Kernstruktur mit effektiven Dreiteilchenpotentialen

DIPLOMARBEIT

Anneke Zapp

Betreut von Professor Dr. Robert Roth



Technische Universität Darmstadt Institut für Kernphysik

November 2006

Inhaltsverzeichnis

Ei	Einleitung	V
1	1 Realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale	1
	1.1 Das Argonne v_{18} Potential	 2
2	2 Die Methode der unitären Korrelatoren	7
	2.1 Der Zentralkorrelator	 10
	2.2 Der Tensorkorrelator	 11
	2.3 Spin-Isospin-Abhängigkeit	 14
	2.4 Clusterentwicklung	 15
	2.5 Korrelierte Wechselwirkung	 16
	2.6 Korrelierte Matrixelemente	 21
	2.7 Bestimmung der Korrelationsfunktionen	 24
3	3 Die Hartree-Fock-Methode	29
	3.1 Das Ritzsche Variationsverfahren	 29
	3.2 Das Hartree-Fock-Verfahren	 31
	3.3 Hartree-Fock mit der korrelierten Wechselwirkung	 36
	3.4 Ergebnisse der Hartree-Fock-Rechnungen	 39
4	4 Dreiteilchenwechselwirkung	43
	4.1 Berechnung der Matrixelemente	 44
	4.2 Optimierung der Parameter	 49
5	5 Kollektive Anregungen	65
Ŭ	5.1 Random Phase Approximation	65
	5.2 Riesenresonanzen	 70
		iii

6	Vielteilchenstörungstheorie			
	6.1	Grundlagen der Störungstheorie	80	
	6.2	Vielteilchenstörungstheorie	81	
	6.3	Ergebnisse der Vielteilchenstörungstheorie	85	
_	-			
/ Zusammentassung und Ausblick				

Einleitung

Eine zentrale Aufgabe der theoretischen Kernphysik besteht darin, die Eigenschaften von Atomkernen zu beschreiben und Vorhersagen, zum Beispiel für instabile Kerne, abzuleiten. Bei dem Versuch, diese einfach formulierte Aufgabe zu lösen, treten jedoch zwei grundlegende Probleme auf. Zum einen hat die nukleare Wechselwirkung eine komplexe Struktur, die bis heute noch nicht komplett erforscht ist. Zum anderen kann das quantenmechanische Vielteilchenproblem nicht exakt gelöst werden, das heißt, es müssen Näherungsverfahren entwickelt werden.

Idealerweise würde man die nukleare Wechselwirkung aus der zugrundeliegenden Theorie der starken Wechselwirkung, der Quantenchromodynamik, herleiten, aber das ist bis jetzt noch nicht möglich. Eine recht neue Entwicklung stellt die chirale Wechselwirkung dar, die neben einer Zweiteilchenwechselwirkung auch eine Dreiteilchenwechselwirkung und weitere höhere Ordnungen liefert. Auf der anderen Seite wurden im Laufe der letzten Jahrzehnte mehrere sogenannte realistische Potentiale entwickelt, die teilweise auf der Mesonentheorie und teilweise auf der Phänomenologie der nuklearen Wechselwirkung aufbauen. Eines dieser Potentiale ist das Argonne v_{18} [1]. Seine Struktur und einige seiner Eigenschaften werden im ersten Kapitel vorgestellt, da es als Grundlage für diese Arbeit dient.

Zur Lösung des quantenmechanischen Vielteilchenproblems wurden zahlreiche Methoden entwickelt. Eine Klasse von Näherungen bilden die sogenannten Mean-Field-Verfahren. Dabei wird ein einzelnes Nukleon im mittleren Potential aller anderen Nukleonen betrachtet. Bei der Beschreibung von Atomkernen durch Mean-Field-Methoden, wie das Hartree-Fock-Verfahren, taucht ein grundsätzliches Problem auf. Die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung erzeugt starke Korrelationen. Dazu gehören zum einen Zentralkorrelationen, generiert durch eine kurzreichweitige Abstoßung, und zum anderen Tensorkorrelationen, die durch die Tensorkomponente der nuklearen Wechselwirkung induziert werden. Aufgrund der Einschränkungen des Hilbertraumes, die zum Beispiel

Einleitung

bei der Hartree-Fock-Methode gemacht werden, können diese Korrelationen nicht beschrieben werden. Aus diesem Grund wurde die Methode der unitären Korrelatoren entwickelt [2, 3, 4, 5]. Darin werden die kurzreichweitigen Korrelationen explizit durch eine zustandsunabhängige unitäre Transformation behandelt. Die unitäre Transformation hat den Vorteil, daß die Korrelationen entweder in die Zustände oder in die betrachteten Observablen eingebracht werden können. Mit Hilfe dieser Methode wird aus einem realistischen Potential eine korrelierte Wechselwirkung konstruiert, die ihrerseits als Grundlage für Kernstrukturrechnungen verwendet werden kann. Die Darstellung der unitären Transformation und ihre Eigenschaften sowie die Ableitung der korrelierten Wechselwirkung werden im zweiten Kapitel diskutiert.

Auf der Grundlage dieser korrelierten Wechselwirkung kann die Hartree-Fock-Näherung auf Kernstrukturrechnungen angewendet werden [6, 7, 8]. Daher wird dieses Verfahren im dritten Kapitel unter Einbeziehung einer allgemeinen Dreiteilchenwechselwirkung abgeleitet. Das Hartree-Fock-Verfahren basiert auf dem Variationsprinzip und ist gut zur Beschreibung von Grundzustandseigenschaften von Atomkernen geeignet. Im Anschluß an die Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen werden einige Resultate gezeigt, die sich aus Rechnungen mit der aus dem Argonne v_{18} Potential gewonnenen korrelierten Wechselwirkung, die eine reine Zweiteilchenwechselwirkung ist, ergeben. Dabei wird eine Reihe von Kernen untersucht, die von ⁴He bis ²⁰⁸Pb reichen. Die Hartree-Fock-Ergebnisse werden als Ausgangspunkt für die Vielteilchenstörungstheorie [9] verwendet, die eine einfache Möglichkeit bietet, verbleibende langreichweitige Korrelationen miteinzubeziehen. Diese Vorgehensweise hat im Gegensatz zu vielen anderen Verfahren, zum Beispiel dem No-Core-Schalenmodell, den Vorteil, daß sie über die ganze Nuklidkarte hinweg angewendet werden kann. Es zeigt sich allerdings, daß eine Zweiteilchenwechselwirkung allein zur Beschreibung der Atomkerne nicht ausreicht. Am Beispiel von Bindungsenergien und Ladungsradien wird deutlich, daß die Bindungsenergien gut reproduziert werden, die Ladungsradien aber systematisch kleiner sind als die experimentellen Werte.

Um die Beschreibung der Atomkerne zu verbessern, wird im vierten Kapitel eine abstoßende Dreiteilchenwechselwirkung eingeführt. Als erster Ansatz wird eine Kontaktwechselwirkung gewählt, die durch zwei Diracsche Deltadistributionen beschrieben wird. Dies ist zwar keine realistische Darstellung einer Wechselwirkung, hat aber den Vorteil, daß die Matrixelemente, die für alle Rechnungen benötigt werden, relativ einfach zu berechnen sind. Auf der Grundlage der Hartree-Fock-Rechnungen wird die optimale Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung durch Vergleich mit experimentellen Daten festgelegt. Dabei zeigt sich, daß die Ladungsradien durch Hinzunahme der Dreiteilchenwechselwirkung optimal wiedergegeben werden können. Neben den Grundzuständen liefern kollektive Anregungen, die im Rahmen der Random Phase Approximation beschrieben werden können [6, 7, 8], wichtige Observablen, um die Eigenschaften der Wechselwirkung zu studieren. Die Random Phase Approximation, die auf den Ergebnissen der Hartree-Fock-Rechnungen aufbaut, wird im fünften Kapitel vorgestellt. Im Anschluß an die theoretische Behandlung der RPA-Gleichungen wird der Einfluß der Dreiteilchenwechselwirkung auf einige Riesenresonanzen untersucht. Dabei zeigt sich teilweise eine deutliche Verbesserung in der Beschreibung der untersuchten Moden. Andererseits treten hier erste Hinweise auf die Grenzen der Kontaktwechselwirkung auf.

Noch deutlicher sind diese Effekte in den Resultaten der Vielteilchenstörungstheorie. Diese Methode und die Probleme der Kontaktwechselwirkung werden im sechsten Kapitel behandelt. Zum Abschluß werden im siebten Kapitel einige Möglichkeiten vorgestellt, mit denen diese Probleme gelöst werden können. Einleitung

Kapitel 1

Realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale

Die Anfänge der Kernphysik liegen in der Entdeckung des Neutrons durch James Chadwick im Jahr 1932 [10] begründet. Unmittelbar nach dieser Entdeckung kamen sowohl Werner Heisenberg [11] als auch Dmitri Iwanenko [12] unabhängig voneinander zu dem Schluß, daß der Atomkern aus Protonen und Neutronen aufgebaut ist und keine Elektronen enthält, wie vorher angenommen. Mit dieser Erkenntnis stellte sich sofort die Frage nach den Kräften zwischen den Kernbausteinen, den Nukleonen. Diese Frage entwickelte sich zum zentralen Problem der Kernphysik. Es wurden im Laufe der Zeit verschiedene Ansätze verfolgt, um diese Aufgabe zu lösen.

Ein entscheidender Schritt war die Formulierung der Mesonentheorie durch Hideki Yukawa im Jahr 1935 [13, 14]. Dieser Theorie zufolge findet die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen über den Austausch von Mesonen statt, analog zur elektromagnetischen Wechselwirkung, die durch Photonen vermittelt wird. Die Photonen sind masselose Teilchen, was eine unendliche Reichweite der Wechselwirkung zur Folge hat. Im Gegensatz dazu sind die Mesonen massebehaftet, womit die Wechselwirkung auf endliche Reichweiten begrenzt wird. Das leichteste Meson ist das Pion mit einer Masse von etwa 140 MeV/ c^2 [7]. Damit ergibt sich aus der Comptonwellenlänge $\lambda = \frac{\hbar}{mc} = 1.4$ fm die Reichweite der Wechselwirkung, die durch Pionen vermittelt wird. So kann zum Beispiel der langreichweitige Teil der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung durch Ein-Pion-Austausch beschrieben werden und die mittelreichweitige Anziehung unter anderem durch einen korrelierten Zwei-Pionen-Austausch, wobei hier auch schwerere Mesonen eine Rolle spielen [15].

Die Mesonentheorie erfüllt automatisch eine Anzahl von Symmetrien. Diese Symmetrieeigenschaften der nuklearen Wechselwirkung können umgekehrt als Ausgangs-

Kapitel 1 · Realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale

punkt gewählt werden, um die Operatorform des Nukleon-Nukleon-Potentials abzuleiten. Die Wechselwirkung muß bestimmte allgemeine Symmetrien, wie zum Beispiel Translationsinvarianz, Rotationsinvarianz und so weiter, und einige spezielle Symmetrien, zum Beispiel Paritätsinvarianz und Ladungsunabhängigkeit, erfüllen [7]. Aufgrund dieser Bedingungen läßt sich ein relativ kleiner Satz von Operatoren angeben, die für die Beschreibung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung in Frage kommen. Die verbleibenden Radialabhängigkeiten enthalten eine Anzahl von Parametern, die durch Anpassung an experimentelle Resultate festgelegt werden. Potentiale, die insbesondere Nukleon-Nukleon-Streudaten und Deuteroneigenschaften reproduzieren, heißen realistische Potentiale. Es gibt verschiedene solcher Potentiale, die zwar für Kernstrukturrechnungen geeignet sind, allerdings fehlt diesen Potentialen eine zugrundeliegende Theorie, auf der sie aufbauen.

Eine solche tiefergehende Theorie ist die Quantenchromodynamik (QCD). Sie beschäftigt sich mit der mikroskopischen Begründung der starken Wechselwirkung. Ihr zufolge sind die Nukleonen aus Quarks aufgebaut, die durch den Austausch von Gluonen miteinander wechselwirken. Idealerweise würde die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung aus der Quark-Quark-Wechselwirkung hergeleitet, aber das ist bisher (noch) nicht möglich. Zudem werden die Quark-Freiheitsgrade erst bei sehr kleinen Abständen beziehungsweise hohen Energien wichtig. Für Kernstrukturuntersuchungen ist es daher eine sinnvolle Näherung, die Substruktur der Nukleonen zu vernachlässigen und die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung mit Hilfe von Potentialen zu beschreiben.

Es gibt eine Anzahl unterschiedlicher Potentiale, die die experimentellen Daten mit gleicher Genauigkeit wiedergeben. Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Kernstrukturrechnungen wird das Argonne v_{18} Potential verwendet, das im folgenden Abschnitt diskutiert wird.

1.1 Das Argonne v_{18} Potential

Zu den wesentlichen Eigenschaften der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung gehören eine kurzreichweitige Abstoßung bei Teilchenabständen, die kleiner sind als 0.5 fm, sowie eine mittelreichweitige Anziehung im Bereich von 1 - 2 fm. Des weiteren enthält die Wechselwirkung eine Spin-Bahn-Kraft und eine Tensorkraft. Die Tensorkraft hängt von der Orientierung der Spins der beiden wechselwirkenden Teilchen ab. Sie ist analog zu der Kraft zwischen zwei Stabmagneten (siehe Kapitel 2.2).

Das Argonne v_{18} Potential gehört zu den realistischen Potentialen. Es beschreibt den langreichweitigen Teil der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung durch den Ein-Pion-



Abbildung 1.1: Radialabhängigkeiten des Argonne v_{18} Potentials für den Zentralteil (oben) und den quadratischen Bahndrehimpulsteil (unten) für die vier möglichen Spin-Isospin-Kanäle.

Austausch der Mesonentheorie und die mittel- und kurzreichweitigen Anteile durch phänomenologische Terme. Des weiteren kommt ein dritter Teil hinzu, der die elektromagnetische Wechselwirkung enthält [1].

Der phänomenologische Anteil des Potentials enthält fünf Terme: einen Zentralteil $v_{ST}^{c}(\mathbf{r})$, einen Teil, der proportional ist zum Quadrat des Bahndrehimpulses $v_{ST}^{l2}(\mathbf{r})\mathbf{l}^{2}$, einen Spin-Bahn-Teil $v_{ST}^{ls}(\mathbf{r})(\mathbf{l}\cdot\mathbf{s})$, einen quadratischen Spin-Bahn-Teil $v_{ST}^{ls}(\mathbf{r})(\mathbf{l}\cdot\mathbf{s})^{2}$ und einen Tensorteil $v_{ST}^{t}(\mathbf{r})\mathbf{s}_{12}$, wobei $\mathbf{s}_{12} = \frac{3}{\mathbf{r}^{2}}(\boldsymbol{\sigma}_{1}\cdot\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_{2}\cdot\mathbf{r}) - \boldsymbol{\sigma}_{1}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{2}$ den Tensoroperator beschreibt und $\boldsymbol{\sigma}_{i}$ den Spin des *i*-ten Teilchens. Der Ein-Pion-Austausch liefert Beiträge zum Zentralteil und zum Tensorteil der Wechselwirkung.

Das Potential enthält eine Anzahl von Parametern, die den Verlauf der Radialabhängigkeiten $v_{ST}^i(r)$ der einzelnen Anteile bestimmen. Diese Parameter werden durch

Kapitel 1 · Realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale

Anpassung an experimentelle Daten festgelegt. Da die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen bestimmt werden soll, werden Daten verwendet, die nach Möglichkeit nur Informationen über diese Zweiteilchenwechselwirkung enthalten und keine Anteile einer möglichen Drei- oder Mehrteilchenwechselwirkung. Aus diesem Grund bieten sich einerseits die Eigenschaften des Deuterons, des einzigen gebundenen Zweinukleonensystems, und andererseits Resultate aus Nukleon-Nukleon-Streuexperimenten an.



Abbildung 1.2: Radialabhängigkeiten des Argonne v_{18} Potentials für den Spin-Bahn-Teil (oben links), den quadratischen Spin-Bahn-Teil (oben rechts) und den Tensorteil (unten) für die verschiedenen Spin-Isospin-Kanäle.

Bei dem Argonne v_{18} Potential werden die Parameter durch Anpassung an die Eigenschaften des Deuterons und an Streudaten sowohl aus Proton-Proton- und Neutron-Proton-Streuung als auch aus niederenergetischer Neutron-Neutron-Streuung bestimmt. Durch dieses Vorgehen wird zum Beispiel im Gegensatz zu einigen anderen Potentialen erreicht, daß die Streuphasen aller genannten Streuungen sehr präzise beschrieben werden [1].

In den Abbildungen 1.1 und 1.2 sind die Radialabhängigkeiten $v_{ST}^i(r)$ der oben aufgeführten Terme für die einzelnen Spin-Isospin-Kanäle dargestellt. Bei einem Gesamtspin S = 0 liefern nur der Zentralteil und der quadratische Bahndrehimpulsteil Beiträge. Bei dem Tensorteil wurde zu dem phänomenologischen Term der Anteil des Ein-Pion-Austausches dazuaddiert, so daß die Radialabhängigkeit des kompletten Tensorteils aufgetragen ist.

Das Argonne v_{18} kann mit Hilfe von 18 Operatoren beschrieben werden (daher die Bezeichnung v_{18}) [1]. Davon sind 14 Operatoren ladungsunabhängig, das heißt, es wird nicht unterschieden, ob jeweils zwei Protonen, zwei Neutronen oder Proton und Neutron miteinander wechselwirken. Offensichtlich ist die Coulombwechselwirkung nicht ladungsunabhängig, aber hier werden nur die Eigenschaften der starken Wechselwirkung behandelt. Diese 14 Operatoren bilden das Argonne v_{14} Potential [16], den Vorgänger des Argonne v_{18} . Beim Argonne v_{18} werden einige Terme hinzugefügt, die die Symmetrie der Ladungsunabhängigkeit der starken Wechselwirkung brechen und dadurch die Übereinstimmung mit Streudaten verbessern. Es gibt einen ladungsabhängigen Teil mit drei Operatoren, das bedeutet, daß zwar die Wechselwirkung zwischen zwei Protonen identisch zu der zwischen zwei Neutronen ist, aber sie unterscheidet sich von der Wechselwirkung zwischen Proton und Neutron. Schließlich gibt es noch einen Teil, der einen Operator enthält und schwach die Ladungssymmetrie bricht. Dieser Term unterscheidet also auch zwischen der Wechselwirkung zwischen zwei Protonen und zwei Neutronen. Kapitel 1 · Realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale

Kapitel 2

Die Methode der unitären Korrelatoren

Durch die Entwicklung realistischer Potentiale ist es möglich geworden, in der Kernstruktur sogenannte ab initio Rechnungen durchzuführen, bei denen keine weiteren Näherungen nötig sind. Allerdings ist dieser Weg sehr rechenaufwendig, wie zum Beispiel das No-Core-Schalenmodell zeigt. Daher können mit dieser Methode nur kleine Kerne mit Massenzahlen $A \lesssim 16$ behandelt werden [17]. Das Ziel ist nun, diese Kernstrukturuntersuchungen auf die ganze Nuklidkarte zu erweitern und dabei möglichst nahe am Prinzip der ab initio Methoden zu bleiben. Eine Möglichkeit, auch schwere Kerne zu beschreiben, bietet die Hartree-Fock-Methode (siehe Kapitel 3). Dabei wird der Grundzustand eines Kerns durch eine einzelne Slaterdeterminante beschrieben. Das Problem, das bei diesem Ansatz auftaucht, ist, daß eine Slaterdeterminante die starken kurzreichweitigen Korrelationen, die durch das realistische Nukleon-Nukleon-Potential hervorgerufen werden, nicht beschreiben kann. Auch eine Uberlagerung von mehreren Slaterdeterminanten reicht hier nicht aus. Um dieses Problem zu lösen, wird die Methode der unitären Korrelatoren (Unitary Correlation Operator Method, UCOM) eingeführt [2, 3, 4, 5]. Darin werden die kurzreichweitigen Korrelationen explizit behandelt, indem sie dem Anfangszustand durch eine zustandsunabhängige, unitäre Transformation aufgeprägt werden:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = C|\Psi\rangle$$
 . (2.1)

Dabei ist C der zustandsunabhängige, unitäre Korrelationsoperator, durch dessen Anwendung auf den Zustand $|\Psi\rangle$ der korrelierte Zustand $|\tilde{\Psi}\rangle$ gebildet wird, der die kurzreichweitigen Korrelationen enthält. Dieser korrelierte Zustand ist nicht mehr durch eine Slaterdeterminante darstellbar.

Die Berechnung von Matrixelementen eines Operators O mit korrelierten Zuständen ist äquivalent zur Berechnung dieser Matrixelemente mit unkorrelierten Zuständen und statt dessen korreliertem Operator \tilde{O} [2, 3, 4, 5]:

$$\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{O} | \tilde{\Psi}' \rangle = \langle \Psi | \mathcal{C}^{\dagger} \mathcal{O} \mathcal{C} | \Psi' \rangle = \langle \Psi | \tilde{\mathcal{O}} | \Psi' \rangle .$$
 (2.2)

Dabei ergibt sich der korrelierte Operator aus der Ähnlichkeitstransformation

$$\tilde{O} = C^{\dagger}OC = C^{-1}OC .$$
(2.3)

Da es sich bei dem Korrelator C um einen unitären Operator handelt, ist die Darstellung mit korrelierten Zuständen äquivalent zu der mit korrelierten Operatoren. Daher kann je nach Anwendung die günstigere Möglichkeit ausgewählt werden.

