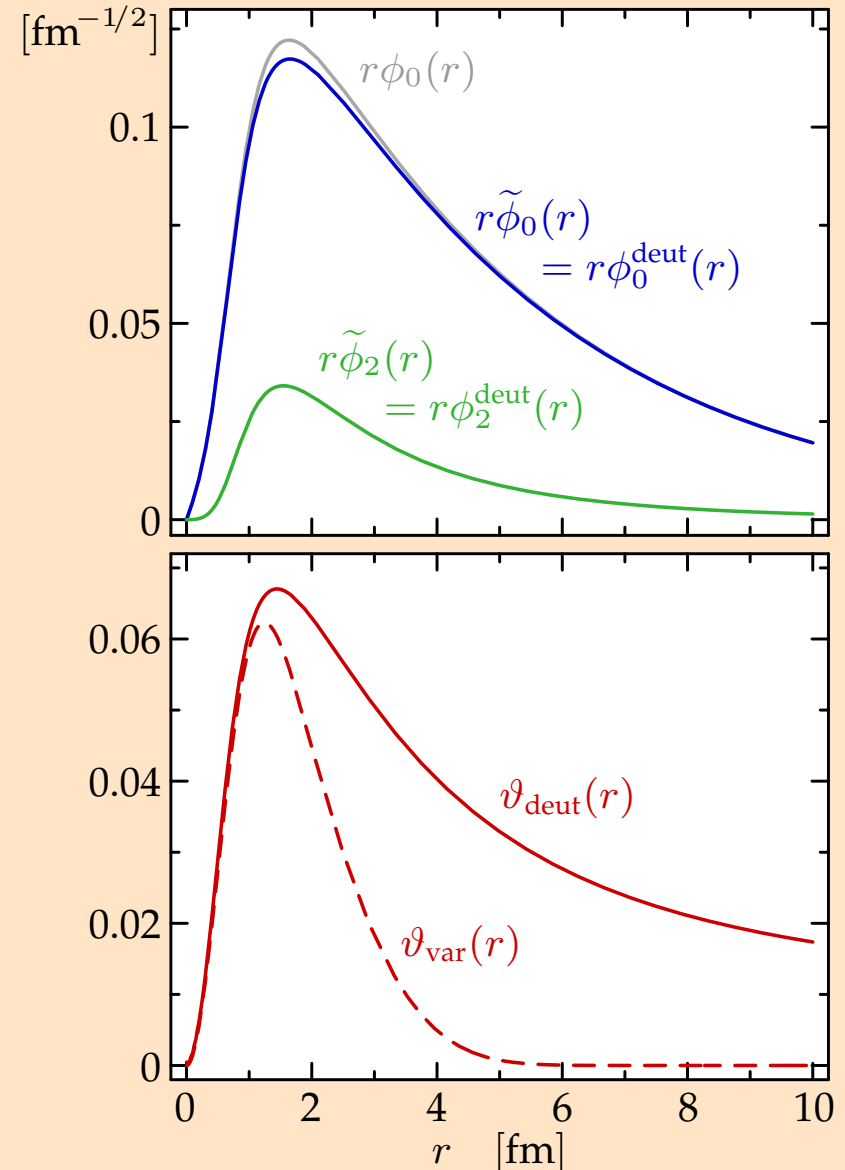
$$\tilde{\phi}_0(r) = \cos[3\sqrt{2} \vartheta(r)] \phi_0(r)$$

$$\tilde{\phi}_2(r) = \sin[3\sqrt{2} \vartheta(r)] \phi_0(r)$$

- Tensorkorrelator bestimmt aus exakter Deuteronwellenfunktion

$$\vartheta_{\text{deut}}(r) = \frac{1}{3\sqrt{2}} \arctan \frac{\phi_2^{\text{deut}}(r)}{\phi_0^{\text{deut}}(r)}$$

- kurzreichweitiger Tensorkorrelator aus Energie-minimierung mit eingeschränkter Reichweite



Grundzustandsstruktur auf Basis des Bonn-A-Potentials



- **Behandlung des Vielteilchenproblems**
- **korreliertes Bonn-A-Potential**
- **realistische Wechselwirkungen -vs- Experiment**
- **Bindungsenergien und Ladungsradien**
- **Einteilchendichten und Zweiteilchenkorrelationen**

• Einfaches Modell zur • Behandlung des Vielteilchenproblems

Einteilchenzustände

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \sum_{\nu=1}^n c_{\nu} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{\xi}_{\nu})^2}{2\alpha_{\nu}} - i\vec{\pi}_{\nu}\vec{x} \right) |m^s\rangle \otimes |m^t\rangle$$

$\vec{\xi}_{\nu}$: mittlerer Ort

$\vec{\pi}_{\nu}$: mittlerer Impuls

α_{ν} : komplexe Breite

c_{ν} : Amplitude

- $9n - 1$ Parameter pro Nukleon

Vielteilchenzustand

$$|\Psi\rangle = \mathbf{A} (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_A\rangle)$$

- Slaterdeterminante oder Superposition

Korrelierter Hamiltonoperator

$$\tilde{\mathbf{H}}^{C2} = [\mathbf{C}_r \mathbf{C}_{\Omega} \mathbf{H} \mathbf{C}_{\Omega} \mathbf{C}_r]^{C2} = \mathbf{T} + \mathbf{V}^{\text{eff}}$$

- tensor- und zentralkorrelierter Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung

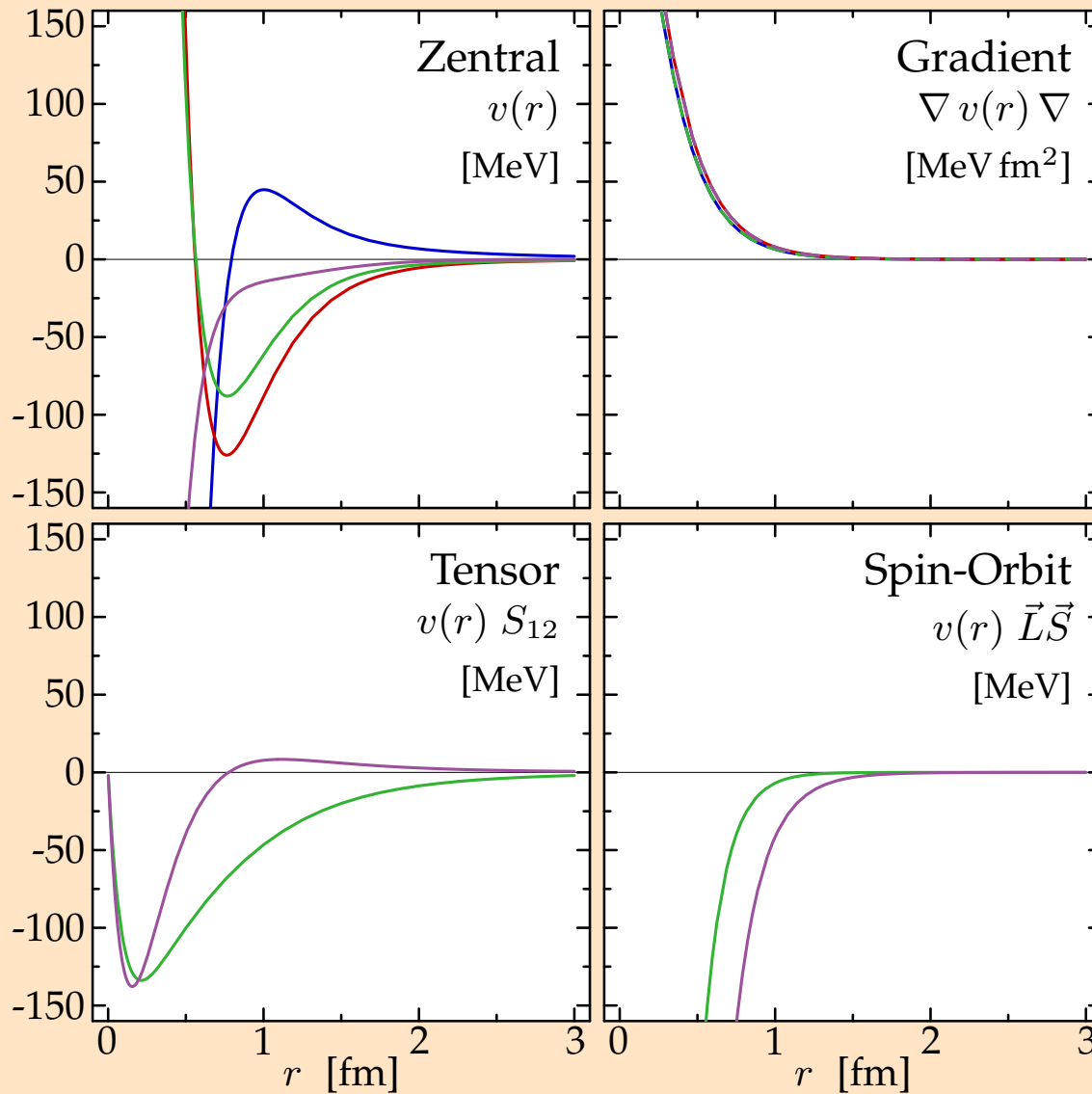
Variation

Minimierung des Energieerwartungswertes $\langle \Psi | \tilde{\mathbf{H}}^{C2} | \Psi \rangle$ durch Variation der Parameter der Einteilchenzustände

Diagonalisierung

in Zustandsraum aufgespannt durch Slaterdeterminanten (z.B. generiert durch Rotation und Skalierung des Variationszustandes oder ph-Anregungen)

- Realistische NN-Wechselwirkung
- Bonn-A-Potential**



$(S, T) =$ — — — —
 (0, 0) (0, 1) (1, 0) (1, 1)

Zentralkorrelationen

- Zentralkorrelatoren wichtig für $(0, 1)$ und $(1, 0)$ -Kanal
- bestimmt durch Abbildung auf exakte Zweiteilchenlösung oder Energieminimierung

Tensorkorrelationen

- Tensorkorrelator für langreichweitig anziehenden $(1, 0)$ -Kanal
- bestimmt durch Zweiteilchen-Energieminimierung mit eingeschränkter Reichweite

- Korreliertes Bonn-A-Potential
- **Realistische Wechselwirkungen -vs- Experiment**

Fundamentale Schwierigkeit

- gegenwärtige realistische Zweiteilchenpotentiale liefern um 5 – 10% zu geringe Triton-Bindungsenergie
- noch größere Abweichungen bei größeren Kernen (GFMC-Rechnungen)
- korrigiert durch phänomenologische Dreiteilchenwechselwirkung