Im Rahmen dieser Transformation werden zwei Korrelationsarten behandelt. Zum einen gibt es starke kurzreichweitige Zentralkorrelationen, die aus der kurzreichweitigen Abstoßung der nuklearen Wechselwirkung resultieren (vgl. Abbildung 1.1). Zum anderen hat die Tensorkraft der Wechselwirkung starke Tensorkorrelationen zur Folge. Diese Tensorkorrelationen haben sowohl kurzreichweitige als auch langreichweitige Anteile. Mit dem Korrelationsoperator wird nur der kurzreichweitige Teil behandelt, worauf in Abschnitt 2.4 noch genauer eingegangen wird.

Aufgrund dieser zwei verschiedenartigen Korrelationen wird auch der Korrelationsoperator in zwei Teile aufgespalten [5, 17]:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_{\Omega} \mathbf{C}_r \,\,, \tag{2.4}$$

wobei C_r den unitären Zentralkorrelator beschreibt und C_{Ω} den unitären Tensorkorrelator.

Der Einfluß der erwähnten Korrelationen ist bereits am Beispiel des Deuterons deutlich zu erkennen [5, 17, 18]. Der Gesamtspin des Deuterons beträgt S = 1. Auf der linken Seite von Abbildung 2.1 ist die spinprojizierte Zweiteilchendichteverteilung für den Fall dargestellt, daß die magnetische Spinquantenzahl $M_S = 0$ beträgt, das bedeutet, daß die Spins der beiden Nukleonen antiparallel zueinander ausgerichtet sind. Die Oberfläche ist bei einer Dichte von 0.005 fm^{-3} eingezeichnet. Die rechte Seite der Abbildung zeigt die Dichteverteilung des Deuterons für den Fall, daß die Spins der Nukleonen parallel zueinander stehen, also $M_S = \pm 1$. In beiden Fällen ist die Wahrscheinlichkeit, beide Nukleonen am gleichen Ort zu finden, sehr gering, da sie durch die abstoßenden Zentralkorrelationen voneinander entfernt werden. Die Tensorkorrelationen hängen von der Orientierung der Spins ab. Sie führen dazu, daß sich im Fall von antiparallelen Spins die maximale Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das zweite Teilchen



Abbildung 2.1: Zweiteilchendichteverteilung des Deuterons. Die Oberfläche zeigt eine Dichte von 0.005 fm^{-3} . Die Dichteverteilung wurde auf die beiden Möglichkeiten von antiparallelen Spins (links) beziehungsweise parallelen Spins (rechts) projiziert (aus [17]).

in einem Torus um das erste Teilchen konzentriert, dagegen bildet sich bei parallelen Spins eine Art Hantel aus.

Allein an diesem Beispiel ist zu erkennen, daß diese Korrelationen einen wesentlichen Beitrag zu den Eigenschaften der Kerne liefern und es daher sinnvoll ist, sie explizit zu behandeln. Da es sich bei den hier verwendeten Korrelatoren um unitäre Operatoren handelt, können sie als Exponentialfunktion eines hermiteschen Generators G geschrieben werden [3, 17]:

$$C_r = e^{-iG_r} = \exp\{-i\sum_{i < j} g_{r,ij}\}$$

$$C_\Omega = e^{-iG_\Omega} = \exp\{-i\sum_{i < j} g_{\Omega,ij}\}.$$
(2.5)

Dabei werden die Generatoren G durch Zweiteilchenoperatoren dargestellt, da es sich bei den zu beschreibenden Korrelationen um Zweiteilchenkorrelationen handelt. Die Form der Generatoren g_r und g_{Ω} wird durch die Struktur der Korrelationen festgelegt. Die Darstellung der Korrelatoren wird für den Zentralkorrelator in Abschnitt 2.1 und für den Tensorkorrelator in Abschnitt 2.2 diskutiert. Anschließend wird auf die Spin-Isospin-Abhängigkeit der Korrelatoren eingegangen (Abschnitt 2.3) und eine wichtige Eigenschaft von korrelierten Operatoren, die Clusterentwicklung, behandelt (Abschnitt 2.4). Danach werden in Abschnitt 2.5 die korrelierte Wechselwirkung V_{UCOM} und in Abschnitt 2.6 ihre Zweiteilchenmatrixelemente bestimmt. Schließlich wird noch auf die Bestimmung der Korrelationsfunktionen eingegangen (Abschnitt 2.7).

2.1 Der Zentralkorrelator

Die kurzreichweitige Abstoßung im Zentralteil der nuklearen Wechselwirkung verhindert, daß der Abstand zwischen jeweils zwei Nukleonen zu klein wird. Das hat zur Folge, daß die Zweiteilchendichteverteilung bei kleinen Teilchenabständen ein Loch aufweist. Dieses Korrelationsloch kann jedoch mit Hilfe von einfachen Mean-Field-Zuständen, wie zum Beispiel Slaterdeterminanten bei der Hartree-Fock-Methode, nicht reproduziert werden. Um diese kurzreichweitige Abstoßung in die Mean-Field-Zustände einzubringen, wird der Zentralkorrelator so konstruiert, daß zwei Nukleonen in radialer Richtung voneinander entfernt werden, sobald ihr Abstand zu klein wird [2, 3].

Radiale Verschiebungen werden durch den Radialteil des Relativimpulses $\mathbf{q} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$ der beiden Teilchen generiert:

$$q_r = \frac{1}{2} \left(\mathbf{q} \cdot \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{q} \right) , \qquad (2.6)$$

wobei $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ den Teilchenabstand beschreibt. Zusätzlich muß die Verschiebung abstandsabhängig sein, denn je kleiner ihr Abstand ist umso weiter müssen die Teilchen voneinander entfernt werden. Und wenn der Teilchenabstand bereits groß genug ist, soll der Korrelator nicht mehr wirken. Zu diesem Zweck wird die Verschiebungsfunktion s(r)eingeführt, über die die Abstandsabhängigkeit der Verschiebung definiert wird. Damit kann der Generator des Zentralkorrelators in hermitescher Darstellung folgendermaßen geschrieben werden [2, 3]:

$$g_r = \frac{1}{2}(s(r)q_r + q_r s(r))$$
 (2.7)

Als Beispiel wird im folgenden der Zentralkorrelator im Zweiteilchenraum auf eine Zweiteilchenwellenfunktion $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ angewendet. Der Korrelator wirkt nicht auf den Schwerpunktanteil $|\Phi\rangle$, sondern nur auf die Relativwellenfunktion $|\varphi\rangle$. Die Anwendung des Generators liefert in Ortsdarstellung

$$\langle \boldsymbol{r} | \mathbf{g}_r | \varphi \rangle = -\mathbf{i} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial s(r)}{\partial r} + \frac{s(r)}{r} + s(r) \frac{\partial}{\partial r} \right) \langle \boldsymbol{r} | \varphi \rangle$$

$$= -\mathbf{i} \frac{1}{r\sqrt{s(r)}} s(r) \frac{\partial}{\partial r} r \sqrt{s(r)} \langle \boldsymbol{r} | \varphi \rangle .$$

$$(2.8)$$

Im Zweiteilchenraum ist der Zentralkorrelator durch $c_r = \exp\{-ig_r\}$ gegeben. Daraus

2.2 · Der Tensorkorrelator

ergibt sich

$$\langle \boldsymbol{r} | c_r | \varphi \rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{r\sqrt{s(r)}} s(r) \frac{\partial}{\partial r} r \sqrt{s(r)} \right\} \langle \boldsymbol{r} | \varphi \rangle$$

$$= \frac{1}{r\sqrt{s(r)}} \exp \left\{ -s(r) \frac{\partial}{\partial r} \right\} r \sqrt{s(r)} \langle \boldsymbol{r} | \varphi \rangle ,$$
 (2.9)

wobei die letzte Zeile folgt, wenn die Exponentialfunktion als Reihe ausgeschrieben wird [2, 3].

Diese Darstellung legt es nahe, eine Koordinatentransformation $s(r)\frac{\partial}{\partial r} \rightarrow \frac{\partial}{\partial y}$ durchzuführen. Diese Transformation liefert als Ergebnis [2, 3]

$$\langle \boldsymbol{r} | c_r | \varphi \rangle = \frac{R_-(r)}{r} \sqrt{R'_-(r)} \langle R_-(r) \frac{\boldsymbol{r}}{r} | \varphi \rangle .$$
 (2.10)

Das bedeutet, daß die Anwendung des Korrelationsoperators c_r zu einer normerhaltenden Koordinatentransformation $r \to R_-(r)\frac{r}{r}$ führt. Dabei werden die Funktionen $R_-(r)$ und ihre Inverse $R_+(r)$ Korrelationsfunktionen genannt. Sie sind mit der Verschiebungsfunktion s(r) über folgende Beziehung verknüpft:

$$\int_{r}^{R_{\pm}(r)} \frac{d\xi}{s(\xi)} = \pm 1 .$$
(2.11)

Auf die Bestimmung des Verlaufs der Korrelationsfunktionen wird in Abschnitt 2.7 eingegangen.

Aus der ersten Ordnung der Taylorentwicklung

$$R_{\pm}(r) = r \pm s(r) + \dots$$
 (2.12)

wird ersichtlich, daß die Nukleonen für $s(r) \ll r$ gerade um s(r) voneinander entfernt werden, wenn sie sich vorher im Abstand r zueinander befanden [3]. Damit wurde also die gewünschte abstandsabhängige Verschiebung durchgeführt.

2.2 Der Tensorkorrelator

Die Tensorkraft der nuklearen Wechselwirkung führt zu starken Korrelationen zwischen den Spins σ_1 und σ_2 von zwei Nukleonen und ihrer relativen räumlichen Orientierung. Diese Art der Wechselwirkung ist in Abbildung 2.2 anschaulich dargestellt. Die Zahlen geben Werte für die Tensorwechselwirkungsenergie $V_T = -(\frac{3}{r^2}(\sigma_1 \cdot r)(\sigma_2 \cdot r) - (\sigma_1 \cdot \sigma_2))$ an [17, 18]. Für den Fall von antiparallel zueinander ausgerichteten Spins (links) ist eine

Kapitel 2 · Die Methode der unitären Korrelatoren



Abbildung 2.2: Veranschaulichung der Tensorwechselwirkung für (a) antiparallele Spins und (b) parallele Spins. Die Zahlen geben Werte für die Tensorwechselwirkungsenergie V_T an (aus [17]).

Ausrichtung der Spins senkrecht zu ihrer Verbindungsachse r energetisch am günstigsten. Parallele Spins (rechts) richten sich dagegen entlang ihrer Verbindungsachse aus. Die Tensorwechselwirkung ist also analog zur magnetischen Wechselwirkung zwischen zwei Dipolen.

Um diese Tensorkorrelationen in den Anfangszustand einzubauen, werden die Nukleonen senkrecht zu ihrer Verbindungsachse verschoben. Radiale Verschiebungen werden durch den Radialteil des Relativimpulses generiert (siehe Abschnitt 2.1), dazu senkrechte Verschiebungen durch den verbleibenden Winkelteil des Relativimpulses:

$$\mathbf{q}_{\Omega} = \mathbf{q} - \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \mathbf{q}_{r} = \frac{1}{2\mathbf{r}^{2}} (\mathbf{l} \times \mathbf{r} - \mathbf{r} \times \mathbf{l}) , \qquad (2.13)$$

wobei $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{q}$ den Bahndrehimpulsoperator bezeichnet. Zusammen mit den Spinoperatoren σ_1 und σ_2 wird hieraus ein Tensorgenerator konstruiert, der den komplexen Zusammenhang zwischen den Spins und ihrer relativen räumlichen Orientierung wiedergibt [5, 17]:

$$g_{\Omega} = \frac{3}{2} \vartheta(\mathbf{r}) [(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{q}_{\Omega})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{q}_{\Omega})] = \vartheta(\mathbf{r}) \mathbf{s}_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_{\Omega}) .$$
(2.14)

Dabei hat der Tensoroperator allgemein die folgende Form [19]:

$$s_{12}(\mathbf{a},\mathbf{b}) = \frac{3}{2}[(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{b}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{b})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{a})] - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) .$$
(2.15)



Abbildung 2.3: Konstruktion einer realistischen Deuteronwellenfunktion durch Anwendung der unitären Korrelatoren. Auf die unkorrelierte Anfangswellenfunktion (a) wird der Zentralkorrelator mit der Korrelationsfunktion (d) angewendet. Dies führt zu der Wellenfunktion (b), auf die der Tensorkorrelator mit der Korrelationsfunktion (e) wirkt. Das Ergebnis (c) ist eine realistische Deuteronwellenfunktion mit D-Wellenbeimischung (aus [17]).

Daraus wird ersichtlich, daß der neu eingeführte Tensoroperator $s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_{\Omega})$ die gleiche Struktur hat wie der gewöhnliche Tensoroperator $s_{12} = \frac{3}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = s_{12}(\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}})$. Die Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$ gibt analog zu s(r) die Stärke und radiale Abhängigkeit der Transversalverschiebung an.

Zur Illustration wird nun der Tensorkorrelator $c_\Omega = \exp\{-ig_\Omega\}$ auf einen Zweiteil-

chenzustand angewendet. Dazu wird ein Zustand $|\varphi; (LS)J\rangle$ verwendet, dessen Einteilchenbahndrehimpulse und -spins zu einem Gesamtbahndrehimpuls L beziehungsweise Gesamtspin S gekoppelt sind. Diese sind wiederum zu einem Gesamtdrehimpuls Jgekoppelt. Als Beispiel werden die Quantenzahlen des Deuterons eingesetzt: L = 0, S = 1 und J = 1. Die Anwendung des Tensorkorrelators liefert in Ortsdarstellung [17]

$$\langle \boldsymbol{r} | c_{\Omega} | \varphi; (01)1 \rangle = \cos(3\sqrt{2}\vartheta(r)) \langle \boldsymbol{r} | \varphi; (01)1 \rangle + \sin(3\sqrt{2}\vartheta(r)) \langle \boldsymbol{r} | \varphi; (21)1 \rangle .$$

$$(2.16)$$

Das bedeutet, daß der korrelierte Zustand eine Uberlagerung aus dem modifizierten L = 0 Zustand und einem L = 2 Zustand ist, wobei der Anteil der L = 2 Beimischung durch die Korrelationsfunktion $\vartheta(r)$ festgelegt wird.

In Abbildung 2.3 werden die Wirkungen des Zentralkorrelators und des Tensorkorrelators noch einmal zusammengefaßt. Feld (a) zeigt eine einfache, unkorrelierte Wellenfunktion des Deuterons mit Bahndrehimpuls L = 0. Die Anwendung des Zentralkorrelators führt zu der Wellenfunktion (b), die bereits das Korrelationsloch bei kleinen Teilchenabständen aufweist. Der Verlauf der Korrelationsfunktion ist in Feld (d) dargestellt. Um die Aufenthaltswahrscheinlichkeit aus dem Zentralbereich nach aussen zu schieben, muß die Korrelationsfunktion bei sehr kleinen Abständen eine große Amplitude aufweisen und nach außen hin schnell abfallen. Die anschließende Anwendung des Tensorkorrelators liefert eine D-Wellenbeimischung (Feld (c)) und damit eine realistische Deuteronwellenfunktion. In Feld (e) ist zu sehen, daß die Tensorkorrelationsfunktion sehr langreichweitig ist, was eine langreichweitige D-Wellenbeimischung zur Folge hat [17].

2.3 Spin-Isospin-Abhängigkeit

Die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung kann auf die vier verschiedenen Spin-Isospin (ST) Kanäle projiziert werden [1]. Dies ist eine nützliche Darstellung, da zum Beispiel die Spin-Bahn-Kraft und die Tensorkraft nur Beiträge zu den S = 1 Kanälen liefern. Es ist daher naheliegend, auch die Generatoren des Zentralkorrelators und des Tensorkorrelators in diese Anteile zu zerlegen [17, 18]:

$$g = \sum_{ST} g_{ST} \Pi_{ST} , \qquad (2.17)$$

wobei Π_{ST} auf den ST-Unterraum projiziert. Damit gilt für die Korrelatoren im Zweiteilchenraum:

$$c = \exp\{-ig\} = \exp\{-i\sum_{ST} g_{ST}\Pi_{ST}\} = \sum_{ST} \exp\{-ig_{ST}\}\Pi_{ST} = \sum_{ST} c_{ST}\Pi_{ST} .$$
(2.18)

Das bedeutet, daß die Korrelatoren für die einzelnen Spin-Isospin-Kanäle getrennt behandelt werden können.

2.4 Clusterentwicklung

Der Korrelationsoperator C im Vielteilchenraum ist als Exponentialfunktion einer Summe über Zweiteilchenoperatoren definiert. Das bedeutet, daß der Korrelationsoperator selbst und alle korrelierten Operatoren \tilde{O} irreduzible Anteile von Operatoren mit höherer Teilchenzahl enthalten [5, 17, 18]. Ein korrelierter Operator kann folgendermaßen zerlegt werden:

$$\tilde{O} = C^{\dagger}OC = \tilde{O}^{[1]} + \tilde{O}^{[2]} + \tilde{O}^{[3]} + \dots ,$$
 (2.19)

wobei $\tilde{O}^{[n]}$ einen irreduziblen *n*-Teilchenoperator bezeichnet. In einer orthonormalen Einteilchenbasis $\{|k\rangle\}$ mit $|k\rangle = a_k^{\dagger}|0\rangle$ lassen sich die irreduziblen Operatoren rekursiv darstellen [5, 18]:

$$\tilde{O}^{[1]} = \sum_{k,k'} \langle k | C^{\dagger} O C | k' \rangle a_k^{\dagger} a_{k'} = \sum_{k,k'} \langle k | O | k' \rangle a_k^{\dagger} a_{k'} , \qquad (2.20)$$

$$\tilde{O}^{[2]} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k'_1, k'_2}} {}_a \langle k_1, k_2 | C^{\dagger} O C - \tilde{O}^{[1]} | k'_1, k'_2 \rangle_a a^{\dagger}_{k_1} a^{\dagger}_{k_2} a_{k'_2} a_{k'_1} , \qquad (2.21)$$

$$\tilde{O}^{[n]} = \frac{1}{(n!)^2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ k'_1, \dots, k'_n}} {}_a \langle k_1, \dots, k_n | C^{\dagger} OC - \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{O}^{[i]} | k'_1, \dots, k'_n \rangle_a$$

$$\times a^{\dagger}_{k_1} \dots a^{\dagger}_{k_n} a_{k'_n} \dots a_{k'_1} .$$
(2.22)

Dabei deutet der Index *a* an, daß es sich um antisymmetrisierte Zustände handelt. Das bedeutet, daß bei jeder Ordnung der sogenannten Clusterentwicklung die Beiträge aller vorangegangenen Ordnungen abgezogen werden müssen.

Wenn es sich bei dem Operator O um einen k-Teilchenoperator handelt, so verschwinden in der Clusterentwicklung alle irreduziblen Beiträge mit n < k. Daraus

folgt, daß zum Beispiel die korrelierte Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung aus einem irreduziblen Zweiteilchenoperator, einem Dreiteilchenoperator und so weiter aufgebaut ist.

Die Beiträge der irreduziblen Operatoren nehmen mit steigender Ordnungszahl ab. Da bereits die Berechnung der dritten Ordnung recht aufwendig ist, wäre es wünschenswert, alle Beiträge jenseits der zweiten Ordnung zu vernachlässigen. Dies führt zu der sogenannten Zweiteilchennäherung:

$$\tilde{O}^{C2} = \tilde{O}^{[1]} + \tilde{O}^{[2]} .$$
(2.23)

Diese Näherung ist gerechtfertigt, wenn die Dichte des betrachteten Systems klein ist und die Reichweiten der beiden Korrelatoren hinreichend kurz [17, 18]. Wenn die Korrelatorreichweite größer wird als der mittlere Teilchenabstand, so erhöht sich die Wahrscheinlichkeit, daß sich mehr als zwei Teilchen gleichzeitig im Korrelationsvolumen aufhalten. Dann liefern auch höhere Ordnungen wesentliche Beiträge zur Clusterentwicklung.

Für den Zentralkorrelator ist diese Bedingung automatisch erfüllt, da er lediglich die kurzreichweitige Abstoßung der nuklearen Wechselwirkung behandelt. In Abbildung 2.3(d) ist zu sehen, daß die Reichweite des Zentralkorrelators kleiner ist als der mittlere Teilchenabstand, der bei Sättigungsdichte 1.8 fm beträgt. Dagegen ist der Tensorkorrelator sehr langreichweitig, wie in Abbildung 2.3(e) gezeigt. Hier ist allerdings die Korrelationsfunktion für den Fall des Deuterons dargestellt. In größeren Kernen können sich die Tensorkorrelationen zwischen zwei Nukleonen nicht über so große Abstände ausbilden, da sich dann mehr als zwei Nukleonen im Korrelationsvolumen aufhalten und eine effektive Abschirmung bewirken [17]. Das bedeutet, daß die Reichweite des Tensorkorrelators sinnvoll begrenzt werden kann und somit die Zweiteilchennäherung (2.23) gültig ist.

2.5 Korrelierte Wechselwirkung

Durch Anwendung der in Abschnitt 2.1 und 2.2 bestimmten Korrelationsoperatoren wird im folgenden die korrelierte Wechselwirkung V_{UCOM} bestimmt, die sich aus dem Argonne v_{18} Potential ergibt. Der korrelierte Hamiltonoperator im Zweiteilchenraum

$$\tilde{H} = \tilde{T} + \tilde{V} = \tilde{T}^{[1]} + \tilde{T}^{[2]} + \tilde{V}^{[2]}$$
(2.24)

setzt sich zusammen aus der unkorrelierten kinetischen Energie $\tilde{T}^{[1]} = T$, sowie der korrelierten kinetischen Energie $\tilde{T}^{[2]}$ und der korrelierten Zweiteilchenwechselwirkung

2.5 · Korrelierte Wechselwirkung

 $\tilde{V}^{[2]}$ [17, 19]. Die erste Ordnung der kinetischen Energie $\tilde{T}^{[1]}$ ist gleich der unkorrelierten kinetischen Energie T, da es sich bei den Generatoren der Korrelationsoperatoren um Zweiteilchenoperatoren handelt, die keine Wirkung auf den Einteilchenteil von Einteilchenoperatoren haben (siehe Gleichung (2.20)). Die korrelierte kinetische Energie und die korrelierte Zweiteilchenwechselwirkung bilden zusammen die korrelierte Wechselwirkung V_{UCOM}:

$$\tilde{H} = T + \tilde{T}^{[2]} + \tilde{V}^{[2]} = T + V_{UCOM}$$
 (2.25)

Die kinetische Energie kann zerlegt werden in einen Schwerpunktanteil t_{cm} , der von den Korrelatoren nicht beeinflußt wird, und einen Relativteil t_{rel} , der wiederum in einen Radial- und einen Winkelterm aufgespalten wird:

$$T = t_{cm} + t_{rel} = t_{cm} + t_r + t_{\Omega} = t_{cm} + \frac{1}{m} \left(q_r^2 + \frac{l^2}{r^2} \right) .$$
 (2.26)

Dabei bezeichnet m die Nukleonenmasse.

Der ladungsunabhängige Teil des Argonne v_{18} Potentials kann folgendermaßen geschrieben werden (vgl. Kapitel 1.1) [1]:

$$V = \sum_{S,T} \{ v_{ST}^{c}(\mathbf{r}) + v_{ST}^{l2}(\mathbf{r}) \mathbf{l}^{2} \} \Pi_{ST} + \sum_{T} \{ v_{T}^{t}(\mathbf{r}) \mathbf{s}_{12} + v_{T}^{ls}(\mathbf{r}) (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + v_{T}^{ls2}(\mathbf{r}) (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})^{2} \} \Pi_{1T} , \qquad (2.27)$$

wobei Π_{ST} auf Spin S und Isospin T projiziert. Mit dem Projektionsoperator Π_S , der auf den Spinraum projiziert, und dem Tensoroperator $s_{12}(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ aus Gleichung (2.15) kann der quadratische Spin-Bahn-Term in

$$(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})^2 = \frac{2}{3} \mathbf{l}^2 \Pi_1 - \frac{1}{2} (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + \frac{1}{6} \mathbf{s}_{12} (\mathbf{l}, \mathbf{l})$$
 (2.28)

umgeschrieben werden [17].

Um die korrelierte Wechselwirkung zu bestimmen, werden zunächst die auftretenden Operatoren korreliert. Dazu müssen die Operatoren $r, q_r^2, l^2, (l \cdot s), s_{12}$ und $s_{12}(l, l)$ betrachtet werden.

Tensorkorrelierte Operatoren

In einem ersten Schritt wird der Tensorkorrelator $c_\Omega = \exp\{-ig_\Omega\}$ auf die Operatoren angewendet. Um die Ähnlichkeitstransformation $c_\Omega^\dagger O c_\Omega$ auszuwerten, kann die Baker-

Campbell-Hausdorff-Beziehung

$$c_{\Omega}^{\dagger}Oc_{\Omega} = \exp\{ig_{\Omega}\} O \exp\{-ig_{\Omega}\} = O + i[g_{\Omega}, O] + \frac{i^{2}}{2!}[g_{\Omega}, [g_{\Omega}, O]] + \dots$$
 (2.29)

verwendet werden [17, 19].

Die einzigen Operatoren, die nach der Transformation exakt in geschlossener Form angegeben werden können, sind der Abstandsoperator r und der quadratische Relativimpuls q_r^2 . Für alle anderen benötigten Operatoren liefert die Baker-Campbell-Hausdorff-Entwicklung eine unendliche Reihe. Der Abstandsoperator r kommutiert mit dem Generator g_{Ω} , das bedeutet, daß r unter Tensorkorrelationen invariant ist:

$$c_{\Omega}^{\dagger}rc_{\Omega}=r$$
 (2.30)

Für den quadratischen Relativimpuls q_r^2 bricht die Kommutatorentwicklung nach der ersten Ordnung ab und liefert als Ergebnis

$$c_{\Omega}^{\dagger}q_{r}^{2}c_{\Omega} = q_{r}^{2} - [\vartheta'(\mathbf{r})q_{r} + q_{r}\vartheta'(\mathbf{r})]s_{12}(\mathbf{r},\mathbf{q}_{\Omega}) + (\vartheta'(\mathbf{r})s_{12}(\mathbf{r},\mathbf{q}_{\Omega}))^{2}$$

$$= q_{r}^{2} - [\vartheta'(\mathbf{r})q_{r} + q_{r}\vartheta'(\mathbf{r})]s_{12}(\mathbf{r},\mathbf{q}_{\Omega}) + \vartheta\vartheta'(\mathbf{r})^{2}[\mathbf{s}^{2} + 3(\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}) + (\mathbf{l}\cdot\mathbf{s})^{2}].$$

(2.31)

Bei den verbleibenden vier Operatoren muß die gesamte Baker-Campbell-Hausdorff-Entwicklung ausgewertet werden. In der ersten Ordnung treten folgende Kommutatoren auf [17, 19]:

$$[\mathbf{g}_{\Omega}, \mathbf{l}^2] = \mathbf{i}\vartheta(\mathbf{r})(2 \ \bar{\mathbf{s}}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})) \tag{2.32}$$

$$[\mathbf{g}_{\Omega}, (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})] = \mathbf{i}\vartheta(\mathbf{r})(-\bar{\mathbf{s}}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}))$$

$$[\mathbf{g}_{\Omega}, \mathbf{s}_{12}] = \mathbf{i}\vartheta(\mathbf{r})(-24\Pi_{12} - 18(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + 3\mathbf{s}_{12})$$

$$(2.33)$$

$$[g_{\Omega}, s_{12}] = i\vartheta(\mathbf{r})(-24\Pi_1 - 18(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + 3s_{12})$$
(2.34)

$$[\mathbf{g}_{\Omega}, \mathbf{s}_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l})] = i\vartheta(\mathbf{r})(7 \, \bar{\mathbf{s}}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})) \,. \tag{2.35}$$

Dabei wurde die Abkürzung

$$\bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega},\mathbf{q}_{\Omega}) = 2r^2 s_{12}(\mathbf{q}_{\Omega},\mathbf{q}_{\Omega}) + s_{12}(\mathbf{l},\mathbf{l}) - \frac{1}{2}s_{12}$$
 (2.36)

eingeführt. Der Operator $\bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})$ kommt in der ersten Ordnung der Entwicklung neu hinzu. In der zweiten Ordnung muß dann der Kommutator $[g_{\Omega}, \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})]$ berechnet werden, der wiederum einen neuen Operator generiert und so weiter. Um eine geschlossene Darstellung der tensorkorrelierten Operatoren zu erhalten, wird die Anzahl der neu auftretenden Operatoren begrenzt. Für diese wird dann die gesamte Baker-Campell-Hausdorff-Entwicklung berechnet [17].



Abbildung 2.4: Wirkung des Tensorkorrelators auf den Tensorteil des Argonne v_{18} Potentials im S = 1, T = 0 Kanal. (a) Radialabhängigkeiten des unkorrelierten (gestrichelt) und des korrelierten (durchgezogen) Tensorteils sowie neue Beiträge im Zentralteil (b) und im Spin-Bahn-Teil (c), die durch Anwendung des Tensorkorrelators generiert werden (aus [17]).

Um die Wirkung des Tensorkorrelators zu veranschaulichen, wird er auf den Tensorteil des Argonne v_{18} Potentials im S = 1, T = 0 Kanal angewendet. Das Ergebnis ist in Abbildung 2.4 dargestellt. In Feld (a) sind die unkorrelierte (gestrichelt) und die korrelierte (durchgezogen) Radialabhängigkeit des Tensorteils aufgetragen. Zusätzlich werden neue Beiträge zum Zentralteil und zum Spin-Bahn-Teil des Potentials erzeugt, deren Radialabhängigkeiten in den Feldern (b) und (c) dargestellt sind. Das bedeutet, daß ein Teil der Tensoranziehung auf andere Operatorkanäle übertragen wird [17].

Zentral- und tensorkorrelierte Operatoren

Auf die tensorkorrelierten Operatoren muß anschließend noch der Zentralkorrelator angewendet werden, um die vollständige Transformation zu erhalten. Wie in Abschnitt 2.1 gezeigt wurde, kann die Wirkung des Zentralkorrelators auf eine Zweiteilchenwellenfunktion durch eine normerhaltende Koordinatentransformation dargestellt werden. Dies kann auf die korrelierten Operatoren übertragen werden, so daß diese exakt bestimmt werden können. Dafür ist es nicht notwendig, die Baker-Campbell-Hausdorff-Entwicklung auszuwerten.

Der zentralkorrelierte Abstandsoperator r wird durch die Korrelationsfunktion $R_+(r)$ (siehe Abschnitt 2.1) beschrieben:

$$\mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{r} \mathbf{c}_r = R_+(\mathbf{r}) \ . \tag{2.37}$$

Darüber hinaus transformiert sich eine beliebige Funktion von r wie folgt [19]:

$$c_r^{\dagger} f(\mathbf{r}) c_r = f(c_r^{\dagger} \mathbf{r} c_r) = f(R_+(\mathbf{r}))$$
 (2.38)

19

Auf diese Weise lassen sich zum Beispiel die Radialabhängigkeiten der Zweiteilchenwechselwirkung korrelieren: $c_r^{\dagger} v_{ST}^i(\mathbf{r}) c_r = v_{ST}^i(R_+(\mathbf{r})).$

Für die Komponenten des Relativimpulses ergibt sich nach Anwendung des Zentralkorrelators [17]

$$c_r^{\dagger}q_r c_r = \frac{1}{\sqrt{R'_+(\mathbf{r})}} q_r \frac{1}{\sqrt{R'_+(\mathbf{r})}} \qquad \text{bzw.} \qquad c_r^{\dagger}\mathbf{q}_{\Omega}c_r = \frac{\mathbf{r}}{R_+(\mathbf{r})} \mathbf{q}_{\Omega} , \qquad (2.39)$$

und für den quadratischen Radialteil erhält man

$$c_r^{\dagger} q_r^2 c_r = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{R'_+(r)^2} q_r^2 + q_r^2 \frac{1}{R'_+(r)^2} \right\} + \frac{7R''_+(r)^2}{4R'_+(r)^4} - \frac{R'''_+(r)}{2R'_+(r)^3} .$$
(2.40)

Dabei fällt auf, daß zusätzlich zum impulsabhängigen Teil ein lokales Potential erzeugt wird.

Alle anderen Operatoren, die in der Zweiteilchenwechselwirkung auftreten (l^2 , $(l \cdot s)$, s_{12} und $s_{12}(l, l)$) sowie alle Operatoren, die bei Anwendung des Tensorkorrelators durch die Baker-Campbell-Hausdorff-Entwicklung generiert werden ($\bar{s}_{12}(q_{\Omega}, q_{\Omega})$, ...), sind invariant unter der Ähnlichkeitstransformation des Zentralkorrelators.

Korrelierte Wechselwirkung

Aus den Beziehungen der vorangegangenen Unterabschnitte lassen sich die Ausdrücke für die korrelierte kinetische Energie $\tilde{t}_r^{[2]} = c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} t_r c_{\Omega} c_r - t_r$ und $\tilde{t}_{\Omega}^{[2]} = c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} t_{\Omega} c_{\Omega} c_r - t_{\Omega}$ sowie für die korrelierte Zweiteilchenwechselwirkung $\tilde{V}^{[2]} = c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} V c_{\Omega} c_r$ direkt ablesen. Die korrelierte Wechselwirkung V_{UCOM} kann ebenso wie die unkorrelierte Zweiteilchenwechselwirkung in Operatorform dargestellt werden [17, 19]:

$$V_{\text{UCOM}} = \sum_{ST} \{ \tilde{v}_{ST}^{c}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} [\tilde{v}_{ST}^{qr2}(\mathbf{r})\mathbf{q}_{r}^{2} + \mathbf{q}_{r}^{2}\tilde{v}_{ST}^{qr2}(\mathbf{r})] + \tilde{v}_{ST}^{l2}(\mathbf{r})\mathbf{l}^{2} \} \Pi_{ST} + \sum_{T} \{ \tilde{v}_{T}^{ls}(\mathbf{r})(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + \tilde{v}_{T}^{t}(\mathbf{r})\mathbf{s}_{12} + \tilde{v}_{T}^{tll}(\mathbf{r})\mathbf{s}_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}) + \tilde{v}_{T}^{tqq}(\mathbf{r})\bar{\mathbf{s}}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) + \dots \} \Pi_{1T} .$$
(2.41)

Dabei deuten die Punkte an, daß hier nicht alle Operatoren, die durch die Baker-Campbell-Hausdorff-Entwicklung generiert werden, aufgeschrieben wurden.

Die Existenz dieser Operatordarstellung ist wesentlich für einige Vielteilchenmodelle, die nicht auf einfachen Basen, wie zum Beispiel harmonischen Oszillatorzuständen oder ebenen Wellen, aufgebaut sind. Darüber hinaus können ohne großen Aufwand verschiedene Observablen untersucht werden. Es müssen lediglich alle Operatoren konsistent transformiert werden [19]. Die Anwendung der Korrelatoren auf Observablen wie zum Beispiel quadratische Radien, Dichten, Impulsverteilungen oder Übergangsmatrixelemente verläuft analog zur Transformation der Wechselwirkung.

Eine wesentliche Eigenschaft der korrelierten Wechselwirkung V_{UCOM} liegt in der kurzen Reichweite der Korrelationsoperatoren begründet. Bei der unitären Transformation bleiben die asymptotischen Eigenschaften einer Zweiteilchenwellenfunktion unverändert. Das bedeutet, daß die Streuphasen der unkorrelierten Zweiteilchenwechselwirkung erhalten bleiben [17, 19]. Durch die Anwendung der unitären Transformation erhält man also wiederum ein realistisches Potential, das als Ausgangspunkt für Kernstrukturrechnungen verwendet werden kann. Dieses neue Potential hat den Vorteil, daß es die kurzreichweitigen Korrelationen bereits enthält.

2.6 Korrelierte Matrixelemente

Nachdem im letzten Abschnitt die Operatordarstellung der korrelierten Wechselwirkung abgeleitet wurde, sollen nun ihre Zweiteilchenmatrixelemente berechnet werden. Dazu werden allgemeine Relativzustände $|n(LS)JM TM_T\rangle$ mit der Radialquantenzahl n, dem Bahndrehimpuls L, Spin S, Gesamtdrehimpuls J, M und Isospin T, M_T verwendet. Die Matrixelemente haben daher die Gestalt [19]

$$\langle n(LS)JM TM_T | V_{\text{UCOM}} | n'(L'S)JM TM_T \rangle$$
 (2.42)

Die folgenden Berechnungen sind unabhängig von der gewählten Basis, es müssen lediglich die Drehimpulse wie in Gleichung (2.42) gekoppelt werden. Der Schwerpunktanteil der Zustände wird hier nicht behandelt, da er invariant unter Anwendung der unitären Korrelatoren ist. Darüber hinaus werden hier nur die ladungsunabhängigen Terme der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung betrachtet. Daher hängen die Matrixelemente nicht von den Projektionsquantenzahlen M und M_T ab, die im folgenden weggelassen werden.

Für die Berechnung der Matrixelemente kann die korrelierte Wechselwirkung in Operatordarstellung eingesetzt werden. Für diese Darstellung wurde allerdings die Baker-Campbell-Hausdorff-Entwicklung nach einem bestimmten Kriterium begrenzt (siehe Abschnitt 2.5). Diese Näherung kann bei der Berechnung von Matrixelementen umgangen werden. Im Gegensatz zur korrelierten Wechselwirkung können die Matrixelemente exakt angegeben werden. Dazu wird der Tensorkorrelator auf die Zweiteilchenzustände angewendet und der Zentralkorrelator weiterhin auf die Operatoren. Daraus folgt, daß

die Reihenfolge der Korrelatoren vertauscht werden muß [19]:

$$\mathbf{c}_{r}^{\dagger}\mathbf{c}_{\Omega}^{\dagger}\mathbf{O}\mathbf{c}_{\Omega}\mathbf{c}_{r} = (\mathbf{c}_{r}^{\dagger}\mathbf{c}_{\Omega}^{\dagger}\mathbf{c}_{r})\mathbf{c}_{r}^{\dagger}\mathbf{O}\mathbf{c}_{r}(\mathbf{c}_{r}^{\dagger}\mathbf{c}_{\Omega}\mathbf{c}_{r}) = \tilde{\mathbf{c}}_{\Omega}^{\dagger}\mathbf{c}_{r}^{\dagger}\mathbf{O}\mathbf{c}_{r}\tilde{\mathbf{c}}_{\Omega} .$$
(2.43)

Dabei ist der zentralkorrelierte Tensorkorrelator durch

$$\tilde{\mathbf{c}}_{\Omega} = \mathbf{c}_r^{\dagger} \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r = \exp\{-\mathrm{i}\vartheta(R_+(\mathbf{r}))\mathbf{s}_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_{\Omega})\}$$
(2.44)

gegeben.

Der Tensorkorrelator wirkt nur auf Zustände mit Spin S = 1. Der Bahndrehimpuls L kann daher die Werte J - 1, J oder J + 1 annehmen. Die Zustände mit L = J bleiben bei Anwendung des Tensorkorrelators \tilde{c}_{Ω} unverändert [19]:

$$\tilde{c}_{\Omega}|n(JS)JT\rangle = |n(JS)JT\rangle$$
 (2.45)

Für Zustände mit $L = J \mp 1$ generiert der Tensorkorrelator Beimischungen mit $\Delta L = \pm 2$:

$$\tilde{c}_{\Omega}|n(J\mp 1,1)JT\rangle = \cos\hat{\theta}_{J}(r)|n(J\mp 1,1)JT\rangle \pm \sin\tilde{\theta}_{J}(r)|n(J\pm 1,1)JT\rangle ,$$
(2.46)

wobei die Abkürzung

$$\tilde{\theta}_J(r) = 3\sqrt{J(J+1)}\vartheta(R_+(r))$$
(2.47)

verwendet wurde.

Der Hamiltonoperator ist durch

$$\mathbf{H} = \mathbf{t}_{\mathsf{cm}} + \mathbf{t}_r + \mathbf{t}_{\Omega} + \mathbf{V} \tag{2.48}$$

gegeben, wobei für die Zweiteilchenwechselwirkung V wiederum das Argonne v_{18} Potential eingesetzt wird. Daraus folgt, daß die Matrixelemente der Operatoren q_r^2 , l^2 , $(l \cdot s)$, s_{12} und $s_{12}(l, l)$ bestimmt werden müssen.

Zunächst werden alle Operatoren außer q_r^2 betrachtet. Sie treten jeweils in der Form v(r)O auf, wobei v(r) die Radialabhängigkeit des unkorrelierten Potentials beschreibt. Bei den diagonalen Matrixelementen mit L = L' = J wirkt nur der Zentralkorrelator. In Ortsdarstellung ergibt sich [19]:

$$\langle n(JS)JT | \tilde{c}_{\Omega}^{\dagger} c_{r}^{\dagger} v(\mathbf{r}) O c_{r} \tilde{c}_{\Omega} | n'(JS)JT \rangle$$

= $\int dr \ u_{nJ}^{*}(r) u_{n'J}(r) \ \tilde{v}(r) \ \langle (JS)JT | O | (JS)JT \rangle$. (2.49)

22

2.6 · Korrelierte Matrixelemente

Dabei beschreibt $\tilde{v}(r) = v(R_+(r))$ die korrelierte Radialabhängigkeit und $u_{nL}(r) = r\varphi_{nL}(r)$ den Radialteil der Relativwellenfunktion. Für die diagonalen Matrixelemente mit $L = L' = J \mp 1$ ergibt sich

$$\langle n(J \mp 1, 1)JT | \tilde{c}_{\Omega}^{\dagger} c_{r}^{\dagger} v(\mathbf{r}) \mathrm{Oc}_{r} \tilde{c}_{\Omega} | n'(J \mp 1, 1)JT \rangle$$

$$= \int dr \ u_{nJ\mp 1}^{*}(r) u_{n'J\mp 1}(r) \ \tilde{v}(r)$$

$$\times \{ \cos^{2} \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \mp 1, 1)JT | \mathrm{O} | (J \mp 1, 1)JT \rangle$$

$$+ \sin^{2} \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \pm 1, 1)JT | \mathrm{O} | (J \pm 1, 1)JT \rangle$$

$$\pm 2 \ \cos \tilde{\theta}_{J}(r) \ \sin \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \mp 1, 1)JT | \mathrm{O} | (J \pm 1, 1)JT \rangle$$

$$(2.50)$$

Analog lassen sich die außerdiagonalen Matrixelemente mit $L = J \mp 1$ und $L' = J \pm 1$ berechnen:

$$\langle n(J \mp 1, 1)JT | \tilde{c}_{\Omega}^{\dagger} c_{r}^{\dagger} v(\mathbf{r}) Oc_{r} \tilde{c}_{\Omega} | n'(J \pm 1, 1)JT \rangle$$

$$= \int dr \ u_{nJ\mp 1}^{*}(r) u_{n'J\pm 1}(r) \ \tilde{v}(r)$$

$$\times \{ \cos^{2} \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \mp 1, 1)JT | O | (J \pm 1, 1)JT \rangle$$

$$- \sin^{2} \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \pm 1, 1)JT | O | (J \mp 1, 1)JT \rangle$$

$$\mp \cos \tilde{\theta}_{J}(r) \ \sin \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \mp 1, 1)JT | O | (J \mp 1, 1)JT \rangle$$

$$\pm \sin \tilde{\theta}_{J}(r) \ \cos \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \pm 1, 1)JT | O | (J \pm 1, 1)JT \rangle$$

$$\pm \sin \tilde{\theta}_{J}(r) \ \cos \tilde{\theta}_{J}(r) \ \langle (J \pm 1, 1)JT | O | (J \pm 1, 1)JT \rangle$$

$$(2.51)$$

Das bedeutet, daß einerseits die Integrale über die Radialwellenfunktionen und andererseits die Matrixelemente der Operatoren O mit den Drehimpulszuständen berechnet werden müssen. Dabei stellt sich heraus, daß die außerdiagonalen Matrixelemente auf der rechten Seite der Gleichungen (2.50) und (2.51) nur für den Standardtensoroperator $O = s_{12}$ Beiträge liefern [19].