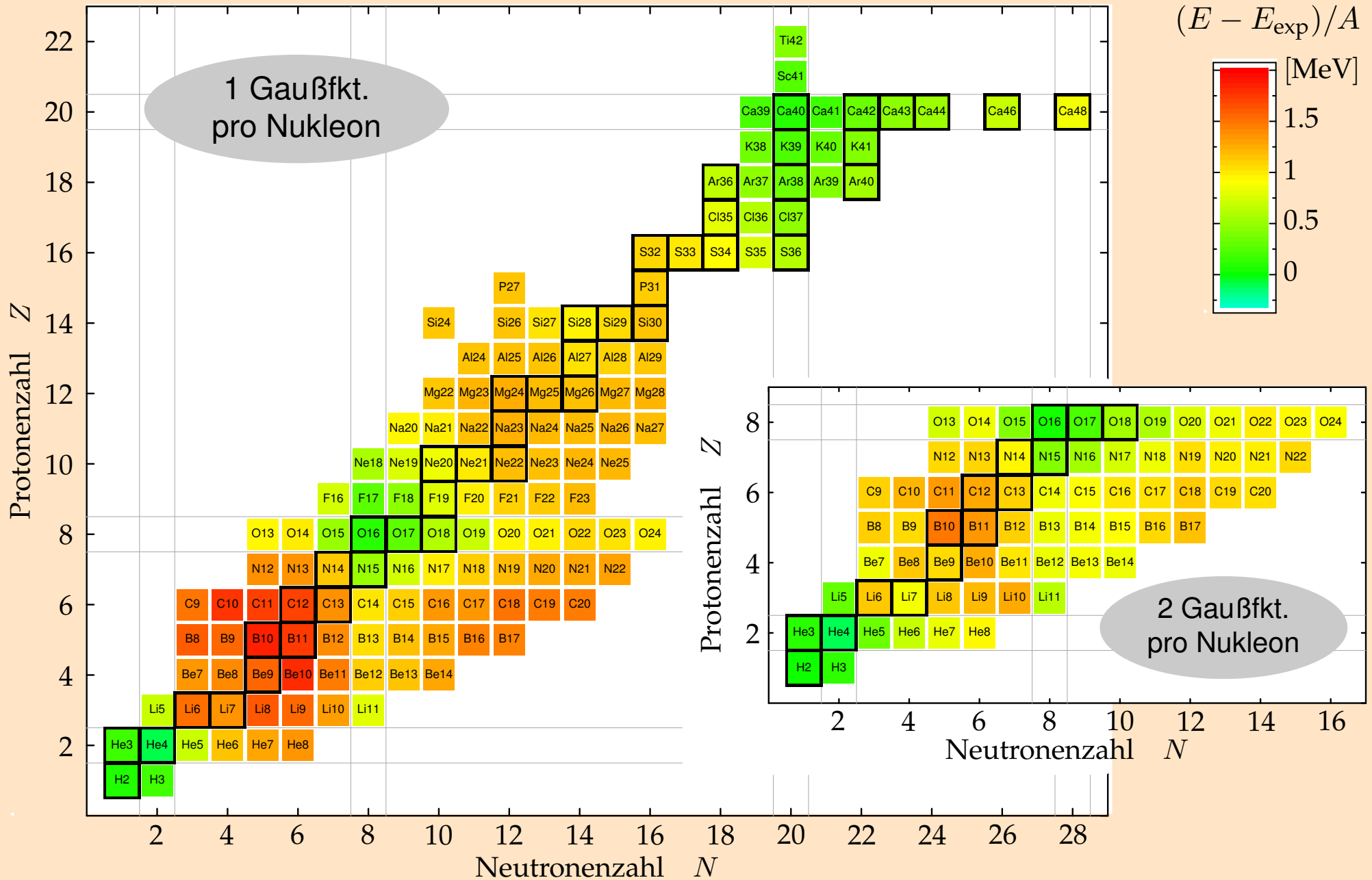
Pragmatischer Zugang

- addieren einer phänomenologischen Korrektur zum zentral- und tensorkorrelierten Zweiteilchenpotential
- Parameter an experimentelle Energien und Radien einer kleinen Auswahl von Kernen angepaßt

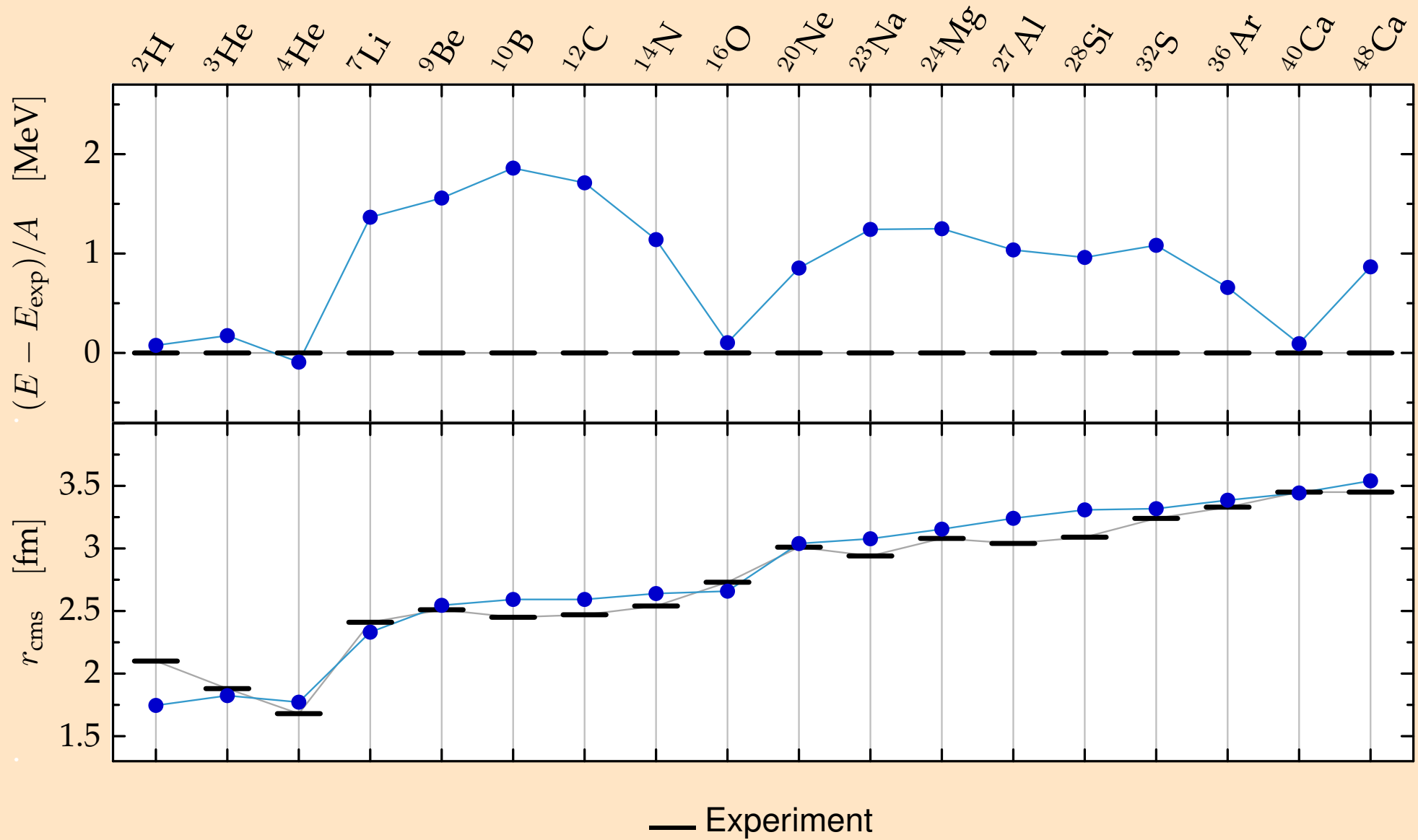
Korreliertes Bonn-A + Korrektur

- zentral- und tensorkorreliertes Potential liefert gute Näherung zu exakten Vielteilchenrechnungen
- korreliertes Bonn-A-Potential plus Zusatzterme in Zentral- und Gradiententeil im $(S, T) = (1, 0)$ -Kanal
- Stärke der Zusatzterme (2 Parameter) so gewählt, daß exp. Bindungsenergien und Ladungsradien von ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$, und ${}^{40}\text{Ca}$ reproduziert werden