Für den Radialteil des Relativimpulses kann die gesamte unitäre Transformation auf den Operator angewendet und exakt ausgewertet werden. Als erstes wirkt der Tensorkorrelator auf den Operator [19]:

$$c_{\Omega}^{\dagger}v(\mathbf{r})q_{r}^{2}c_{\Omega} = v(\mathbf{r})q_{r}^{2} - v(\mathbf{r})[\vartheta'(\mathbf{r})q_{r} + q_{r}\vartheta'(\mathbf{r})]s_{12}(\mathbf{r},\mathbf{q}_{\Omega}) + v(\mathbf{r})[\vartheta'(\mathbf{r})s_{12}(\mathbf{r},\mathbf{q}_{\Omega})]^{2}.$$
(2.52)

Anschließend wird der Zentralkorrelator angewendet und führt auf folgende diagonale Matrixelemente mit L = L' = J:

$$\langle n(JS)JT | c_{r}^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} v(r) q_{r}^{2} c_{\Omega} c_{r} | n'(JS)JT \rangle$$

$$= \int dr \left\{ u_{nJ}^{*}(r) u_{n'J}(r) \left[\tilde{v}(r) w(r) - \tilde{v}'(r) \frac{R''_{+}(r)}{R'_{+}(r)^{2}} \right] - \frac{1}{2} [u_{nJ}^{*}(r) u''_{n'J}(r) + u''_{nJ}^{*}(r) u_{n'J}(r)] \frac{\tilde{v}(r)}{R'_{+}(r)^{2}} \right\},$$

$$(2.53)$$

wobei die Abkürzung

$$w(r) = \frac{7R''_{+}(r)^2}{4R'_{+}(r)^4} - \frac{R'''_{+}(r)}{2R'_{+}(r)^3}$$
(2.54)

eingeführt wurde [19]. Dieser Term tritt bei Anwendung des Zentralkorrelators auf q_r^2 auf (siehe Gleichung (2.40)). Wie zuvor haben die Tensorkorrelationen keinen Einfluß auf diese Matrixelemente. Für die diagonalen Matrixelemente mit $L = L' = J \mp 1$ ergibt sich

$$\langle n(J \mp 1, 1)JT | c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} v(r) q_r^2 c_{\Omega} c_r | n'(J \mp 1, 1)JT \rangle$$

$$= \int dr \left\{ u_{nJ\mp 1}^*(r) u_{n'J\mp 1}(r) \left[\tilde{v}(r) w(r) + \tilde{v}(r) \tilde{\theta}'_J(r)^2 - \tilde{v}'(r) \frac{R''_+(r)}{R'_+(r)^2} \right] - \frac{1}{2} [u_{nJ\mp 1}^*(r) u''_{n'J\mp 1}(r) + u''^*_{nJ\mp 1}(r) u_{n'J\mp 1}(r)] \frac{\tilde{v}(r)}{R'_+(r)^2} \right\}.$$

$$(2.55)$$

Und schließlich lauten die außerdiagonalen Matrixelemente mit $L=J\mp 1$ und $L'=J\pm 1$

$$\langle n(J \mp 1, 1)JT | c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} v(r) q_r^2 c_{\Omega} c_r | n'(J \pm 1, 1)JT \rangle = \pm \int dr \; [u_{nJ\mp 1}^*(r) u_{n'J\pm 1}'(r) - u_{nJ\mp 1}'^*(r) u_{n'J\pm 1}(r)] \frac{\tilde{v}(r)\tilde{\theta}'_J(r)}{R'_+(r)} \;.$$
(2.56)

Aus diesen Beziehungen können nun die Matrixelemente für alle Beiträge zur korrelierten Wechselwirkung (2.48) konstruiert werden.

2.7 Bestimmung der Korrelationsfunktionen

Bisher wurden die Korrelationsfunktionen $R_{\pm}(r)$ und $\vartheta(r)$ nur formal verwendet. Im folgenden geht es darum, wie die optimalen Korrelationsfunktionen – und damit die optimalen Korrelatoren – bestimmt werden können. Es gibt zwei Möglichkeiten, die Korrelationsfunktionen festzulegen. Die erste Möglichkeit besteht darin, einen Ver-

suchszustand durch Variation des Korrelators an einen exakten Zustand anzupassen [4]. Bei der anderen Möglichkeit, die hier verwendet wird, wird eine Energieminimierung im Zweiteilchensystem durchgeführt [19, 4]. Dazu wird der Zustand $c|\varphi\rangle$ als Variationsansatz für den Grundzustand betrachtet. Es wird gefordert, daß der Korrelator nur Einfluß auf den kurzreichweitigen Teil des Zustandes hat. Langreichweitige Korrelationen werden durch den Zustand selbst beschrieben. Beide Methoden liefern sehr ähnliche Ergebnisse.

Die Korrelationsfunktionen $R_+(r)$ und $\vartheta(r)$ werden für jeden Spin-Isospin-Kanal getrennt festgelegt. Die unkorrelierte Radialwellenfunktion sollte keine kurzreichweitigen Korrelationen enthalten, da diese durch die unitären Korrelatoren behandelt werden. Aus diesem Grund wird eine Streulösung $\varphi_L(r) \sim r^L$ mit der Energie 0 verwendet [19]. Dabei wird für jeden Kanal der Streuzustand mit dem niedrigsten Bahndrehimpuls Lausgewählt, der aus Symmetriegründen erlaubt ist. Die Korrelationsfunktionen, die die Stärke und Radialabhängigkeit der Korrelatoren festlegen, werden durch Parametrisierungen mit drei Variationsparametern α, β, γ beziehungsweise α, β, η dargestellt [19]. Sie werden durch einen doppelt exponentiellen Abfall in ihrer Reichweite beschränkt. Für die Zentralkorrelationsfunktion gibt es zwei Ansätze

$$R_{+}^{I}(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta}\right)^{\eta} \exp\left\{-\exp\left(\frac{r}{\beta}\right)\right\}, \qquad (2.57)$$

$$R_{+}^{\mathrm{II}}(r) = r + \alpha \left(1 - \exp\left\{\frac{r}{\gamma}\right\}\right) \exp\left\{-\exp\left(\frac{r}{\beta}\right)\right\}, \qquad (2.58)$$

bei denen für jeden Kanal die Funktion verwendet wird, die die niedrigere Energie liefert. Die Tensorkorrelationsfunktion wird durch folgende Parametrisierung beschrieben:

S	Т	Param.	$\alpha \; [{\rm fm}]$	$\beta \; [{\rm fm}]$	$\gamma \;[{ m fm}]$	η
0	0	II	0.7971	1.2638	0.4621	-
0	1	Ι	1.3793	0.8853	-	0.3724
1	0	Ι	1.3265	0.8342	-	0.4471
1	1	II	0.5665	1.3888	0.1786	-

$$\vartheta(r) = \alpha \left(1 - \exp\left\{\frac{r}{\gamma}\right\} \right) \exp\left\{-\exp\left(\frac{r}{\beta}\right) \right\}.$$
(2.59)

Tabelle 2.1: Parameter der Zentralkorrelationsfunktion $R_+(r)$ für die verschiedenen Spin-Isospin-Kanäle.

In Tabelle 2.1 sind die Parameter der Zentralkorrelationsfunktion für die einzelnen Kanäle aufgelistet. Der Reichweitenparameter wurde dabei auf $I_{R_+} = 0.1 \text{ fm}^4$ gesetzt. Tabelle 2.2 gibt die Parameter der Tensorkorrelationsfunktion wieder. Dabei werden die Werte für die Reichweiten angegeben, die für die folgenden Berechnungen verwendet werden.

Т	$I^{(1T)}_{artheta} \; [fm^3]$	α	$\beta~[{ m fm}]$	$\gamma \;[{\rm fm}]$
0	0.09	536.67	1.2608	1000.0
0	0.15	495.99	1.4610	1000.0
0	0.20	450.67	1.6081	1000.0
0	0.30	408.40	1.8240	1000.0
0	0.40	370.62	2.0083	1000.0
1	0.00	0.0	1.0	1.0
1	0.05	-0.0463	2.6004	0.9983
1	0.10	-0.0353	3.4349	0.4997

Tabelle 2.2: Parameter der Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$ für die im folgenden verwendeten Reichweiten.

In den beiden S = 0 Kanälen wirkt nur der Zentralkorrelator. Da der Zweiteilchenzustand antisymmetrisch sein muß, ist für S = 0, T = 0 der niedrigste Bahndrehimpuls L = 1 und für S = 0, T = 1 ist L = 0. Für den S = 0, T = 1 Kanal kann die Energieminimierung ohne Probleme durchgeführt werden. Für S = 0, T = 0 ist dagegen das Potential rein abstoßend (siehe Abbildung 1.1). Das hat zur Folge, daß die Korrelationsfunktion $R_+(r)$ sehr langreichweitig wird. Um dies zu verhindern, wird der Reichweitenparameter

$$I_{R_{+}} = \int dr \ r^{2}(R_{+}(r) - r)$$
(2.60)

eingeführt [19]. In Übereinstimmung mit den anderen Kanälen wird sein Wert auf $I_{R_+} = 0.1 \text{ fm}^4$ gesetzt.

In den S = 1 Kanälen werden die Korrelationsfunktionen $R_+(r)$ und $\vartheta(r)$ gleichzeitig bestimmt. Für S = 1 und T = 0 ist der niedrigste Bahndrehimpuls L = 0. Im S = 1, T = 1 Kanal ist L = 1, das bedeutet, daß der Gesamtdrehimpuls J zu den Werten 0, 1 und 2 gekoppelt werden kann. Daher wird zur Energieminimierung eine Überlagerung dieser drei Möglichkeiten verwendet [19].



Abbildung 2.5: Optimale Korrelationsfunktionen. Links: Zentralkorrelationsfunktionen für die Spin-Isospin-Kanäle (S,T) = (0,1)(---), (1,0)(---), (0,0)(----) und (1,1)(---) (aus [19]). Rechts: Tensorkorrelationsfunktionen für T = 0 (oben) mit den Reichweitenparametern $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \,\mathrm{fm}^3, 0.15 \,\mathrm{fm}^3, 0.20 \,\mathrm{fm}^3$ und für T = 1 (unten) mit den Reichweitenparametern $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.01 \,\mathrm{fm}^3, 0.05 \,\mathrm{fm}^3, 0.10 \,\mathrm{fm}^3$. Die Pfeile zeigen in die Richtung von zunehmender Reichweite.

Wie bereits erwähnt, haben die Tensorkorrelationen im Zweiteilchensystem einen langreichweitigen Charakter (siehe Abschnitt 2.4). Mit dem Tensorkorrelator sollen jedoch nur die kurzreichweitigen Korrelationen behandelt werden, da anderenfalls die Zweiteilchennäherung der Clusterentwicklung (2.23) nicht mehr gültig ist. Darüber hinaus hängen die langreichweitigen Korrelationen stark von dem betrachteten Kern ab. Die unitären Korrelatoren sollen aber zustandsunabhängig sein. Daher wird analog zur Zentralkorrelationsfunktion der Reichweitenparameter

$$I_{\vartheta} = \int dr \ r^2 \vartheta(r) \tag{2.61}$$

eingeführt, durch den das Korrelationsvolumen begrenzt werden kann [19].

In Abbildung 2.5 (links) sind die optimalen Zentralkorrelationsfunktionen für die

einzelnen Kanäle dargestellt. In den geraden Kanälen (S = 0, T = 1 und S = 1, T = 0) fallen die Korrelationsfunktionen schnell ab. Dagegen sind sie in den ungeraden Kanälen (S = 0, T = 0 und S = 1, T = 1) deutlich schwächer und etwas langreichweitiger, da hier die Zentrifugalbarriere bereits verhindert, daß der Abstand zwischen zwei Teilchen zu klein wird.

Die Tensorkorrelationsfunktionen sind in Abbildung 2.5 (rechts) für verschiedene Werte des Reichweitenparameters aufgetragen. Die Pfeile deuten in die Richtung von zunehmender Reichweite. Für T = 1 sind die Tensorkorrelationen deutlich schwächer als für T = 0, daher sind auch die Werte für das Korrelationsvolumen I_{ϑ} kleiner. Auf die Zentralkorrelationsfunktionen hat die Wahl der Tensorkorrelatorreichweite nur einen minimalen Einfluß. Die optimalen Reichweiten der Tensorkorrelatoren können im Zweiteilchensystem noch nicht bestimmt werden. Sie werden erst in Kapitel 4.2 diskutiert. In Abbildung 2.5 sind einige der Werte für die Reichweitenparameter $I_{\vartheta}^{(10)}$ und $I_{\vartheta}^{(11)}$ dargestellt, die in Kapitel 4.2 betrachtet werden.
Kapitel 3

Die Hartree-Fock-Methode

Die Hartree-Fock-Methode wurde ursprünglich für Berechnungen in der Atomhülle angewendet. Dort bewegen sich die Elektronen einerseits in einem mittleren Potential, das von dem Atomkern erzeugt wird. Andererseits muß die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt werden. Um dieses Verfahren auf den Atomkern übertragen zu können, muß aus der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung ein mittleres Einteilchenpotential abgeleitet werden [6]. Dazu wird zunächst in Abschnitt 3.1 das Ritzsche Variationsverfahren diskutiert. Auf dieser Grundlage werden in Abschnitt 3.2 die allgemeinen Hartree-Fock-Gleichungen hergeleitet. Anschließend wird gezeigt, wie die Hartree-Fock-Methode in Verbindung mit der Methode der unitären Korrelatoren angewendet werden kann (Abschnitt 3.3). In Abschnitt 3.4 werden dann einige Ergebnisse dargestellt, die sich aus Rechnungen mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung ergeben und die die Notwendigkeit einer Dreiteilchenwechselwirkung belegen.

3.1 Das Ritzsche Variationsverfahren

Variationsverfahren werden in zahlreichen Gebieten der Physik angewendet. So läßt sich zum Beispiel in der Quantenmechanik zeigen, daß die Schrödingergleichung

$$\mathbf{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{3.1}$$

äquivalent ist zu der Variationsgleichung

$$\delta E[|\Psi\rangle] = E[|\Psi\rangle + |\delta\Psi\rangle] - E[|\Psi\rangle] = 0 , \qquad (3.2)$$

29

Kapitel 3 · Die Hartree-Fock-Methode

wobei die Energie

$$E[|\Psi\rangle] = \frac{\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$
(3.3)

als Funktional des Zustandes $|\Psi\rangle$ betrachtet wird [6, 7, 8]. Der Zustand $|\delta\Psi\rangle$ ist eine beliebige infinitesimale Variation des Anfangszustandes $|\Psi\rangle$.

Wird der Zustand $|\Psi\rangle$ zum Beispiel in einer beliebigen Basis $\{|i\rangle\}$ entwickelt:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i} c_{i} |i\rangle ,$$
 (3.4)

so läßt sich die Variation durch

$$|\delta\Psi\rangle = \sum_{i} \delta c_{i} |i\rangle \tag{3.5}$$

ausdrücken, wobei $|\delta c_i| \ll 1$.

Die Variation des Energiefunktionals liefert

$$\delta E[|\Psi\rangle] = \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \left\{ \langle\delta\Psi|\mathbf{H}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\mathbf{H}|\delta\Psi\rangle - \frac{\langle\Psi|\mathbf{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} (\langle\delta\Psi|\Psi\rangle + \langle\Psi|\delta\Psi\rangle) \right\} \\ = \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \left\{ \langle\delta\Psi|\mathbf{H}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\mathbf{H}|\delta\Psi\rangle - E(\langle\delta\Psi|\Psi\rangle + \langle\Psi|\delta\Psi\rangle) \right\}.$$
 (3.6)

Dabei wurden Terme höherer Ordnung in $|\delta\Psi\rangle$ vernachlässigt, da es sich um eine infinitesimale Variation handelt ($\langle\delta\Psi|\delta\Psi\rangle \ll 1$). Die Variation des Energiefunktionals soll stationär sein (Gleichung (3.2)), daher folgt aus (3.6)

$$\langle \delta \Psi | \mathbf{H} - E | \Psi \rangle + \langle \Psi | \mathbf{H} - E | \delta \Psi \rangle = 0$$
. (3.7)

Der Zustand $|\Psi\rangle$ ist im allgemeinen komplex, daher kann die Variation unabhängig für den Realteil und für den Imaginärteil durchgeführt werden. Dies ist äquivalent dazu, über den Ket $|\delta\Psi\rangle$ beziehungsweise über den Bra $\langle\delta\Psi|$ zu variieren. Da $|\delta\Psi\rangle$ beliebig ist, kann ebensogut $i|\delta\Psi\rangle$ eingesetzt werden [6, 7, 8]. Die Variation liefert dann

$$-i\langle\delta\Psi|H - E|\Psi\rangle + i\langle\Psi|H - E|\delta\Psi\rangle = 0.$$
(3.8)

Zusammen mit (3.7) ergibt sich daraus

$$\langle \delta \Psi | \mathbf{H} - E | \Psi \rangle = 0 . \tag{3.9}$$

Diese Gleichung muß für beliebige Variationen $|\delta\Psi\rangle$ erfüllt sein, daher folgt hieraus die Schrödingergleichung $(H - E)|\Psi\rangle = 0$. Das bedeutet, daß für jeden Eigenwert E des

3.2 · Das Hartree-Fock-Verfahren

Hamiltonoperators die Variation des Energiefunktionals $\delta E[|\Psi\rangle]$ um den zugehörigen Eigenzustand $|\Psi\rangle$ stationär ist. Für den Grundzustand besitzt $E[|\Psi\rangle]$ ein absolutes Minimum, für die angeregten Zustände sind es im allgemeinen Sattelpunkte [7, 8].

Bis zu diesem Punkt sind alle Gleichungen exakt. In der Praxis wird allerdings nicht mit dem allgemeinsten Zustand $|\Psi\rangle$ variiert, sondern es werden mathematisch einfache Versuchszustände verwendet. Sobald die exakte Lösung nicht mehr in der Menge der Versuchszustände enthalten ist, liefert das Variationsverfahren eine genäherte Lösung.

Das Variationsverfahren ist insbesondere zur Approximation des Grundzustands geeignet. Der Energieerwartungswert $E[|\Psi\rangle]$ eines beliebigen Zustandes $|\Psi\rangle$ ist immer größer oder gleich der exakten Grundzustandsenergie [6, 7, 8]:

$$E[|\Psi\rangle] \ge E_0 . \tag{3.10}$$

Dies ist das Ritzsche Variationsverfahren. Es läßt sich leicht beweisen, wenn der Zustand $|\Psi\rangle$ in der Eigenbasis $\{|n\rangle\}$ des Hamiltonoperators entwickelt wird:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n} c_{n} |n\rangle$$
 mit $H|n\rangle = E_{n} |n\rangle$. (3.11)

Damit lautet der Energieerwartungswert

$$E[|\Psi\rangle] = \frac{\sum\limits_{n,m} c_n^* c_m \langle n|\mathbf{H}|m\rangle}{\sum\limits_n |c_n|^2} = \frac{\sum\limits_n |c_n|^2 E_n}{\sum\limits_n |c_n|^2} \ge \frac{\sum\limits_n |c_n|^2 E_0}{\sum\limits_n |c_n|^2} = E_0 .$$
(3.12)

Dabei wird vorausgesetzt, daß die Energie
eigenwerte aufsteigend sortiert sind: $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \ldots$

Das bedeutet, daß zur Näherung des Grundzustands lediglich eine Minimierung des Energieerwartungswertes unter Variation des Versuchszustandes durchgeführt werden muß. Zusätzlich liefert der Satz von Ritz ein Kriterium dafür, welcher von zwei Versuchszuständen den Grundzustand besser approximiert. Je niedriger der Energieerwartungswert $E[|\Psi\rangle]$ eines Zustandes ist, umso größer ist sein Überlapp mit dem exakten Grundzustand.