- Korreliertes Bonn-A-Potential + Korrektur
- Erkundung der Nuklidkarte

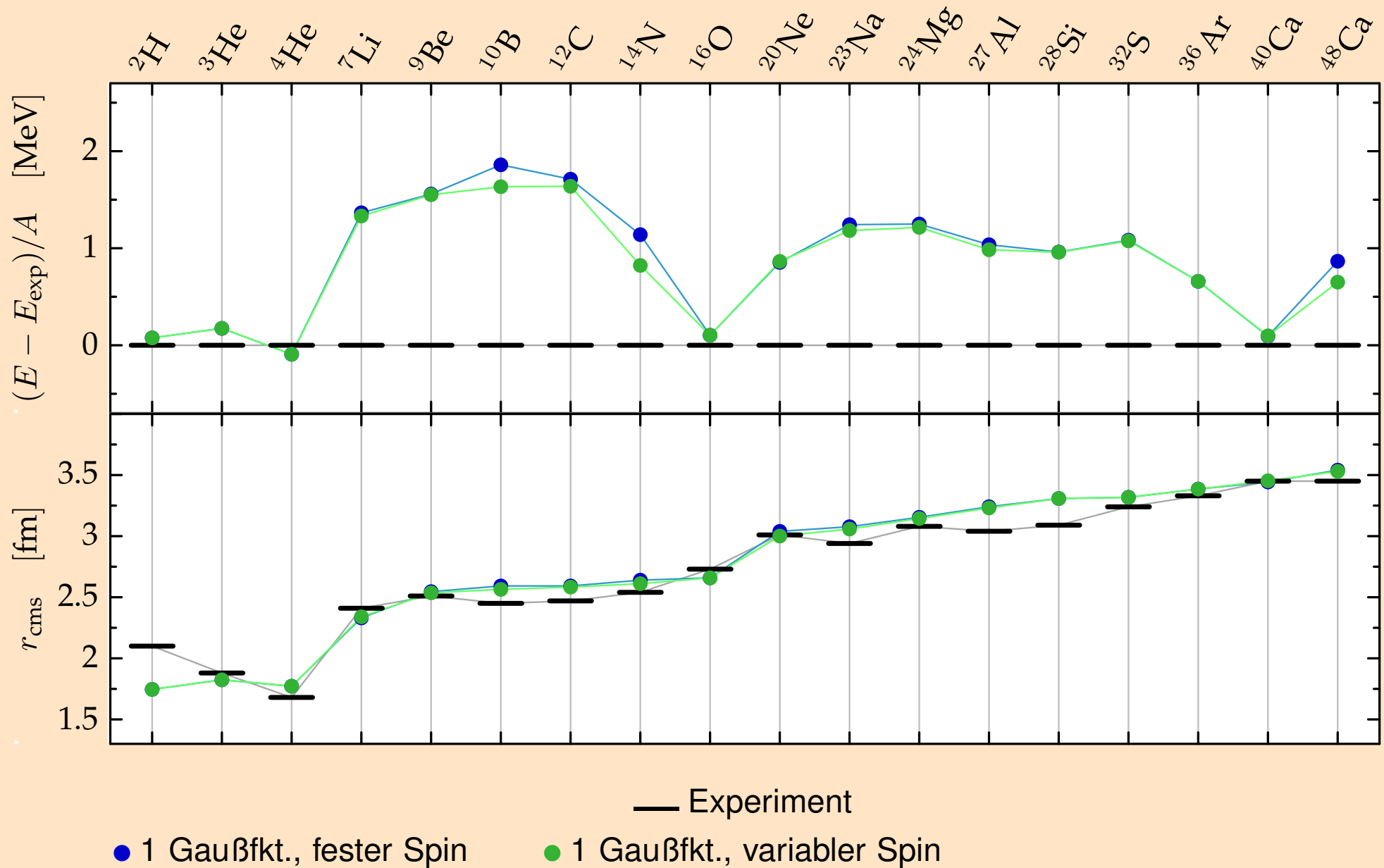


- Korreliertes Bonn-A-Potential + Korrektur
- Bindungsenergien und Ladungsradien

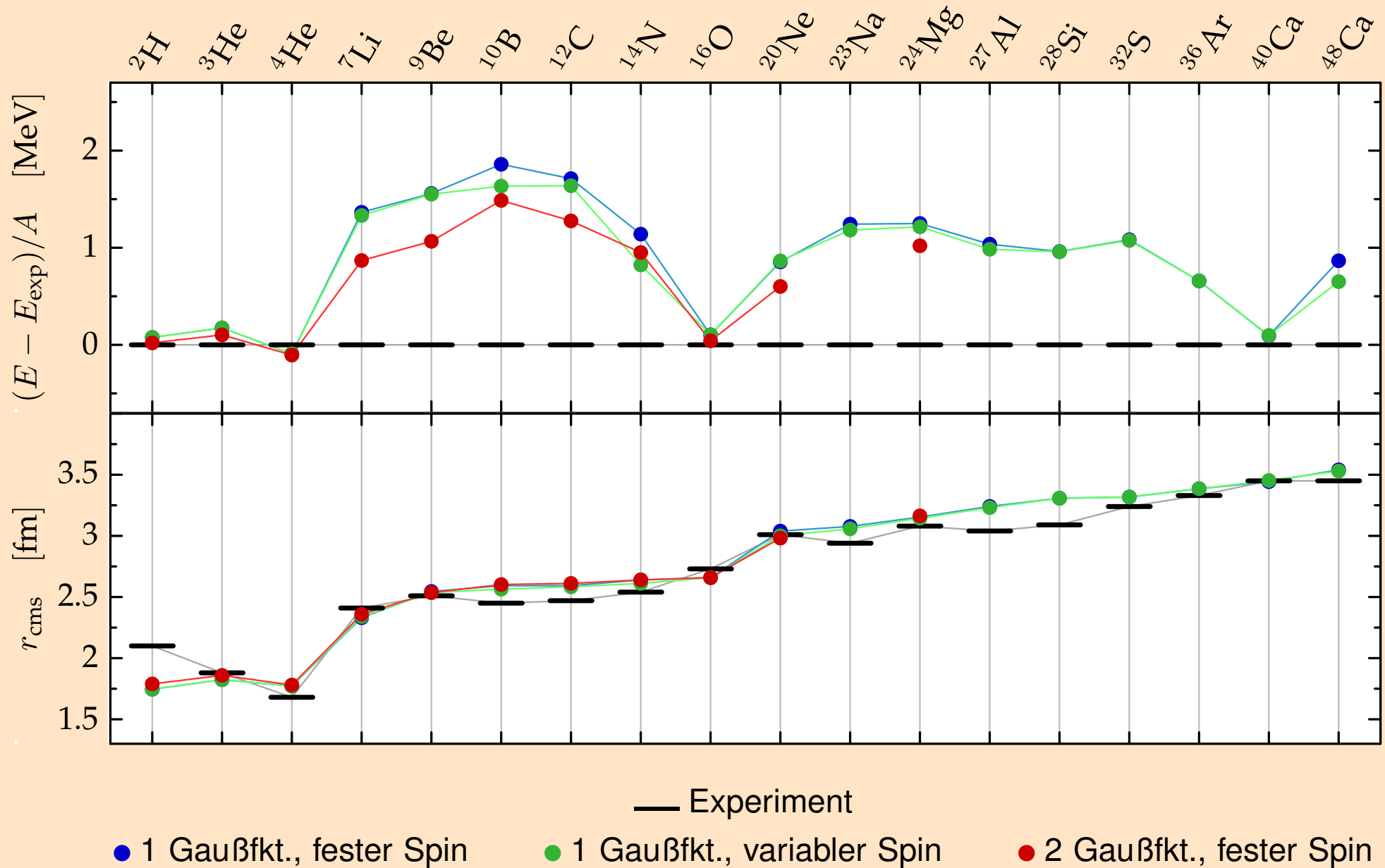


● 1 Gaußfkt., fester Spin

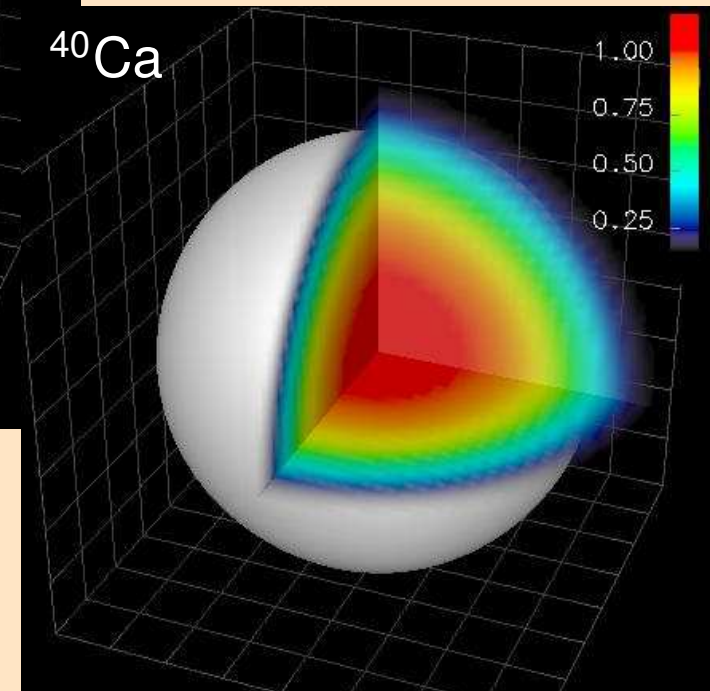
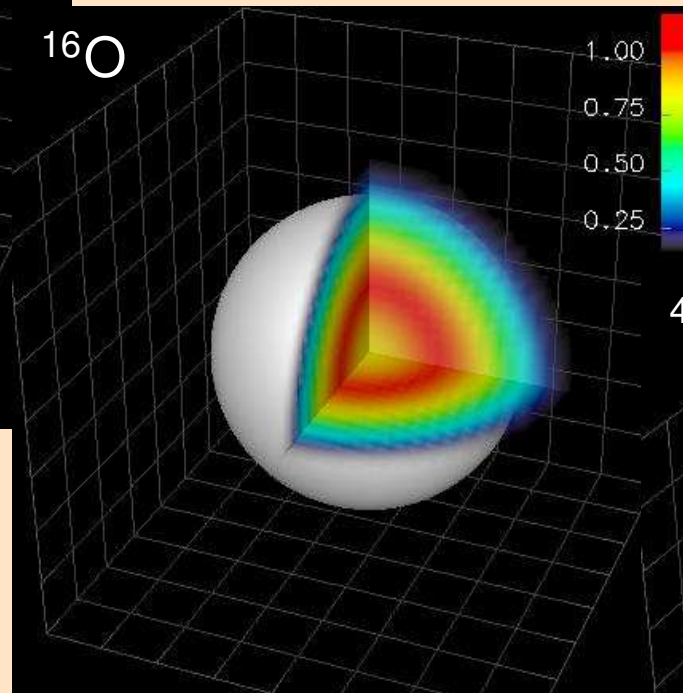
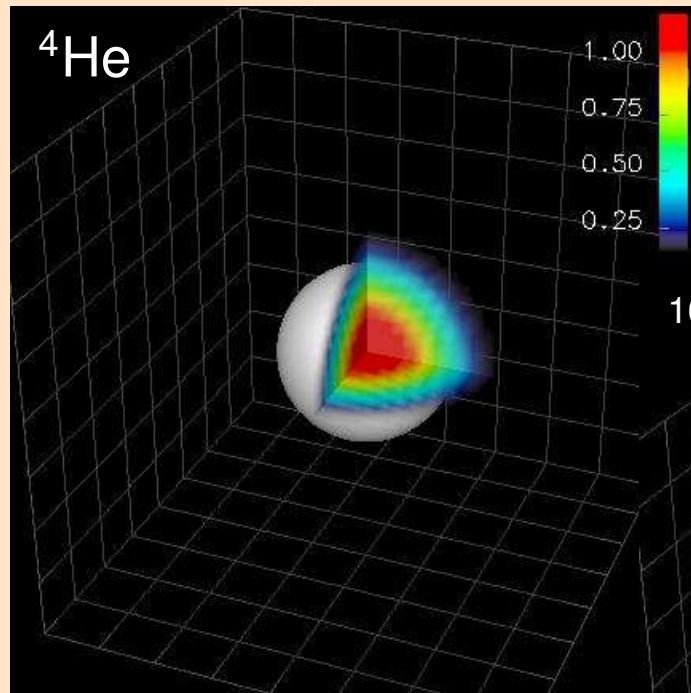
- Korreliertes Bonn-A-Potential + Korrektur
- Bindungsenergien und Ladungsradien