3.2 Das Hartree-Fock-Verfahren

Bei der Hartree-Fock-Methode wird das Variationsverfahren auf ein System aus A Fermionen angewendet [6, 7, 8]. Dabei wird der Versuchszustand durch eine einzelne Slaterdeterminante

$$|\Phi\rangle = \mathbf{a}_1^{\dagger} \mathbf{a}_2^{\dagger} \dots \mathbf{a}_A^{\dagger} |0\rangle \tag{3.13}$$

31

Kapitel 3 · Die Hartree-Fock-Methode

beschrieben. Zur Minimierung des Energieerwartungswertes $E[|\Phi\rangle]$ werden die A besetzten Einteilchenzustände $|\varphi_k\rangle = a_k^{\dagger}|0\rangle$ variiert. Diese Einteilchenzustände werden in einer vollständigen, orthogonalen Rechenbasis $\{|\chi_l\rangle\}$ mit $|\chi_l\rangle = c_l^{\dagger}|0\rangle$ entwickelt:

$$|\varphi_k\rangle = \sum_{l=1}^{\infty} D_{lk} |\chi_l\rangle$$
 bzw. $\mathbf{a}_k^{\dagger} = \sum_{l=1}^{\infty} D_{lk} \mathbf{c}_l^{\dagger}$. (3.14)

Dabei beschreibt D eine unitäre Transformation, da beide Basen vollständig und orthogonal sind [6]. Für die Rechenbasis { $|\chi_l\rangle$ } können beispielsweise die Eigenzustände des harmonischen Oszillators oder ebene Wellen verwendet werden.

Eine besondere Eigenschaft von Slaterdeterminanten ist, daß sie bis auf eine Phase invariant sind unter unitären Transformationen, die innerhalb der besetzten Zustände stattfinden [6, 7, 8]. Das heißt, daß keine eindeutige Beziehung zwischen der Slaterdeterminante $|\Phi\rangle$ und den Einteilchenzuständen $|\varphi_k\rangle$ existiert. Die Slaterdeterminante wird lediglich durch einen Einteilchenunterraum beziehungsweise durch den Projektionsoperator $\varrho^{(1)}$ auf diesen Unterraum festgelegt. Es liegt daher nahe, anstelle der Rechenbasis $\{|\chi_l\rangle\}$ die Einteilchendichtematrix, die durch die Matrixelemente $\langle\chi_l|\varrho^{(1)}|\chi_{l'}\rangle$ definiert ist, für die Variationsrechnung zu verwenden. Diese Matrixelemente lassen sich durch die Entwicklungskoeffizienten ausdrücken:

$$\varrho_{ll'}^{(1)} = \langle \chi_l | \varrho^{(1)} | \chi_{l'} \rangle = \langle \Phi | \mathbf{c}_{l'}^{\dagger} \mathbf{c}_l | \Phi \rangle
= \sum_{k,k'}^{\infty} D_{lk} D_{l'k'}^{*} \langle \Phi | \mathbf{a}_{k'}^{\dagger} \mathbf{a}_k | \Phi \rangle = \sum_{k=1}^{A} D_{lk} D_{l'k}^{*} .$$
(3.15)

Dabei gilt das letzte Gleichheitszeichen, weil $\varrho^{(1)}$ in der Basis der a_k^{\dagger} diagonal ist und die Eigenwerte 1 für besetzte und 0 für unbesetzte Zustände hat [6]. Die Einteilchendichtematrix einer Slaterdeterminante ist hermitesch und idempotent:

$$(\varrho^{(1)})^{\dagger} = \varrho^{(1)}$$
 und $(\varrho^{(1)})^2 = \varrho^{(1)}$ (3.16)

Aus (3.15) folgt, daß die Entwicklungskoeffizienten D_{lk} die Variationsparameter darstellen.

Um zu der Aufgabe der Energieminimierung zurückzukehren, wird zunächst der Hamiltonoperator in der Rechenbasis dargestellt:

3.2 · Das Hartree-Fock-Verfahren

$$H = \sum_{a\bar{a}}^{\infty} t_{a\bar{a}} c_{a}^{\dagger} c_{\bar{a}}$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{a\bar{b}}^{\infty} V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} c_{a}^{\dagger} c_{b}^{\dagger} c_{\bar{b}} c_{\bar{a}}$$

$$+ \frac{1}{36} \sum_{a\bar{b}c}^{\infty} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} c_{a}^{\dagger} c_{b}^{\dagger} c_{c}^{\dagger} c_{\bar{c}} c_{\bar{b}} c_{\bar{a}}$$

$$(3.17)$$

Dabei sind

$$t_{a\bar{a}} = \langle \chi_a | \mathbf{T} | \chi_{\bar{a}} \rangle \tag{3.18}$$

die Einteilchenmatrixelemente der kinetischen Energie,

$$V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} = {}_a \langle \chi_a \chi_b | \mathcal{V}^{(2)} | \chi_{\bar{a}} \chi_{\bar{b}} \rangle_a$$
(3.19)

die antisymmetrisierten Zweiteilchenmatrixelemente der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung und

$$V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} = {}_a \langle \chi_a \chi_b \chi_c | \mathbf{V}^{(3)} | \chi_{\bar{a}} \chi_{\bar{b}} \chi_{\bar{c}} \rangle_a$$
(3.20)

die antisymmetrisierten Dreiteilchenmatrixelemente einer Dreiteilchenwechselwirkung. Damit ergibt sich der Energieerwartungswert zu [6, 7, 8]

$$E[|\Phi\rangle] = \sum_{a\bar{a}}^{\infty} t_{a\bar{a}} \langle \Phi | c_{a}^{\dagger} c_{\bar{a}} | \Phi \rangle$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{a\bar{b}}^{\infty} V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} \langle \Phi | c_{a}^{\dagger} c_{b}^{\dagger} c_{\bar{b}} c_{\bar{a}} | \Phi \rangle$$

$$+ \frac{1}{36} \sum_{a\bar{b}c}^{\infty} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} \langle \Phi | c_{a}^{\dagger} c_{b}^{\dagger} c_{c}^{\dagger} c_{\bar{c}} c_{\bar{b}} c_{\bar{a}} | \Phi \rangle$$

$$= \sum_{a\bar{a}}^{\infty} t_{a\bar{a}} \ \varrho_{\bar{a}a}^{(1)} + \frac{1}{4} \sum_{a\bar{b}}^{\infty} V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} \ \varrho_{\bar{a}\bar{b},ab}^{(2)} + \frac{1}{36} \sum_{a\bar{b}c}^{\infty} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} \ \varrho_{\bar{a}\bar{b}\bar{c},abc}^{(3)} \ , \ (3.21)$$

wobei $\varrho^{(2)}$ und $\varrho^{(3)}$ die Zwei- beziehungsweise Dreiteilchendichtematrix bezeichnen. Da es sich bei dem Zustand $|\Phi\rangle$ um eine Slaterdeterminante handelt, können die Zwei- und

Kapitel 3 · Die Hartree-Fock-Methode

die Dreiteilchendichtematrix durch die Einteilchendichtematrix ausgedrückt werden:

$$\varrho_{\bar{a}\bar{b},ab}^{(2)} = \varrho_{\bar{a}a}^{(1)} \varrho_{\bar{b}b}^{(1)} - \varrho_{\bar{a}b}^{(1)} \varrho_{\bar{b}a}^{(1)}$$

$$\varrho_{\bar{a}\bar{b}\bar{c},abc}^{(3)} = \varrho_{\bar{a}a}^{(1)} \varrho_{\bar{b}b}^{(1)} \varrho_{\bar{c}c}^{(1)} + \varrho_{\bar{a}c}^{(1)} \varrho_{\bar{b}a}^{(1)} \varrho_{\bar{c}b}^{(1)} + \varrho_{\bar{a}b}^{(1)} \varrho_{\bar{b}c}^{(1)} \varrho_{\bar{c}a}^{(1)}$$

$$- \varrho_{\bar{a}a}^{(1)} \varrho_{\bar{b}c}^{(1)} \varrho_{\bar{c}b}^{(1)} - \varrho_{\bar{a}b}^{(1)} \varrho_{\bar{b}a}^{(1)} \varrho_{\bar{c}c}^{(1)} - \varrho_{\bar{a}c}^{(1)} \varrho_{\bar{b}b}^{(1)} \varrho_{\bar{c}a}^{(1)} .$$
(3.22)
$$(3.23)$$

Damit läßt sich die Energie als Funktional der Einteilchendichtematrix schreiben:

$$E[\varrho^{(1)}] = \sum_{a\bar{a}}^{\infty} t_{a\bar{a}} \ \varrho^{(1)}_{\bar{a}a} + \frac{1}{2} \sum_{a\bar{b}\atop\bar{a}\bar{b}}^{\infty} V^{(2)}_{ab,\bar{a}\bar{b}} \ \varrho^{(1)}_{\bar{a}a} \varrho^{(1)}_{\bar{b}b} + \frac{1}{6} \sum_{a\bar{b}c\atop\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{\infty} V^{(3)}_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}} \ \varrho^{(1)}_{\bar{a}a} \varrho^{(1)}_{\bar{b}b} \varrho^{(1)}_{\bar{c}c} \ .$$
(3.24)

Die Variation des Energiefunktionals lautet unter Vernachlässigung der Terme, die quadratisch in $\delta \varrho^{(1)}$ sind [7, 8]

$$\delta E[\varrho^{(1)}] = \sum_{a\bar{a}}^{\infty} t_{a\bar{a}} \,\delta\varrho_{\bar{a}a}^{(1)} \\ + \frac{1}{2} \sum_{a\bar{b}}^{\infty} V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} \left(\delta\varrho_{\bar{a}a}^{(1)}\varrho_{\bar{b}b}^{(1)} + \varrho_{\bar{a}a}^{(1)}\delta\varrho_{\bar{b}b}^{(1)}\right) \\ + \frac{1}{6} \sum_{a\bar{b}c}^{\infty} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} \left(\delta\varrho_{\bar{a}a}^{(1)}\varrho_{\bar{b}b}^{(1)}\varrho_{\bar{c}c}^{(1)} + \varrho_{\bar{a}a}^{(1)}\delta\varrho_{\bar{b}b}^{(1)}\varrho_{\bar{c}c}^{(1)} + \varrho_{\bar{a}a}^{(1)}\partial_{\bar{b}b}^{(1)}\delta\varrho_{\bar{c}c}^{(1)}\right) \\ = \sum_{a\bar{a}}^{\infty} \left\{ t_{a\bar{a}} + \sum_{b\bar{b}}^{\infty} V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} \varrho_{\bar{b}b}^{(1)} + \frac{1}{2} \sum_{b\bar{c}}^{\infty} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} \varrho_{\bar{b}b}^{(1)} \varrho_{\bar{c}c}^{(1)} \right\} \delta\varrho_{\bar{a}a}^{(1)} . \quad (3.25)$$

Die Wechselwirkungsterme in diesem Ausdruck lassen sich formal mit dem eingangs geforderten Einteilchenpotential, das von der Einteilchendichtematrix abhängt, identifizieren:

$$U_{a\bar{a}}[\varrho^{(1)}] = \sum_{b\bar{b}}^{\infty} V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} \ \varrho_{\bar{b}b}^{(1)} + \frac{1}{2} \sum_{b\bar{c}\atop b\bar{c}}^{\infty} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} \ \varrho_{\bar{b}b}^{(1)} \ \varrho_{\bar{c}c}^{(1)} \ . \tag{3.26}$$

Zusammen mit diesem Potential ergeben sich die Matrixelemente des Einteilchenhamiltonoperators

$$h_{a\bar{a}}[\varrho^{(1)}] = t_{a\bar{a}} + U_{a\bar{a}}[\varrho^{(1)}] .$$
(3.27)

Die Variationsgleichung lautet dann

$$\delta E[\varrho^{(1)}] = \sum_{a\bar{a}}^{\infty} h_{a\bar{a}}[\varrho^{(1)}] \delta \varrho^{(1)}_{\bar{a}a} = 0 .$$
(3.28)

34

3.2 · Das Hartree-Fock-Verfahren

Dabei muß berücksichtigt werden, daß die variierte Einteilchendichtematrix $\varrho^{(1)} + \delta \varrho^{(1)}$ immernoch eine Slaterdeterminante beschreibt. Daher muß sie idempotent sein: $(\varrho^{(1)} + \delta \varrho^{(1)})^2 = \varrho^{(1)} + \delta \varrho^{(1)}$. Daraus ergeben sich die Bedingungen [6, 7, 8]

$$\varrho^{(1)}\delta\varrho^{(1)}\varrho^{(1)} = 0 \quad \text{und} \quad (1-\varrho^{(1)})\delta\varrho^{(1)}(1-\varrho^{(1)}) = 0.$$
(3.29)

In der Hartree-Fock-Basis ist die Einteilchendichtematrix diagonal, das heißt, sie verbindet nur besetzte Zustände miteinander. Damit die Bedingungen (3.29) erfüllt sind, darf die Variation $\delta \varrho^{(1)}$ daher nur zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen erfolgen.

Als Ergebnis der Variationsrechnung erhält man schließlich die allgemeinste, basisunabhängige Form der Hartree-Fock-Gleichungen [6, 7, 8]:

$$[h[\varrho^{(1)}], \varrho^{(1)}] = 0 .$$
(3.30)

Das bedeutet, daß der Einteilchenhamiltonoperator

$$h[\varrho^{(1)}] = \sum_{ll'} |\chi_l\rangle h_{ll'}[\varrho^{(1)}]\langle \chi_l'|$$
(3.31)

und der Einteilchendichteoperator

$$\varrho^{(1)} = \sum_{ll'} |\chi_l\rangle \varrho^{(1)}_{ll'} \langle \chi'_l|$$
(3.32)

eine simultane Eigenbasis besitzen.

Anstelle dieser allgemeinen Kommutatorgleichung kann auch das Eigenwertproblem des Einteilchenhamiltonoperators

$$h[\varrho^{(1)}]|\varphi_k\rangle = \varepsilon_k |\varphi_k\rangle \tag{3.33}$$

gelöst werden [6, 7, 8]. Dabei bezeichnet $\{|\varphi_k\rangle\}$ die Hartree-Fock-Basis, die bereits zu Beginn dieses Abschnitts eingeführt wurde. Nach der Transformation in die Rechenbasis $\{|\chi_l\rangle\}$ (siehe Gleichung (3.14)) ergibt sich

$$\sum_{\bar{a}}^{\infty} h_{a\bar{a}}[\varrho^{(1)}] D_{\bar{a}k} = \varepsilon_k D_{ak} .$$
(3.34)

Einsetzen des Einteilchenhamiltonoperators (3.31) und der Einteilchendichtematrix (3.15) liefert schließlich die Hartree-Fock-Gleichungen in Basisdarstellung:

$$\sum_{\bar{a}}^{\infty} \left\{ t_{a\bar{a}} + \sum_{i=1}^{A} \sum_{b\bar{b}}^{\infty} V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{(2)} D_{\bar{b}i} D_{bi}^{*} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{A} \sum_{\bar{b}\bar{c}}^{\infty} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} D_{\bar{b}i} D_{\bar{b}i}^{*} D_{\bar{c}j} D_{cj}^{*} \right\} D_{\bar{a}k} = \varepsilon_k D_{ak}$$

für $k = 1, 2, \dots, A$. (3.35)

Kapitel 3 · Die Hartree-Fock-Methode

Da der Einteilchenhamiltonoperator selbst von der Einteilchendichtematrix abhängt, ist dies ein nichtlineares Eigenwertproblem für die Einteilchenenergien ε_k und die Entwicklungskoeffizienten D_{lk} . In der Praxis werden die Hartree-Fock-Gleichungen durch ein iteratives Verfahren gelöst. Das heißt, es werden die D_{lk} geraten, daraus wird $h[\varrho^{(1)}]$ berechnet und anschließend Gleichung (3.35) gelöst. Das liefert neue D_{lk} und so weiter. Diese Schritte werden wiederholt, bis die Lösung konvergiert ist.

Die Näherung für den Grundzustand wird aus der Slaterdeterminante der niedrigsten A Einteilchenzustände des Einteilchenhamiltonoperators gebildet:

$$|\mathsf{HF}\rangle = |\Phi\rangle = \mathbf{a}_1^{\dagger} \mathbf{a}_2^{\dagger} \dots \mathbf{a}_A^{\dagger} |0\rangle \;.$$
 (3.36)

Die Energie des Grundzustands beträgt [6, 7, 8]

$$E[|\mathsf{HF}\rangle] = \langle \mathsf{HF}|\mathsf{H}|\mathsf{HF}\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{A} \langle \varphi_{i}|\mathsf{T}|\varphi_{i}\rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{A} {}_{a} \langle \varphi_{i}\varphi_{j}|\mathsf{V}^{(2)}|\varphi_{i}\varphi_{j}\rangle_{a}$$

$$+ \frac{1}{6} \sum_{i,j,k=1}^{A} {}_{a} \langle \varphi_{i}\varphi_{j}\varphi_{k}|\mathsf{V}^{(3)}|\varphi_{i}\varphi_{j}\varphi_{k}\rangle_{a}$$

$$= \sum_{i=1}^{A} \epsilon_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{A} {}_{a} \langle \varphi_{i}\varphi_{j}|\mathsf{V}^{(2)}|\varphi_{i}\varphi_{j}\rangle_{a}$$

$$- \frac{1}{3} \sum_{i,j,k=1}^{A} {}_{a} \langle \varphi_{i}\varphi_{j}\varphi_{k}|\mathsf{V}^{(3)}|\varphi_{i}\varphi_{j}\varphi_{k}\rangle_{a} . \qquad (3.37)$$

Die Grundzustandsenergie ist damit nicht gleich der Summe über die Einteilchenenergien.

3.3 Hartree-Fock mit der korrelierten Wechselwirkung

Nachdem die Hartree-Fock-Gleichungen im letzten Abschnitt allgemein hergeleitet wurden, wird nun ihre Anwendung auf die korrelierte Wechselwirkung diskutiert. Der korrelierte Hamiltonoperator besteht aus der kinetischen Energie T, der korrelierten Wechselwirkung V_{UCOM} und der Dreiteilchenwechselwirkung $V^{(3)}$. Von der kinetischen Energie wird der Schwerpunktanteil T_{cm} abgezogen. Dies führt zu dem intrinsischen

Hamiltonoperator [20]

$$H_{int} = T - T_{cm} + V_{UCOM} + V^{(3)} = T_{int} + V_{UCOM} + V^{(3)} .$$
 (3.38)

Die intrinsische kinetische Energie ${\rm T}_{\sf int}$ läßt sich durch den Zweiteilchenrelativimpuls ${\bf q}$ ausdrücken:

$$T_{\text{int}} = \frac{2}{Am} \sum_{i < j}^{A} \mathbf{q}_{ij}^2 , \qquad (3.39)$$

wobei m die mittlere Nukleonenmasse bezeichnet. Der intrinsische Hamiltonoperator ist folglich zusammengesetzt aus einem Zweiteilchenoperator $H_{int}^{(2)} = T_{int} + V_{UCOM}$ und dem Dreiteilchenoperator $V^{(3)}$.

Als Rechenbasis für das Hartree-Fock-Verfahren werden die Eigenzustände des harmonischen Oszillators $|nljmm_t\rangle$ mit der Radialquantenzahl n, dem Bahndrehimpuls l, dem Gesamtdrehimpuls j, m und der Projektionsquantenzahl des Isospins m_t verwendet. Im folgenden wird angenommen, daß die betrachteten Kerne sphärisch symmetrisch sind. Dann lassen sich die Einteilchenzustände der Hartree-Fock-Basis folgendermaßen darstellen [20]:

$$|\nu ljmm_t\rangle = \sum_n C_n^{(\nu ljmm_t)} |n ljmm_t\rangle$$
 (3.40)

Bei sphärischer Symmetrie tragen zu der Entwicklung der Hartree-Fock-Zustände nur Oszillatorzustände mit gleichem l, j und m bei. Des weiteren werden nur Kerne mit abgeschlossenen Schalen betrachtet. Das bedeutet, daß die Entwicklungskoeffizienten $C_n^{(\nu l j m m_t)} = C_n^{(\nu l j m_t)}$ so gewählt werden können, daß sie nicht von der Projektionsquantenzahl m abhängen. Diese Entwicklungskoeffizienten sind die Variationsparameter für die Minimierung des Energieerwartungswertes.