- Korreliertes Bonn-A-Potential + Korrektur
- Bindungsenergien und Ladungsradien



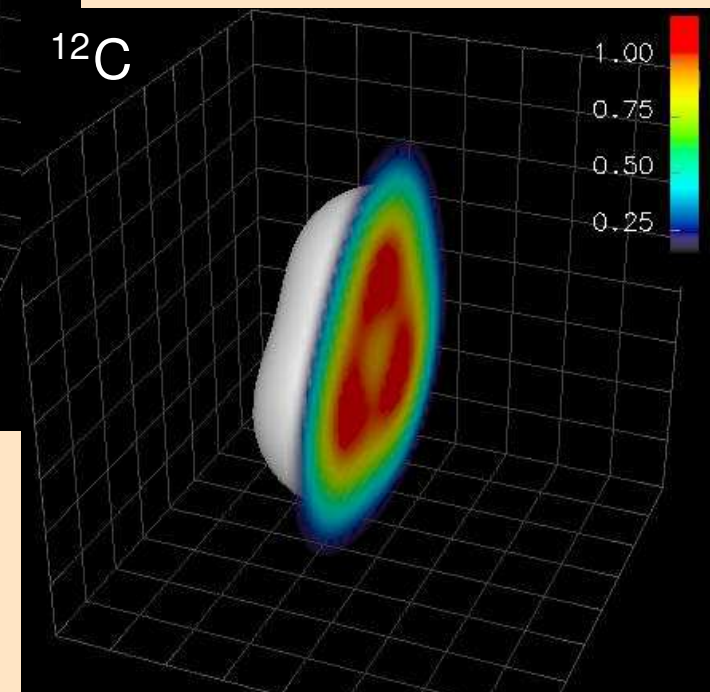
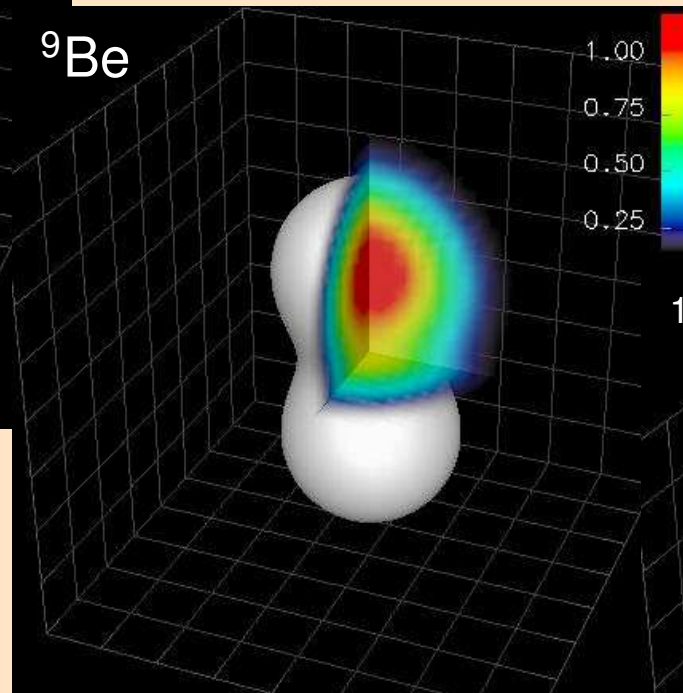
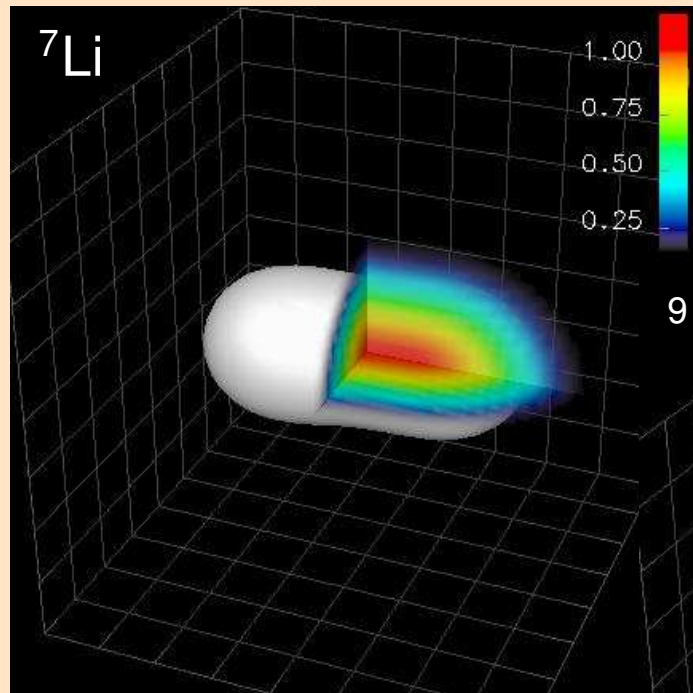
- Korreliertes Bonn-A-Potential + Korrektur
- **Doppelt-Magische Kerne**



- sphärisch symmetrische Dichteverteilung
- schalenmodellartige Struktur

- 1 Gaußfunktion pro Nukleon, variabler Spin
- Einteilchendichte $\rho^{(1)}(\vec{x})$ in Einheiten der Kernmateriedichte $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$
- weiße Fläche markiert Isodichteschnitt bei $\rho_0/2$