In dieser Darstellung lauten die Hartree-Fock-Gleichungen (3.34):

$$\sum_{\bar{n}} h_{n\bar{n}}^{(ljm_t)} C_{\bar{n}}^{(\nu ljm_t)} = \varepsilon^{(\nu ljm_t)} C_n^{(\nu ljm_t)} .$$
(3.41)

Dabei sind die $\varepsilon^{(\nu l j m_t)}$ die Einteilchenenergien der Hartree-Fock-Zustände. Die Matrixelemente des Einteilchenhamiltonoperators

$$h_{n\bar{n}}^{(ljm_t)} = \sum_{l'j'm'_t} \sum_{n'\bar{n}'} H_{nn',\bar{n}\bar{n}'}^{(ljm_t,l'j'm'_t)} \varrho_{\bar{n}'n'}^{(l'j'm'_t)} \\ + \frac{1}{2} \sum_{l'j'm'_t} \sum_{l''j''m''_t} \sum_{n'n''\bar{n}'\bar{n}''} V_{nn'n'',\bar{n}\bar{n}'\bar{n}''}^{(3)(ljm_t,l'j'm'_t,l''j''m''_t)} \varrho_{\bar{n}'n'}^{(l'j'm'_t)} \varrho_{\bar{n}'n''}^{(l''j'm''_t)} (3.42)$$

37

Kapitel 3 · Die Hartree-Fock-Methode

setzen sich zusammen aus den Matrixelementen $H^{(ljm_t,l'j'm'_t)}_{nn',\bar{n}\bar{n}'}$ des Zweiteilchenanteils des Hamiltonoperators und den Matrixelementen $V^{(3)(ljm_t,l'j'm'_t,l''j''m''_t)}_{nn'n'',\bar{n}\bar{n}\bar{n}'}$ der Dreiteilchenwechselwirkung. Die Einteilchendichtematrix ist durch

$$\varrho_{\bar{n}n}^{(ljm_t)} = \sum_{\nu} O^{(\nu ljm_t)} C_{\bar{n}}^{(\nu ljm_t)^*} C_n^{(\nu ljm_t)^*}$$
(3.43)

gegeben, wobei $O^{(\nu l j m_t)}$ die Anzahl der besetzten magnetischen Unterzustände in der jeweiligen Schale angibt [20]. Für abgeschlossene Schalen gilt $O^{(\nu l j m_t)} = 2j + 1$.

Die *m*-gemittelten, antisymmetrisierten Matrixelemente des Zweiteilchenanteils $H_{int}^{(2)} = T_{int} + V_{UCOM}$ des Hamiltonoperators lassen sich folgendermaßen schreiben [20]:

$$H_{nn',\bar{n}\bar{n}'}^{(ljm_t,l'j'm'_t)} = \frac{1}{(2j+1)(2j'+1)} \sum_{mm'} \langle nljmm_t, n'l'j'm'm'_t | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \bar{n}ljmm_t, \bar{n}'l'j'm'm'_t \rangle .$$
(3.44)

Alternativ können die Einteilchendrehimpulse zu einem Gesamtdrehimpuls gekoppelt werden:

$$H_{nn',\bar{n}\bar{n}'}^{(ljm_t,l'j'm'_t)} = \sum_{JTM_T} \frac{(2J+1)}{(2j+1)(2j'+1)} c \left(\begin{array}{c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_t & m'_t \end{array} \right)^2 \\ \times \langle nlj, n'l'j'; JTM_T | \mathcal{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \bar{n}lj, \bar{n}'l'j'; JTM_T \rangle .$$
(3.45)

Dabei ist $c\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T\\ m_t & m'_t & M_T \end{pmatrix}$ ein Clebsch-Gordan-Koeffizient, der zur Kopplung beziehungsweise Entkopplung von Drehimpulsen dient (siehe Gleichung (4.9)).

Die Berechnung der Matrixelemente wurde in Abschnitt 2.6 behandelt. Allerdings wurden dort LS-gekoppelte Matrixelemente betrachtet und hier werden jj-gekoppelte benötigt. In der Basis des harmonischen Oszillators kann die Transformation zwischen den beiden Kopplungsarten mit Hilfe der sogenannten Talmi-Moshinsky-Transformation [21, 22] und einigen Drehimpulsumkopplungen durchgeführt werden [20]:

$$\langle n_{1}l_{1}j_{1}, n_{2}l_{2}j_{2}, JT | \mathcal{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | n_{1}'l_{1}'j_{1}', n_{2}'l_{2}'j_{2}', JT \rangle = \sqrt{(2j_{1}+1)(2j_{2}+1)(2j_{1}'+1)(2j_{2}'+1)} \\ \times \sum_{LL'S} \sum_{N\Lambda} \sum_{\nu\lambda} \sum_{\nu'\lambda'} \sum_{j} \begin{cases} l_{1} \quad l_{2} \quad L \\ \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad S \\ j_{1} \quad j_{2} \quad J \end{cases} \begin{cases} l_{1}' \quad l_{2}' \quad L' \\ \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad S \\ j_{1}' \quad j_{2}' \quad J \end{cases} \begin{cases} \Lambda \quad \lambda \quad L \\ S \quad J \quad j \end{cases} \begin{cases} \Lambda \quad \lambda' \quad L' \\ S \quad J \quad j \end{cases} \\ \times \langle \langle N\Lambda, \nu\lambda | n_{1}l_{1}, n_{2}l_{2}, L \rangle \rangle \langle \langle N\Lambda, \nu'\lambda' | n_{1}'l_{1}', n_{2}'l_{2}', L' \rangle \langle (-1)^{L+L'} \{1 - (-1)^{\lambda+S+T}\} \\ \times (2j+1)(2S+1)(2L+1)(2L'+1) \langle \nu(\lambda S)jT | \mathcal{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \nu'(\lambda'S)jT \rangle . \end{cases}$$
(3.46)

Dabei treten 6j und 9j Symbole [23] sowie die Oszillatorklammern $\langle \langle \dots | \dots \rangle \rangle$ auf, auf die hier nicht näher eingegangen wird [24, 25].

Die Berechnung der Matrixelemente der Dreiteilchenwechselwirkung wird in Kapitel 4 diskutiert.

3.4 Ergebnisse der Hartree-Fock-Rechnungen

In diesem Abschnitt werden einige Resultate aus den Hartree-Fock-Rechnungen mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung diskutiert. Als erstes Beispiel sind in Abbildung 3.1 die Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne dargestellt. Die ausgewählten Kerne reichen von ⁴He bis ²⁰⁸Pb und besitzen abgeschlossene Protonen- und Neutronenschalen. Die schwarzen Balken zeigen die experimentellen Werte und die drei anderen Kurven geben die Resultate für verschiedene Werte des Tensorkorrelationsvolumens wieder: $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.08 \text{ fm}^3, 0.09 \text{ fm}^3$ und 0.10 fm^3 . Die Bindungsenergien sind über den ganzen Bereich hinweg zu klein, das heißt, die Kerne sind zu schwach gebunden. Ebenso sind die Ladungsradien systematisch kleiner als die experimentellen Werte.

Die Abweichungen der Bindungsenergien von den experimentellen Werten lassen sich dadurch erklären, daß mit Hilfe der unitären Korrelatoren nur die kurzreichweitigen Korrelationen beschrieben werden. Die Tensorkorrelationen haben allerdings auch langreichweitige Anteile, die einen Einfluß auf die Bindungsenergien haben [20]. Darüber hinaus wurden sowohl die Dreiteilchenbeiträge der Clusterentwicklung als auch die genuine Dreiteilchenwechselwirkung vernachlässigt. Die Reichweite des Tensorkorrelators wird so gewählt, daß sich diese beiden Dreiteilchenbeiträge zu möglichst großen Anteilen gegeneinander aufheben. Allerdings wird der Wert für den Reichweitenparameter in Systemen mit Massenzahlen $A \leq 4$ bestimmt und beträgt $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \,\mathrm{fm}^3$ [20]. Es ist keineswegs selbstverständlich, daß der gleiche Wert auch für größere Systeme optimal ist. Es ist wichtig, die Auswirkungen der langreichweitigen Korrelationen von denen der Dreiteilchenbeiträge zu unterscheiden.

Die langreichweitigen Tensorkorrelationen können im Rahmen der Vielteilchenstörungstheorie behandelt werden. Die Lösung der Hartree-Fock-Rechnung wird dabei als Ausgangspunkt für die Störungstheorie verwendet. Es zeigt sich, daß die zweite Ordnung der Störungstheorie die fehlenden Beiträge zu den Bindungsenergien liefert [20] (siehe Kapitel 6.3).

Auf die Ladungsradien hat die Korrelatorreichweite kaum Einfluß (Abbildung 3.1, unten). Das deutet daraufhin, daß hier die fehlenden Beiträge nicht aus langreichweiti-

Kapitel 3 · Die Hartree-Fock-Methode



Abbildung 3.1: Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Die Hartree-Fock-Rechnungen wurden für drei Werte des Tensorkorrelationsvolumens durchgeführt: (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.08 \text{ fm}^3$, (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$ und (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.10 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder (aus [20]).

gen Korrelationen resultieren, sondern aus den vernachlässigten Dreiteilchenbeiträgen. Dies wird durch die Ergebnisse der Vielteilchenstörungstheorie bestätigt [20] (Kapitel 6.3). Um die Ladungsradien besser beschreiben zu können, muß daher eine abstoßende Dreiteilchenwechselwirkung eingeführt werden.

In einem zweiten Beispiel werden einige Einteilchenspektren betrachtet, die sich aus den Hartree-Fock-Rechnungen ergeben. Bei der Untersuchung der Einteilchenenergien ist jedoch Vorsicht geboten, da sie keine direkten experimentellen Observablen sind. Bei einem konventionellen Hartree-Fock-Verfahren, bei dem auch der Schwerpunktanteil der kinetischen Energie berücksichtigt wird, ist die Einteilchenenergie eines besetzten Zustandes $|\beta\rangle$ über die Energiedifferenz $E_A - E_{A-1}(\beta$ entfernt) definiert [6, 20]. Das bedeutet, daß von dem Energieerwartungswert der A-Teilchen-Slaterdeterminante der Erwartungswert der Slaterdeterminante, bei der der Zustand $|\beta\rangle$ entfernt wurde, abgezogen wird. Diese direkte Beziehung gilt allerdings nicht mehr, wenn die Hartree-Fock-Rechnung mit dem intrinsischen Hamiltonoperator H_{int} (3.38) durchgeführt wurde. In diesem Fall ergeben sich für die Änderung des Energieerwartungswertes zusätzlich zwei



Abbildung 3.2: Einteilchenspektren von ⁴⁰Ca für Protonen (links) und Neutronen (rechts). Die berechneten Spektren mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.08 \text{ fm}^3, 0.09 \text{ fm}^3$ und 0.10 fm^3 werden mit den experimentellen Spektren verglichen (aus [20]).

Korrekturterme [20]:

$$\varepsilon_{\beta}^{\text{corr}} = E_A - E_{A-1}(\beta \text{ entfernt})$$

= $\varepsilon_{\beta} - \frac{\langle T_{\text{int}} \rangle}{A-1} + \frac{2}{mA(A-1)} \sum_{\alpha}^{<\varepsilon_F} \langle \alpha \beta | \mathbf{q}^2 | \alpha \beta \rangle ,$ (3.47)

wobei $\langle T_{int} \rangle$ den Erwartungswert der intrinsischen kinetischen Energie (3.39) bezeichnet. Dies gilt für den Fall, daß ein Teilchen aus dem Zustand $|\beta\rangle$ entfernt wird, das heißt, die Einteilchenenergie des Zustandes $|\beta\rangle$ ist kleiner als die Fermienergie: $\varepsilon_{\beta} < \varepsilon_{F}$.

Wenn es sich bei $|\beta\rangle$ um einen unbesetzten Zustand handelt, also $\varepsilon_{\beta} > \varepsilon_{F}$, so wird die Änderung des Energieerwartungswertes für den Fall berechnet, daß ein Teilchen im Zustand $|\beta\rangle$ ergänzt wird [20]:

$$\varepsilon_{\beta}^{\text{corr}} = E_{A+1}(\beta \text{ hinzugefügt}) - E_{A}$$
$$= \varepsilon_{\beta} - \frac{\langle T_{\text{int}} \rangle}{A+1} - \frac{2}{mA(A+1)} \sum_{\alpha}^{<\varepsilon_{F}} \langle \alpha \beta | \mathbf{q}^{2} | \alpha \beta \rangle .$$
(3.48)

Aus diesen Beziehungen werden die korrigierten Einteilchenenergien $\varepsilon_{\beta}^{\text{corr}}$ bestimmt, die mit einem experimentellen Einteilchenspektrum verglichen werden können.

Kapitel 3 · Die Hartree-Fock-Methode

In Abbildung 3.2 werden am Beispiel des Kerns ⁴⁰Ca drei berechnete Einteilchenspektren mit dem experimentellen Spektrum verglichen. Dabei sind auf der linken Seite die Spektren der Protonen dargestellt und auf der rechten Seite die der Neutronen. Für das Tensorkorrelationsvolumen wurden die gleichen Werte verwendet wie in Abbildung 3.1. Es zeigt sich, daß die Reihenfolge der Niveaus richtig vorhergesagt wird. Allerdings ist der Abstand zwischen den Niveaus im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen zu groß. Lediglich die Lage der obersten besetzten Zustände stimmt mit dem Experiment überein.

Es ist anzunehmen, daß sich die Einteilchenspektren durch Hinzunahme einer abstoßenden Dreiteilchenwechselwirkung verbessern. Die zusätzliche Abstoßung hat zur Folge, daß die Nukleonen im Mittel einen größeren Abstand zueinander haben. Dies führt dazu, daß die Niveaus des Einteilchenspektrums dichter beieinander liegen. Bei den Untersuchungen in Kapitel 4.2 wird diese Vermutung bestätigt. Kapitel 4

Dreiteilchenwechselwirkung

Die einfachste Form einer Wechselwirkung zwischen zwei, drei oder auch mehr Teilchen ist die einer Kontaktwechselwirkung. Sie wird mit Hilfe der Diracschen Deltadistribution beschrieben und wirkt dementsprechend nur, wenn sich alle wechselwirkenden Teilchen am selben Ort befinden. Dies ist zwar eine einfache, aber keine realistische Darstellung einer Wechselwirkung. Es zeigt sich, daß eine Kontaktwechselwirkung nicht für alle Vielteilchenmethoden geeignet ist (siehe Kapitel 6).

Wenn x_1 , x_2 und x_3 die Ortsraumkoordinaten von drei Teilchen beschreiben, so hat die Wechselwirkung folgende Form:

$$V_3 = C_3 \ \delta^{(3)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \ \delta^{(3)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3) \ , \tag{4.1}$$

wobei $\delta^{(3)}(x)$ die Diracsche Deltadistribution in drei Dimensionen beschreibt. C_3 ist eine Konstante, die die Stärke der Wechselwirkung angibt. Sie ist positiv, da die Wechselwirkung abstoßend sein soll.

In diesem Kapitel werden zunächst in Abschnitt 4.1 die Matrixelemente der Dreiteilchenwechselwirkung bestimmt. Anschließend wird in Abschnitt 4.2 die optimale Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung ermittelt, so daß die experimentellen Vergleichsdaten möglichst genau wiedergegeben werden. Zusätzlich wird der Einfluß einiger weiterer Parameter auf die Resultate untersucht.

4.1 Berechnung der Matrixelemente

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Matrixelemente der Dreiteilchenwechselwirkung zu berechnen. Bei der sogenannten Talmi-Moshinsky-Transformation wird eine Separation zwischen Schwerpunkt- und Relativanteil durchgeführt. Dadurch vereinfacht sich die Berechnung der Matrixelemente, allerdings muß die aufwendige Transformation zur Trennung der Koordinaten durchgeführt werden. Eine andere Möglichkeit ist, direkt die Wellenfunktionen und die Wechselwirkung in Ortsdarstellung einzusetzen und die Integrale zu berechnen. Dieser Weg ist für eine Kontaktwechselwirkung relativ einfach, da die Eigenschaften der Deltadistribution ausgenutzt werden können.

Im folgenden werden die Matrixelemente in der Basis des harmonischen Oszillators berechnet. Dabei werden die Spin- und Isospinanteile zunächst vernachlässigt. Der Dreiteilchenzustand wird vorläufig als Produkt aus drei Einteilchenzuständen geschrieben. Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators haben die Quantenzahlen n(Hauptquantenzahl), l (Bahndrehimpuls) und m_l (magnetische Quantenzahl). Damit sehen die Matrixelemente in Ortsdarstellung folgendermaßen aus:

$$\begin{split} \langle n_1 l_1 m_{l_1} | \otimes \langle n_2 l_2 m_{l_2} | \otimes \langle n_3 l_3 m_{l_3} | \nabla_3 | n_4 l_4 m_{l_4} \rangle \otimes | n_5 l_5 m_{l_5} \rangle \otimes | n_6 l_6 m_{l_6} \rangle \\ &= \int d^3 x_1 d^3 x_2 d^3 x_3 \langle n_1 l_1 m_{l_1} | \boldsymbol{x}_1 \rangle \langle n_2 l_2 m_{l_2} | \boldsymbol{x}_2 \rangle \langle n_3 l_3 m_{l_3} | \boldsymbol{x}_3 \rangle \\ &\times C_3 \ \delta^{(3)} (\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2) \ \delta^{(3)} (\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_3) \langle \boldsymbol{x}_1 | n_4 l_4 m_{l_4} \rangle \langle \boldsymbol{x}_2 | n_5 l_5 m_{l_5} \rangle \langle \boldsymbol{x}_3 | n_6 l_6 m_{l_6} \rangle \end{split}$$

Wenn die Einteilchenkoordinaten x_2 und x_3 durch die Relativkoordinaten $r_{12} = x_1 - x_2$ und $r_{13} = x_1 - x_3$ ersetzt werden, so können sofort die Eigenschaften der Deltadistribution ausgenutzt werden:

$$\int d^{3}x_{1}d^{3}x_{2}d^{3}x_{3}\langle n_{1}l_{1}m_{l_{1}}|\boldsymbol{x}_{1}\rangle\langle n_{2}l_{2}m_{l_{2}}|\boldsymbol{x}_{2}\rangle\langle n_{3}l_{3}m_{l_{3}}|\boldsymbol{x}_{3}\rangle$$

$$\times C_{3} \ \delta^{(3)}(\boldsymbol{x}_{1}-\boldsymbol{x}_{2}) \ \delta^{(3)}(\boldsymbol{x}_{1}-\boldsymbol{x}_{3})\langle \boldsymbol{x}_{1}|n_{4}l_{4}m_{l_{4}}\rangle\langle \boldsymbol{x}_{2}|n_{5}l_{5}m_{l_{5}}\rangle\langle \boldsymbol{x}_{3}|n_{6}l_{6}m_{l_{6}}\rangle$$

$$= \ \int d^{3}x_{1}d^{3}r_{12}d^{3}r_{13}\langle n_{1}l_{1}m_{l_{1}}|\boldsymbol{x}_{1}\rangle\langle n_{2}l_{2}m_{l_{2}}|\boldsymbol{x}_{1}-\boldsymbol{r}_{12}\rangle\langle n_{3}l_{3}m_{l_{3}}|\boldsymbol{x}_{1}-\boldsymbol{r}_{13}\rangle$$

$$\times C_{3} \ \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}_{12}) \ \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}_{13})\langle \boldsymbol{x}_{1}|n_{4}l_{4}m_{l_{4}}\rangle\langle \boldsymbol{x}_{1}-\boldsymbol{r}_{12}|n_{5}l_{5}m_{l_{5}}\rangle\langle \boldsymbol{x}_{1}-\boldsymbol{r}_{13}|n_{6}l_{6}m_{l_{6}}\rangle$$

$$= \ C_{3} \ \int d^{3}x_{1}\langle n_{1}l_{1}m_{l_{1}}|\boldsymbol{x}_{1}\rangle\langle n_{2}l_{2}m_{l_{2}}|\boldsymbol{x}_{1}\rangle\langle n_{3}l_{3}m_{l_{3}}|\boldsymbol{x}_{1}\rangle$$

$$\times \langle \boldsymbol{x}_{1}|n_{4}l_{4}m_{l_{4}}\rangle\langle \boldsymbol{x}_{1}|n_{5}l_{5}m_{l_{5}}\rangle\langle \boldsymbol{x}_{1}|n_{6}l_{6}m_{l_{6}}\rangle . \tag{4.3}$$

Somit reduzieren sich die drei Raumintegrale auf ein Raumintegral.

Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators lauten in Ortsdarstellung [26]:

$$\langle \boldsymbol{x} | n l m_l \rangle = R_{nl}(\boldsymbol{x}) Y_{lm_l}(\Omega) . \tag{4.4}$$

Die $R_{nl}(x)$ sind reelle Funktionen, die den Radialteil der Wellenfunktion beschreiben, und $Y_{lml}(\Omega)$ bezeichnet den Winkelanteil, der durch die Kugelflächenfunktionen beschrieben wird. Dabei wurden die beiden Winkel im Raumwinkel Ω zusammengefaßt. Damit haben die Matrixelemente folgende Gestalt:

$$\langle n_{1}l_{1}m_{l_{1}}| \otimes \langle n_{2}l_{2}m_{l_{2}}| \otimes \langle n_{3}l_{3}m_{l_{3}}|\mathbf{V}_{3}|n_{4}l_{4}m_{l_{4}}\rangle \otimes |n_{5}l_{5}m_{l_{5}}\rangle \otimes |n_{6}l_{6}m_{l_{6}}\rangle$$

$$= C_{3} \int dx_{1}x_{1}^{2}R_{n_{1}l_{1}}(x_{1})R_{n_{2}l_{2}}(x_{1})R_{n_{3}l_{3}}(x_{1})R_{n_{4}l_{4}}(x_{1})R_{n_{5}l_{5}}(x_{1})R_{n_{6}l_{6}}(x_{1})$$

$$\times \int d\Omega \ Y_{l_{1}m_{l_{1}}}^{*}(\Omega)Y_{l_{2}m_{l_{2}}}^{*}(\Omega)Y_{l_{3}m_{l_{3}}}(\Omega)Y_{l_{4}m_{l_{4}}}(\Omega)Y_{l_{5}m_{l_{5}}}(\Omega)Y_{l_{6}m_{l_{6}}}(\Omega) \ .$$
 (4.5)

Das Raumwinkelintegral über die sechs Kugelflächenfunktionen kann analytisch ausgewertet werden. Dazu wird folgende Beziehung benötigt, die jeweils drei Kugelflächenfunktionen auf eine reduziert [27]:

$$Y_{l_{1}m_{l_{1}}}(\Omega)Y_{l_{2}m_{l_{2}}}(\Omega)Y_{l_{3}m_{l_{3}}}(\Omega) = \sum_{L_{1}M_{L_{1}}} \sqrt{\frac{(2l_{1}+1)(2l_{2}+1)}{4\pi(2L_{1}+1)}} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{2} \\ 0 0 \end{pmatrix} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{2} \\ m_{l_{1}} m_{l_{2}} \end{pmatrix} Y_{L_{1}M_{L_{1}}}(\Omega)Y_{l_{3}m_{l_{3}}}(\Omega) = \sum_{L_{1}M_{L_{1}}} \sqrt{\frac{(2l_{1}+1)(2l_{2}+1)}{4\pi(2L_{1}+1)}} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{2} \\ 0 0 \end{pmatrix} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{2} \\ m_{l_{1}} m_{l_{2}} \end{pmatrix} K_{L_{1}}(\Omega) = \sum_{L_{2}M_{L_{2}}} \sqrt{\frac{(2L_{1}+1)(2l_{3}+1)}{4\pi(2L_{2}+1)}} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{2} \\ 0 0 \end{pmatrix} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{2} \\ m_{l_{1}} m_{l_{2}} \end{pmatrix} K_{L_{2}}(\Omega) = \sum_{L_{2}M_{L_{2}}} \sqrt{\frac{(2L_{1}+1)(2l_{3}+1)}{4\pi(2L_{2}+1)}} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{3} \\ 0 0 \end{pmatrix} c \begin{pmatrix} l_{1} l_{3} \\ m_{l_{1}} m_{l_{3}} \end{pmatrix} K_{L_{2}}(\Omega) = K_{L_{2}M_{L_{2}}}(\Omega) =$$

dabei sind $c\begin{pmatrix} l_1 & l_2 \\ m_{l_1} & m_{l_2} \\ M_L \end{pmatrix}$ die Clebsch-Gordan-Koeffizienten (vgl. Gleichung 4.9). Das bedeutet, daß die beiden Bahndrehimpulse l_1, m_{l_1} und l_2, m_{l_2} zu einem Drehimpuls L_1, M_{L_1} gekoppelt werden. Dieser wird dann wiederum mit l_3, m_{l_3} zu L_2, M_{L_2} gekoppelt. Somit lassen sich drei Kugelflächenfunktionen durch eine Funktion mit gekoppel-

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung

tem Bahndrehimpuls ausdrücken. Für das Integral ergibt sich damit:

Für die vollständige Darstellung der Zustände muß noch der Spin-Isospinraum betrachtet werden. Da die Dreiteilchenwechselwirkung nur im Ortsraum wirkt, sind die Matrixelemente zwischen den Spin-Isospinkomponenten jeweils durch ein Kronecker-Delta gegeben:

$$\langle n_{1}l_{1}m_{l_{1}}m_{s_{1}}m_{t_{1}}, n_{2}l_{2}m_{l_{2}}m_{s_{2}}m_{t_{2}}, n_{3}l_{3}m_{l_{3}}m_{s_{3}}m_{t_{3}} | \times V_{3}|n_{4}l_{4}m_{l_{4}}m_{s_{4}}m_{t_{4}}, n_{5}l_{5}m_{l_{5}}m_{s_{5}}m_{t_{5}}, n_{6}l_{6}m_{l_{6}}m_{s_{6}}m_{t_{6}} \rangle = \langle n_{1}l_{1}m_{l_{1}}, n_{2}l_{2}m_{l_{2}}, n_{3}l_{3}m_{l_{3}}|V_{3}|n_{4}l_{4}m_{l_{4}}, n_{5}l_{5}m_{l_{5}}, n_{6}l_{6}m_{l_{6}} \rangle \times \delta_{m_{s_{1}}m_{s_{4}}}\delta_{m_{s_{2}}m_{s_{5}}}\delta_{m_{s_{3}}m_{s_{6}}}\delta_{m_{t_{1}}m_{t_{4}}}\delta_{m_{t_{2}}m_{t_{5}}}\delta_{m_{t_{3}}m_{t_{6}}} .$$

$$(4.8)$$

Dabei wurden die Quantenzahlen für Spin $(s = \frac{1}{2})$ und Isospin $(t = \frac{1}{2})$ der Übersichtlichkeit halber weggelassen.

4.1 · Berechnung der Matrixelemente

Für die nachfolgenden Rechnungen werden nicht diese ungekoppelten Zustände verwendet, sondern Bahndrehimpuls und Spin werden zu einem Gesamtdrehimpuls j, m gekoppelt. Die Kopplung (oder Entkopplung) von Drehimpulsen erfolgt mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten [7]:

$$|ls, jm\rangle = \sum_{m_l m_s} |lm_l, sm_s\rangle \langle lm_l, sm_s|ls, jm\rangle$$
$$= \sum_{m_l m_s} c \left(\left. \begin{array}{c} l & s \\ m_l & m_s \end{array} \right| \left. \begin{array}{c} j \\ m \end{array} \right) |lm_l, sm_s\rangle .$$
(4.9)

Damit ergibt sich für die gekoppelten Matrixelemente der Dreiteilchenwechselwirkung:

$$\begin{split} &\langle n_{1}l_{1}j_{1}m_{1}m_{t_{1}}, n_{2}l_{2}j_{2}m_{2}m_{t_{2}}, n_{3}l_{3}j_{3}m_{3}m_{t_{3}}| \\ &\times V_{3}|n_{4}l_{4}j_{4}m_{4}m_{4}, n_{5}l_{5}j_{5}m_{5}m_{t_{5}}, n_{6}l_{6}j_{6}m_{6}m_{t_{6}} \rangle \\ = \sum_{\substack{m_{1},\dots,m_{16}\\ms_{1},\dots,m_{$$

Für die Berechnung der Matrixelemente ist es sinnvoll, möglichst viele dieser 18 Summen direkt auszuwerten, um die Rechenzeit gering zu halten. Durch Anwendung

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung

der Kronecker-Deltas verschwinden drei der sechs m_s -Summen. Des weiteren kann folgende Eigenschaft der Clebsch-Gordan-Koeffizienten ausgenutzt werden: $m_l + m_s = m$ beziehungsweise $m_l = m - m_s$. Auf diese Weise können alle m_l - und M_L -Summationen eliminiert werden. Damit sehen die Matrixelemente für eine effiziente Berechnung folgendermaßen aus:

$$\langle n_{1}l_{1}j_{1}m_{1}m_{t_{1}}, n_{2}l_{2}j_{2}m_{2}m_{t_{2}}, n_{3}l_{3}j_{3}m_{3}m_{t_{3}} | \\ \times V_{3} | n_{4}l_{4}j_{4}m_{4}m_{t_{4}}, n_{5}l_{5}j_{5}m_{5}m_{t_{5}}, n_{6}l_{6}j_{6}m_{6}m_{t_{6}} \rangle$$

$$= C_{3}\delta_{m_{t_{1}}m_{t_{4}}}\delta_{m_{t_{2}}m_{t_{5}}}\delta_{m_{t_{3}}m_{t_{6}}} \\ \times \frac{1}{16\pi^{2}}\sqrt{(2l_{1}+1)(2l_{2}+1)(2l_{3}+1)(2l_{4}+1)(2l_{5}+1)(2l_{6}+1)} \\ \times \int dxx^{2}R_{n_{1}l_{1}}(x)R_{n_{2}l_{2}}(x)R_{n_{3}l_{3}}(x)R_{n_{4}l_{4}}(x)R_{n_{5}l_{5}}(x)R_{n_{6}l_{6}}(x) \\ \times \sum_{m_{s_{1}},m_{s_{2}},m_{s_{3}}} c \left(\frac{l_{1}}{m_{1}-m_{s_{1}}}\frac{1}{m_{s_{1}}} \Big| \frac{j_{1}}{m_{1}} \right) c \left(\frac{l_{2}}{m_{2}-m_{s_{2}}}\frac{1}{m_{2}} \Big| \frac{j_{2}}{m_{2}} \right) c \left(\frac{l_{3}}{m_{3}-m_{s_{3}}}\frac{1}{m_{3}} \right) \\ \times c \left(\frac{l_{4}}{m_{4}-m_{s_{1}}}\frac{1}{m_{s_{1}}} \Big| \frac{j_{4}}{m_{4}} \right) c \left(\frac{l_{5}}{m_{5}-m_{s_{2}}}\frac{1}{m_{s_{2}}} \Big| \frac{j_{5}}{m_{5}} \right) c \left(\frac{l_{6}}{m_{6}-m_{s_{3}}}\frac{1}{m_{s_{3}}} \Big| \frac{j_{6}}{m_{6}} \right) \\ \times \sum_{L_{1}L_{2}L_{3}}\frac{1}{(2L_{2}+1)} c \left(\frac{l_{1}l_{2}}{l_{1}} \Big| \frac{l_{1}}{0} \right) c \left(\frac{l_{1}l_{3}}{l_{0}} \Big| \frac{l_{2}}{0} \right) c \left(\frac{l_{4}l_{5}}{l_{3}} \Big| \frac{l_{3}}{0} \right) c \left(\frac{l_{3}}{l_{6}} \Big| \frac{l_{2}}{l_{2}} \right) \\ \times c \left(\frac{l_{1}}{m_{1}-m_{s_{1}}}\frac{l_{2}}{m_{2}-m_{s_{2}}} \Big| \frac{L_{1}}{M_{L_{1}}} \right) c \left(\frac{L_{1}}{l_{1}}\frac{l_{3}}{m_{3}} \Big| \frac{L_{2}}{M_{L_{2}}} \right) \\ \times c \left(\frac{l_{4}}{l_{4}-m_{s_{1}}}\frac{l_{5}}{m_{5}-m_{s_{2}}}} \Big| \frac{L_{3}}{M_{L_{3}}} \right) c \left(\frac{L_{3}}{l_{4}}\frac{l_{6}}{m_{6}-m_{s_{3}}} \Big| \frac{L_{2}}{M_{L_{2}}} \right) ,$$

$$(4.11)$$

wobei die M_L -Quantenzahlen folgende Bedingungen erfüllen müssen:

$$M_{L_1} = m_1 + m_2 - m_{s_1} - m_{s_2}$$

$$M_{L_2} = m_1 + m_2 + m_3 - m_{s_1} - m_{s_2} - m_{s_3}$$

$$= m_4 + m_5 + m_6 - m_{s_1} - m_{s_2} - m_{s_3}$$

$$M_{L_3} = m_4 + m_5 - m_{s_1} - m_{s_2} .$$
(4.12)

Bei den bisher behandelten Dreiteilchenzuständen handelt es sich um einfache Produktzustände. Für die korrekte Beschreibung von Fermionen müssen die Zustände jedoch antisymmetrisch sein bezüglich der Vertauschung von zwei Teilchen. Dies wird erreicht, indem die Produktzustände explizit antisymmetrisiert werden. Die Matrixelemente der antisymmetrisierten Dreiteilchenzustände können durch eine Summe über die bisher behandelten Matrixelemente zwischen den Produktzuständen dargestellt werden:

$${}_{a}\langle \alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}|V_{3}|\alpha_{4}\alpha_{5}\alpha_{6}\rangle_{a} = \langle \alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}|V_{3}|\alpha_{4}\alpha_{5}\alpha_{6}\rangle - \langle \alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}|V_{3}|\alpha_{5}\alpha_{4}\alpha_{6}\rangle + \langle \alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}|V_{3}|\alpha_{5}\alpha_{6}\alpha_{4}\rangle - \langle \alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}|V_{3}|\alpha_{6}\alpha_{5}\alpha_{4}\rangle + \langle \alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}|V_{3}|\alpha_{6}\alpha_{4}\alpha_{5}\rangle - \langle \alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}|V_{3}|\alpha_{4}\alpha_{6}\alpha_{5}\rangle .$$
(4.13)

Dabei wurde zur Übersichtlichkeit der Sammelindex α eingeführt, der für die Einteilchenquantenzahlen $nljmm_t$ steht.

4.2 Optimierung der Parameter

Nachdem im letzten Abschnitt die Matrixelemente berechnet wurden, soll jetzt unter anderem die optimale Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung bestimmt werden. Mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung lassen sich zum Beispiel die Bindungsenergien der Kerne über die ganze Nuklidkarte hinweg sehr gut beschreiben, die Ladungsradien sind dagegen systematisch kleiner als die experimentellen Werte. Der abstoßende Charakter der Dreiteilchenwechselwirkung führt dazu, daß sich einerseits die Ladungsradien vergrößern und andererseits die Bindungsenergien verringern. Diese unerwünschte Reduzierung der Bindungsenergien kann zum Teil dadurch kompensiert werden, daß die Reichweite I_{ϑ} des Tensorkorrelators (siehe Kapitel 2) vergrößert wird.

Am Beispiel dieser beiden Observablen wird nun der Einfluß der verschiedenen Parameter untersucht. Dazu werden die Eigenschaften einiger Kerne mit der in Kapitel 3 beschriebenen Hartree-Fock-Methode berechnet. Die ausgewählten Kerne reichen von ⁴He bis ²⁰⁸Pb und haben jeweils abgeschlossene Protonen- und Neutronenschalen. Kerne mit abgeschlossenen Schalen sind sphärisch symmetrisch. Es können zwar auch deformierte Kerne berechnet werden, aber dazu wird eine rechenaufwendigere Variante der Hartree-Fock-Programme benötigt. Die hier verwendete Variante erlaubt nur kleine Deformationen und ist daher gut für Kerne geeignet, bei denen sphärische Symmetrie erwartet wird.

Zu den Parametern, die für die Berechnungen festgelegt werden müssen, gehören neben der Stärke C_3 der Dreiteilchenwechselwirkung und den Tensorkorrelatorreichweiten $I_{\vartheta}^{(10)}$ im S = 1, T = 0 Kanal und $I_{\vartheta}^{(11)}$ im S = 1, T = 1 Kanal die Basisgröße e_{\max} sowie die Oszillatorlänge a_{HO} . Wie in Kapitel 4.1 beschrieben, werden als Basiszustände die Eigenzustände des harmonischen Oszillators verwendet. Die Begrenzung

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung



Abbildung 4.1: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $e_{max} = 8$, $a_{HO} = 1.90 \text{ fm}$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0 \text{ fm}^3$; (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28, 29].

der Basisgröße findet über die Quantenzahl $e = 2n + l \le e_{\text{max}}$ statt. Es ist möglich, zusätzlich Beschränkungen für die Hauptquantenzahl n und die Bahndrehimpulsquantenzahl l einzuführen. Bei den in diesem Abschnitt gezeigten Rechnungen beträgt die Basisgröße meistens $e_{\text{max}} = 8$. Die Oszillatorlänge gibt die Breite des Grundzustands des harmonischen Oszillators an. Sie wurde für diese und die folgenden Rechnungen auf einen mittleren Wert von $a_{\text{HO}} = 1.90$ fm gesetzt. Des weiteren muß noch der Reichweitenparameter des Zentralkorrelators I_R berücksichtigt werden, der für alle Rechnungen $I_R = 0.10$ fm⁴ beträgt. Dieser Parameter wird hier nicht geändert und wird daher im folgenden nicht mit aufgeführt.

In Abbildung 4.1 sind die Differenzen zwischen den berechneten und den experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und die Ladungsradien (unten) einiger



Abbildung 4.2: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $e_{\max} = 8$, $a_{HO} = 1.90 \text{ fm}$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$; (•): $I_{\vartheta}^{(11)} = 0 \text{ fm}^3$; (•): $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.05 \text{ fm}^3$; (•): $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28, 29].

Kerne dargestellt. Die Punkte zeigen die Ergebnisse einer Rechnung mit reiner Zweiteilchenwechselwirkung. Der Reichweitenparameter des Tensorkorrelators im S = 1, T = 0 Kanal beträgt dabei $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Bei den Quadraten beträgt die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$ und das Tensorkorrelationsvolumen $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte an. Die Ladungsradien nähern sich im Vergleich zu den Ergebnissen mit einer reinen Zweiteilchenwechselwirkung gut an die experimentellen Werte an. Die mit der Dreiteilchenwechselwirkung berechneten Bindungsenergien liegen im gleichen Bereich wie die vorherigen Werte. Allerdings fällt auf, daß die Abweichung vom experimentellen Wert für schwere Kerne deutlich zunimmt.

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung



Abbildung 4.3: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $e_{\max} = 8$, $a_{HO} = 1.90 \text{ fm}$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$; (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.15 \text{ fm}^3$; (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$; (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$; (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.40 \text{ fm}^3$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28, 29].

Diese Verkippung der Kurve kann etwas reduziert werden, wenn der Einfluß des Tensorkorrelators im S = 1, T = 1 Kanal betrachtet wird. Dieser Korrelator war bei den in Abbildung 4.1 gezeigten Rechnungen ausgeschaltet.

In Abbildung 4.2 sind die gleichen Kurven wie in Abbildung 4.1 dargestellt. Die Ergebnisse mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung (Punkte) dienen immer als Vergleich für die Veränderungen bei Hinzunahme der Dreiteilchenwechselwirkung. Hinzu kommen zwei weitere Kurven, bei denen der Reichweitenparameter des Tensor-korrelators für S = 1 und T = 1 auf $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.05 \text{ fm}^3$ (Rauten) beziehungsweise $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$ (Dreiecke) gesetzt wurde. Dabei wird die Differenz zwischen berechneter und experimenteller Bindungsenergie pro Nukleon für den Wert $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.05 \text{ fm}^3$



Abbildung 4.4: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $e_{\max} = 8$, $a_{HO} = 1.90$ fm, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$; (•): $C_3 = 1500 \text{ MeV fm}^6$; (•): $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$; (•): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$; (•): $C_3 = 3000 \text{ MeV fm}^6$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28, 29].

zu den schwereren Kernen hin deutlich abgesenkt. Dagegen ist für $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$ nur noch eine minimale Verbesserung der Bindungsenergien zu erkennen. Auf die Ladungsradien hat dieser Tensorkorrelator nur einen geringen Einfluß, sie werden nur leicht abgesenkt. Für alle folgenden Rechnungen wird der Tensorkorrelator im S = 1, T = 1 Kanal auf $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$ gesetzt.

Als nächstes wird die Wirkung des Tensorkorrelators für S = 1 und T = 0 untersucht. Abbildung 4.3 dient als Illustration dazu. Die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung beträgt wiederum $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$. Für das Tensorkorrelationsvolumen wurden die Werte $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.15 \text{ fm}^3$ (Quadrate), $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$ (Rauten), $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$ (Dreiecke) und $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.40 \text{ fm}^3$ (Kreuze) eingesetzt. Betrachtet man den Verlauf der

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung



Abbildung 4.5: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $e_{\max} = 8$, $a_{HO} = 1.90 \text{ fm}$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$; (•): $C_3 = 1500 \text{ MeV fm}^6$; (•): $C_3 = 2000 \text{ MeV$

Bindungsenergien pro Nukleon in dieser Reihenfolge, so fällt folgendes auf: Der Korrelator $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.15 \,\mathrm{fm^3}$ liefert die größte Diskrepanz zwischen berechneten und experimentellen Werten. Bei den Werten $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\mathrm{fm^3}$ und $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \,\mathrm{fm^3}$ tritt jeweils eine Verbesserung der Resultate ein. Für $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.40 \,\mathrm{fm^3}$ nimmt die Differenz, zumindest für mittelschwere und schwere Kerne, wieder etwas zu. Des weiteren ist diese Kurve gegenüber der Referenzkurve der Zweiteilchenwechselwirkung deutlich stärker verkippt als die ersten drei Kurven. Damit ergibt sich ein Minimum in den Bindungsenergien bei einem Tensorkorrelationsvolumen von $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \,\mathrm{fm^3}$. Dieses Minimum läßt sich folgendermaßen erklären: Mit zunehmender Reichweite des Tensorkorrelators werden Korrelationen mit größerer Reichweite berücksichtigt. Dies führt zu einer Vergrößerung



Abbildung 4.6: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $e_{\max} = 8$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \,\mathrm{fm^3}$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\mathrm{fm^3}$, $C_3 = 2500 \,\mathrm{MeV} \,\mathrm{fm^6}$; (•): $a_{\mathrm{HO}} = 1.70 \,\mathrm{fm}$; (•): $a_{\mathrm{HO}} = 1.90 \,\mathrm{fm}$; (•): $a_{\mathrm{HO}} = 2.20 \,\mathrm{fm}$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \,\mathrm{fm^3}$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28, 29].

der Bindungsenergie. Auf der anderen Seite wird die unitäre Transformation durch Vergrößerung der Korrelatorreichweite zustandsabhängig (siehe Kapitel 2.4). Dies hat zur Folge, daß den schwereren Kernen unangemessene Korrelationen aufgezwungen werden, was zu einer Verringerung der Bindungsenergien führt. Trotzdem wird neben dem scheinbar optimalen Wert des Tensorkorrelationsvolumens von $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \,\mathrm{fm}^3$ weiterhin auch der Wert $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\mathrm{fm}^3$ betrachtet. Denn bei der Untersuchung der Einteilchenspektren zeigt sich, daß eine zu große Tensorkorrelatorreichweite eine Vertauschung der Reihenfolge einiger Energieniveaus zur Folge hat.