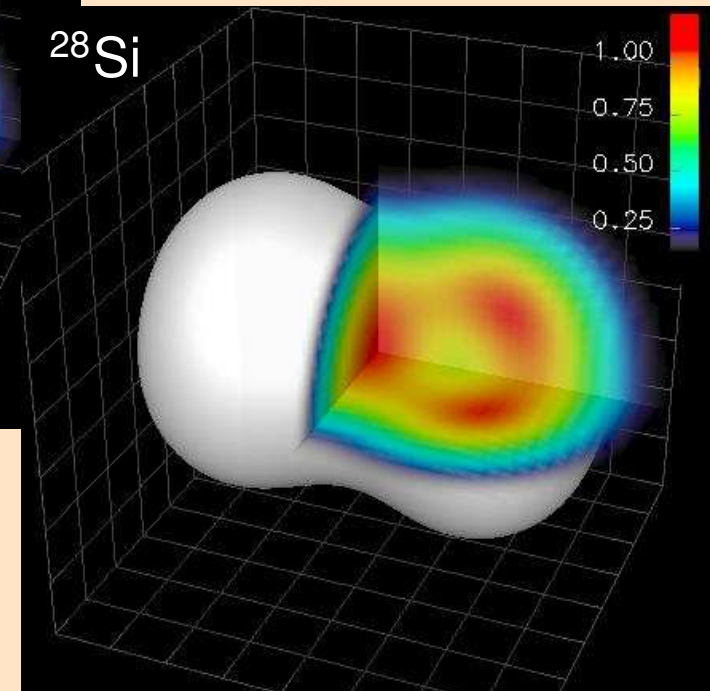
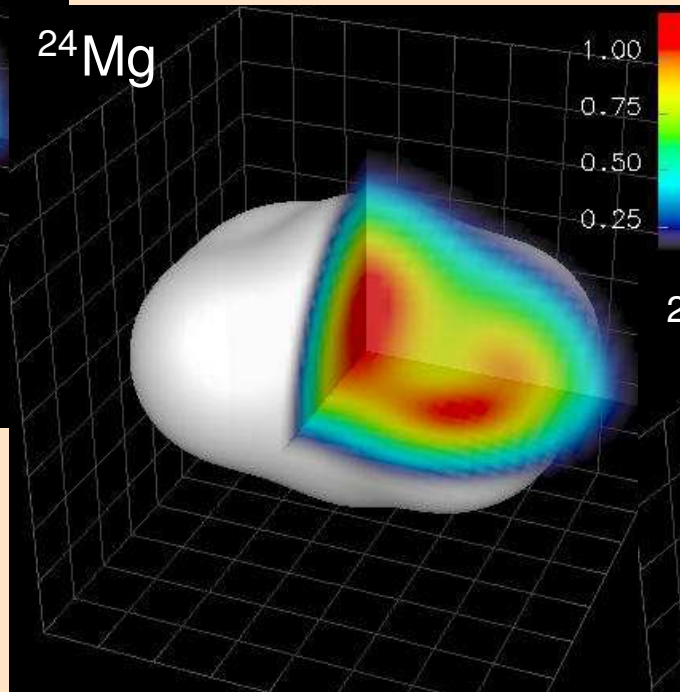
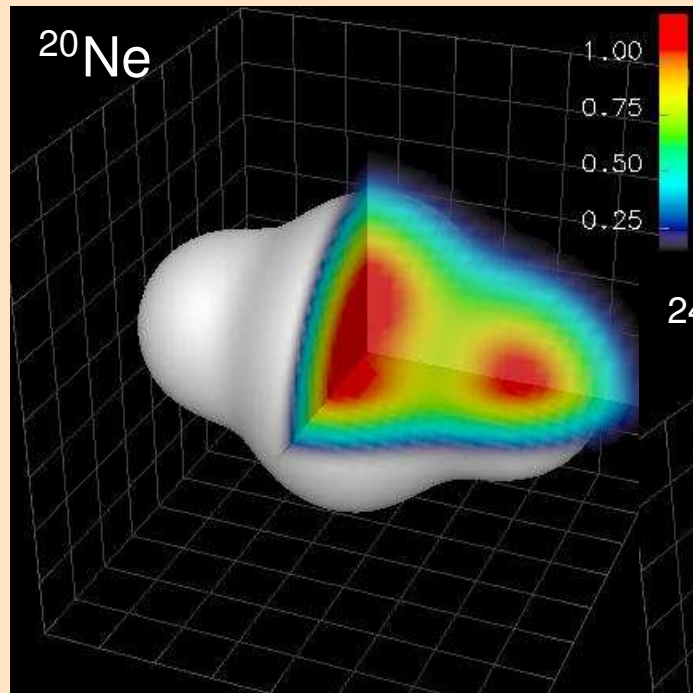
- Korreliertes Bonn-A-Potential + Korrektur
- Kerne aus der p -Schale



- prolate intrinsische Deformation für ${}^7\text{Li}$ und ${}^9\text{Be}$
- intrinsische Drei- α -Struktur für ${}^{12}\text{C}$

- 2 Gaußfunktionen pro Nukleon, fester Spin
- Einteilchendichte $\rho^{(1)}(\vec{x})$ in Einheiten der Kernmateriedichte $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$
- weiße Fläche markiert Isodichteschnitt bei $\rho_0/2$

- Korreliertes Bonn-A-Potential + Korrektur
- Kerne aus der *sd*-Schale



- komplexe prolate Deformationen für ^{20}Ne und ^{28}Si , α -Struktur
- triaxiale Deformation für ^{24}Mg , α -Struktur

- 2 Gaußfunktionen pro Nukleon, fester Spin
- Einteilchendichte $\rho^{(1)}(\vec{x})$ in Einheiten der Kernmateriedichte $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$
- weiße Fläche markiert Isodichteschnitt bei $\rho_0/2$

Zusammenfassung & Ausblick

Zusammenfassung

- Formalismus zur Beschreibung kurzreichweitiger Zentral- und Tensor Korrelationen durch unitäre Transformationen
- korrelierte Wechselwirkung, die für Schalenmodell, Konfigurationsmischung, Hartree-Fock, u.a. geeignet ist
- kurzreichweitige Korrelationen \leftrightarrow Korrelationsoperator; langreichweitige Korrelationen \leftrightarrow Vielteilchen-Zustandsraum
- einfache Variationsrechnung zur Grundzustandsstruktur von Kernen im Bereich $A \lesssim 50$ ausgehend vom Bonn-A-Potential
- erfolgreich auch auf andere Vielteilchensysteme angewendet: ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeiten, Kern- und Neutronenmaterie

Ausblick

- vielversprechender Ausgangspunkt für detaillierte Kernstrukturrechnungen: Grundzustandseigenschaften, Spektren, kollektive Anregungen,...
- Verbesserungen der Korrektur zum korrelierten Potential, eventuell Dreiteilchenwechselwirkung