Auf die Ladungsradien hat die Reichweite des Tensorkorrelators nur einen geringen Einfluß. Mit zunehmender Korrelatorreichweite vergrößern sich die Radien kontinuier-

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung



Abbildung 4.7: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $a_{\rm HO}$ optimal, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \,{\rm fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,{\rm fm}^3$, $C_3 = 2500 \,{\rm MeV} \,{\rm fm}^6$; (•): $e_{\rm max} = 6$; (•): $e_{\rm max} = 8$; (•): $e_{\rm max} = 10$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \,{\rm fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28, 29].

lich. Weiterhin fällt auf, daß die Resultate für ²⁰⁸Pb deutlich schlechter sind als für alle anderen Kerne, worauf später noch genauer eingegangen wird.

In den Abbildungen 4.4 und 4.5 sind die Abhängigkeiten von der Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung dargestellt. In Abbildung 4.4 beträgt der Reichweitenparameter des Tensorkorrelators $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$ und in Abbildung 4.5 ist $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$. Die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung reicht jeweils von $C_3 = 1500 \text{ MeV fm}^6$ (Quadrate) über $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$ (Rauten) und $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$ (Dreiecke) bis zu $C_3 = 3000 \text{ MeV fm}^6$ (Kreuze). In beiden Fällen vergrößern sich kontinuierlich sowohl die Abweichungen der Bindungsenergien pro Nukleon vom experimentellen Wert als auch die Ladungsradien. Dieser Verlauf ist zu erwarten, da mit zunehmender Stärke



Abbildung 4.8: Differenz zwischen in Hartree-Fock-Näherung berechneten und experimentellen Bindungsenergien pro Nukleon (oben) und Ladungsradien (unten) einiger Kerne. Für die Berechnung wurden folgende Parameter verwendet: $e_{\max} = 10$, a_{HO} optimal, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$; (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$; (•): $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$, $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28, 29].

der Dreiteilchenwechselwirkung die Abstoßung zwischen den Teilchen zunimmt, das heißt, die Teilchen haben im Mittel einen größeren Abstand zueinander.

Sowohl für $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$ als auch für $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$ werden die Ladungsradien am besten durch die Dreiteilchenwechselwirkung mit der Stärke $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$ beschrieben. Bei $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$ werden bei dieser Abstoßung genau die experimentellen Werte wiedergegeben, bei $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$ liegen die berechneten Radien knapp darunter.

Des weiteren müssen noch die Oszillatorlänge und die Basisgröße betrachtet werden. Am Beispiel von ²⁰⁸Pb läßt sich erkennen, daß die bisher verwendeten Basiszustände nicht optimal dafür geeignet sind, sehr schwere und damit große Kerne zu

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung

beschreiben. Dieses Problem kann dadurch gelöst werden, daß die Oszillatorlänge a_{HO} an den zu beschreibenden Kern angepaßt wird. Dazu wird im Bereich einer begrenzten Anzahl von Oszillatorlängen eine Minimierung der Bindungsenergie durchgeführt. Wie bereits erwähnt, gibt die Oszillatorlänge die Breite des Grundzustands des harmonischen Oszillators an. Für kleine Kerne ist es günstig eine kleine Oszillatorlänge zu wählen und große Kerne lassen sich besser mit Hlife einer etwas größeren Oszillatorlänge beschreiben. In Abbildung 4.6 ist dieser Sachverhalt dargestellt. Die Eigenschaften der Kerne wurden für verschiedene Werte der Oszillatorlänge berechnet. In der Abbildung sind der Ubersichtlichkeit halber nur die Ergebnisse für die drei Werte $a_{HO} = 1.70$ fm (Quadrate), 1.90 fm (Rauten) und 2.20 fm (Dreiecke) dargestellt. Auf die leichten Kerne hat die Wahl der Oszillatorlänge wenig Einfluß, aber bei den schwereren Kernen zeigt sich, daß eine größere Oszillatorlänge niedrigere Bindungsenergien liefert. Aus diesem Grund wird die Oszillatorlänge für jeden Kern einzeln bestimmt. Die genauen Werte sind in Tabelle 4.1 aufgelistet. Dabei fällt auf, daß die Tendenz, daß die großen Kerne auch eine große Oszillatorlänge bevorzugen, nicht so stark ausgeprägt ist, wie man erwarten würde.

lsotop	⁴ He	¹⁶ O	²⁴ O	³⁴ Si	⁴⁰ Ca	⁴⁸ Ca	⁴⁸ Ni	⁵⁶ Ni
$a_{\rm HO} \; [{\rm fm}]$	1.70	1.70	2.20	1.90	1.90	2.10	2.40	2.20
lsotop	⁷⁸ Ni	⁸⁸ Sr	⁹⁰ Zr	^{100}Sn	^{114}Sn	¹³² Sn	¹⁴⁶ Gd	²⁰⁸ Pb
$a_{\rm HO} \ [{\rm fm}]$	2.40	1.90	1.90	1.90	2.00	2.00	2.00	2.20

Tabelle 4.1: Optimale Oszillatorlängen der hier betrachteten Kerne. Die Energieminimierung wurde mit folgenden Parametern durchgeführt: $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\text{fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \,\text{fm}^3$, $C_3 = 2500 \,\text{MeV} \,\text{fm}^6$.

Schließlich wird noch der Einfluß der verwendeten Basisgröße e_{max} untersucht. Die Basisgröße gibt an, wieviele Eigenzustände des harmonischen Oszillators maximal überlagert werden, um die Einteilchenzustände darzustellen, aus denen der Hartree-Fock-Zustand aufgebaut wird (siehe Kapitel 3.3). Diese Anzahl der Zustände wird, wie bereits erwähnt, über die Quantenzahl $e = 2n + l \le e_{max}$ begrenzt. Abbildung 4.7 zeigt die Resultate, die sich mit den Basisgrößen $e_{max} = 6$ (Quadrate), $e_{max} = 8$ (Rauten) und $e_{max} = 10$ (Dreiecke) ergeben. Zwischen den Ergebnissen für $e_{max} = 6$ und $e_{max} = 8$ ist eine leichte Verbesserung zu sehen, vor allem für die schwereren Kerne. Dagegen ist beim Übergang zu $e_{max} = 10$ kaum ein Unterschied zu erkennen. Das bedeutet, daß diese Basis groß genug ist, um die hier untersuchten Grundzustandseigenschaften der

4.2 · Optimierung der Parameter



Abbildung 4.9: Einteilchenspektren von ¹⁶O (oben) und ⁴⁰Ca (unten). Die durchgezogenen Linien stellen die im Grundzustand besetzten Niveaus dar und die gestrichelten die unbesetzten. Zur Berechnung wurde folgender Parametersatz verwendet: $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, $e_{\text{max}} = 10$, a_{HO} optimal. Das jeweils linke Spektrum mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$ wurde mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung berechnet. Experimentelle Daten aus [30].

Kerne optimal zu beschreiben. Die Hinzunahme weiterer Basiszustände würde keine weitere Verbesserung der Resultate liefern.

Nach diesen zahlreichen Untersuchungen ergeben sich zwei Parametersätze, die im folgenden noch etwas genauer betrachtet werden sollen: Das optimale Tensorkorrelationsvolumen für S = 1 und T = 1 beträgt $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung wird auf $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$ gesetzt und die Basisgröße auf $e_{\text{max}} = 10$. Die Oszillatorlänge a_{HO} wird für jeden Kern einzeln optimiert. Für den Reichweitenparameter des Tensorkorrelators im S = 1, T = 0 Kanal werden die Wer-

Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung



Abbildung 4.10: Einteilchenspektren von ⁵⁶Ni (oben) mit vergrößertem Ausschnitt (unten). Die durchgezogenen Linien stellen die im Grundzustand besetzten Niveaus dar und die gestrichelten die unbesetzten. Zur Berechnung wurde folgender Parametersatz verwendet: $C_3 = 2500 \,\mathrm{MeV} \,\mathrm{fm}^6$, $I_\vartheta^{(11)} = 0.10 \,\mathrm{fm}^3$, $e_{\max} = 10$, a_{HO} optimal. Das jeweils linke Spektrum mit $I_\vartheta^{(10)} = 0.09 \,\mathrm{fm}^3$ wurde mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung berechnet.

te $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\mathrm{fm^3}$ und $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \,\mathrm{fm^3}$ näher untersucht. In Abbildung 4.8 werden die Resultate dieser beiden Parametersätze miteinander verglichen. Es hat den Anschein, daß der Tensorkorrelator $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \,\mathrm{fm^3}$ (Rauten) bessere Ergebnisse liefert. Die Abweichungen der Bindungsenergien pro Nukleon sind etwas kleiner als für $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\mathrm{fm^3}$ (Quadrate) und die Ladungsradien geben genau die experimentellen Daten wieder. Allerdings gibt es auch noch andere Aspekte, die bei der Wahl der Parameter berücksichtigt werden müssen.

Bei den Hartree-Fock-Rechnungen werden neben den Bindungsenergien und La-



4.2 · Optimierung der Parameter

Abbildung 4.11: Einteilchenspektren von 56 Ni (oben) mit vergrößertem Ausschnitt (unten). Die durchgezogenen Linien stellen die im Grundzustand besetzten Niveaus dar und die gestrichelten die unbesetzten. Zur Berechnung wurde folgender Parametersatz verwendet: $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \, {\rm fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \, {\rm fm}^3$, $e_{\rm max} = 10$, $a_{\rm HO}$ optimal. Das jeweils linke Spektrum mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \, {\rm fm}^3$ wurde mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung berechnet.

dungsradien zum Beispiel auch die Einteilchenspektren der Kerne berechnet. Diese Einteilchenspektren werden aus den korrigierten Hartree-Fock-Einteilchenenergien, die in Kapitel 3.4 besprochen wurden, aufgebaut. In Abbildung 4.9 sind als Beispiele die Einteilchenspektren von ¹⁶O und ⁴⁰Ca dargestellt. Auf der linken Seite sind die Energieniveaus der Protonen aufgetragen und auf der rechten Seite die der Neutronen. Das jeweils linke Spektrum wurde mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung und dem Tensorkorrelationsvolumen $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \,\mathrm{fm}^3$ berechnet. Für die mittleren Spektren wurden die oben diskutierten Parametersätze verwendet und ganz rechts ist das experimentelle



Abbildung 4.12: Experimentelle (gestrichelt) und berechnete (durchgezogen) Ladungsdichteverteilungen einiger Kerne. Zur Berechnung wurde folgender Parametersatz verwendet: $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, $e_{\max} = 10$, a_{HO} optimal. Experimentelle Daten aus [29].

Einteilchenspektrum zu sehen. Bei den berechneten Spektren geben die durchgezogenen Linien die im Grundzustand besetzten Niveaus an und die gestrichelten die unbesetzten. Alle berechneten Spektren sind im Vergleich zum experimentellen Spektrum zu stark gestreckt, das heißt, die Abstände zwischen den einzelnen Niveaus sind zu groß. Allerdings sind die Spektren, die mit der Dreiteilchenwechselwirkung berechnet wurden, gegenüber dem Spektrum ohne Dreiteilchenwechselwirkung deutlich gestaucht.

Bei den Einteilchenspektren von ⁵⁶Ni in Abbildung 4.10 (oben) fällt auf, daß die Energielücke zwischen den besetzten und den unbesetzten Zuständen sehr klein wird. In Abbildung 4.10 (unten) ist dieser Bereich des Spektrums noch einmal vergrößert dargestellt. Für das Spektrum, das mit dem Tensorkorrelator $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$ berechnet wurde, liegen das oberste besetzte und das unterste unbesetzte Niveau sowohl bei den Protonen als auch bei den Neutronen sehr dicht beieinander. Wird die Reichweite des Tensorkorrelators vergrößert ($I_{\vartheta}^{(10)} = 0.30 \text{ fm}^3$), so vertauschen diese Energieniveaus sogar ihre Reihenfolge. Dies führt zum Beispiel im Rahmen der Vielteilchenstörungs-

theorie zu unphysikalischen Ergebnissen, was in Kapitel 6 genauer diskutiert wird.

In Abbildung 4.11 sind analog zu Abbildung 4.10 die Einteilchenspektren von 56 Ni für verschiedene Stärken der Dreiteilchenwechselwirkung ($C_3 = 2000 \, {\rm MeV} \, {\rm fm}^6$, $2500 \, {\rm MeV} \, {\rm fm}^6$ und $3000 \, {\rm MeV} \, {\rm fm}^6$) aufgetragen. Dabei zeigt sich, daß für $C_3 = 3000 \, {\rm MeV} \, {\rm fm}^6$ ebenfalls einige Niveaus ihre Reihenfolge vertauschen.

Daraus folgt, daß der maximale Wert für die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$ beträgt, denn für größere Werte vertauschen einige Energieniveaus im Einteilchenspektrum ihre Reihenfolge und bei einer schwächeren Abstoßung werden die Ladungsradien schlechter wiedergegeben. Für das optimale Tensorkorrelationsvolumen ergibt sich $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, denn für größere Reichweiten vertauschen ebenfalls einige Einteilchenniveaus ihre Reihenfolge und bei kleineren Reichweiten werden die Bindungsenergien schlechter reproduziert.

Einen weiteren Anhaltspunkt für die Qualität der Resultate, die mit der Dreiteilchenwechselwirkung berechnet wurden, bietet der Vergleich von experimentellen mit berechneten Ladungsdichteverteilungen. In Abbildung 4.12 sind gestrichelt die experimentellen und durchgezogen die berechneten Ladungsdichteverteilungen für einige der bereits behandelten Kerne dargestellt. Für die Berechnung wurde der optimale Parametersatz ($C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, $e_{\text{max}} = 10$, a_{HO} optimal) verwendet. Es ist gut zu erkennen, daß die Dichte im Kerninneren für alle Kerne nahezu konstant ist und zur Kernoberfläche hin abfällt. Allerdings fällt auf, daß im Kerninneren deutliche Unterschiede zwischen den experimentellen und den berechneten Verteilungen auftreten. Dabei muß jedoch berücksichtigt werden, daß die experimentellen Daten in diesem Bereich große Fehler aufweisen, die in der Abbildung nicht dargestellt sind. Wichtig ist, daß die Verläufe an der Kernoberfläche für alle Kerne gut übereinstimmen. Dies hat zur Folge, daß auch die Ladungsradien sehr gut wiedergegeben werden.

Insgesamt wurde in diesem Abschnitt bestätigt, daß die Dreiteilchenwechselwirkung die vermutete Wirkung hat. Durch die zusätzliche Abstoßung vergrößern sich die Ladungsradien während gleichzeitig die Bindungsenergien verringert werden. Diese Abnahme der Bindungsenergien kann durch eine vergrößerte Reichweite des Tensorkorrelators kompensiert werden. Die Vergrößerung der Ladungsradien hat außerdem zur Folge, daß die Einteilchenspektren gestaucht werden und sich den experimentellen Spektren annähern. Kapitel 4 · Dreiteilchenwechselwirkung
Kapitel 5

Kollektive Anregungen

Bisher wurden lediglich die Grundzustände einiger Kerne betrachtet. Um die Eigenschaften der Dreiteilchenwechselwirkung besser zu verstehen, müssen darüber hinaus auch Anregungseigenschaften der Kerne untersucht werden. Neben einfachen Teilchen-Loch-Anregungen gibt es Anregungen, an denen alle Nukleonen beteiligt sind. Diese kollektiven Anregungen, die hier am Beispiel der Riesenresonanzen untersucht werden, können durch die Random Phase Approximation (RPA) beschrieben werden. Diese Methode, die auf den Ergebnissen der Hartree-Fock-Rechnungen aufbaut, wird in Abschnitt 5.1 abgeleitet. Anschließend werden in Abschnitt 5.2 einige Resultate für die Monopol-, Dipol- und Quadrupolriesenresonanzen gezeigt und ihre Abhängigkeit von einigen Parametern diskutiert.

5.1 Random Phase Approximation

Die Herleitung der RPA-Gleichungen erfolgt über die sogenannte Bewegungsgleichungsmethode [6, 7, 8]. Als Ausgangspunkt dient die exakte Schrödingergleichung

$$\mathbf{H}|\Psi_{\nu}\rangle = E_{\nu}|\Psi_{\nu}\rangle . \tag{5.1}$$

Formal werden die Operatoren ${\rm Q}^{\dagger}_{\nu}$ mit

$$Q_{\nu}^{\dagger} = |\Psi_{\nu}\rangle\langle\Psi_{0}|$$
 bzw. $Q_{\nu} = |\Psi_{0}\rangle\langle\Psi_{\nu}|$ (5.2)

definiert, die den Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ auf einen angeregten Zustand $|\Psi_{\nu}\rangle$ abbilden:

$$|\Psi_{\nu}\rangle = Q_{\nu}^{\dagger}|\Psi_{0}\rangle$$
 bzw. $Q_{\nu}|\Psi_{0}\rangle = 0$. (5.3)

65

Kapitel 5 · Kollektive Anregungen

Mit Hilfe dieser Operatoren läßt sich die Schrödingergleichung (5.1) in die Bewegungsgleichung

$$[\mathrm{H}, \mathrm{Q}_{\nu}^{\dagger}]|\Psi_{0}\rangle = (E_{\nu} - E_{0})\mathrm{Q}_{\nu}^{\dagger}|\Psi_{0}\rangle$$
(5.4)

umformen [6, 7, 8]. Wird diese Gleichung von links mit einem beliebigen Zustand $\langle \Psi_0 | \delta Q$ multipliziert, so ergibt sich:

$$\langle \Psi_0 | [\delta \mathbf{Q}, [\mathbf{H}, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}]] | \Psi_0 \rangle = (E_{\nu} - E_0) \langle \Psi_0 | [\delta \mathbf{Q}, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}] | \Psi_0 \rangle .$$
(5.5)

Dabei können auf beiden Seiten der Gleichung die Kommutatoren geschrieben werden, weil $\langle \Psi_0 | Q_{\nu}^{\dagger} = \langle \Psi_0 | H Q_{\nu}^{\dagger} = 0$ gilt. Die Variation

$$\delta \mathbf{Q}^{\dagger} |\Psi_{0}\rangle = \sum_{\nu \neq 0} \delta c_{\nu} \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger} |\Psi_{0}\rangle = \sum_{\nu \neq 0} \delta c_{\nu} |\Psi_{\nu}\rangle$$
(5.6)

ist beliebig, aber orthogonal zum Grundzustand. Daher ist Gleichung (5.5) exakt und äquivalent zur Schrödingergleichung (5.1).

Werden als Ansatz für die Operatoren Q_{ν}^{\dagger} Einteilchen-Einloch-Anregungen des Hartree-Fock-Zustandes verwendet, so führt dies auf die Gleichungen der Tamm-Dancoff-Methode [6, 7, 8]. Bei der Random Phase Approximation werden die Q_{ν}^{\dagger} folgendermaßen dargestellt:

$$Q_{\nu}^{\dagger} = \sum_{mi} X_{mi}^{(\nu)} a_{m}^{\dagger} a_{i} - \sum_{mi} Y_{mi}^{(\nu)} a_{i}^{\dagger} a_{m} .$$
(5.7)

Dabei bezeichnen die Indizes i, j Zustände unterhalb der Fermikante, also $\varepsilon_i, \varepsilon_j \leq \varepsilon_F$, und m, n bezeichnen Zustände oberhalb der Fermikante, $\varepsilon_m, \varepsilon_n > \varepsilon_F$, wobei sich sowohl die Fermikante als auch die Einteilchenenergien ε_k auf den Hartree-Fock-Zustand beziehen. Das bedeutet, daß die Operatoren $a_m^{\dagger}a_i$ und $a_i^{\dagger}a_m$ als Teilchen-Loch-Erzeuger beziehungsweise -Vernichter interpretiert werden können.

Der Grundzustand der Random Phase Approximation ist durch $Q_{\nu}|\text{RPA}\rangle = 0$ definiert. Dieser Zustand ist nicht gleich dem Hartree-Fock-Zustand, sondern enthält zusätzlich Teilchen-Loch-Beimischungen.

Die Variation

$$\delta \mathbf{Q}^{\dagger} |\mathsf{RPA}\rangle = \sum_{mi} \delta X_{mi}^{(\nu)} \mathbf{a}_m^{\dagger} \mathbf{a}_i |\mathsf{RPA}\rangle - \sum_{mi} \delta Y_{mi}^{(\nu)} \mathbf{a}_i^{\dagger} \mathbf{a}_m |\mathsf{RPA}\rangle$$
(5.8)

wird unabhängig für die Koeffizienten $X_{mi}^{(\nu)}$ und $Y_{mi}^{(\nu)}$ durchgeführt. Daher erhält man aus Gleichung (5.5) zwei gekoppelte Gleichungen, die sich für die beiden Fälle $\delta X_{mi}^{(\nu)} = 0$ beziehungsweise $\delta Y_{mi}^{(\nu)} = 0$ ergeben:

$$\langle \mathsf{RPA} | [\mathbf{a}_i^{\dagger} \mathbf{a}_m, [\mathbf{H}, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}]] | \mathsf{RPA} \rangle = E_{\nu}^{\mathsf{RPA}} \langle \mathsf{RPA} | [\mathbf{a}_i^{\dagger} \mathbf{a}_m, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}] | \mathsf{RPA} \rangle$$
(5.9)

$$\langle \mathsf{RPA} | [\mathbf{a}_m^{\dagger} \mathbf{a}_i, [\mathbf{H}, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}]] | \mathsf{RPA} \rangle = E_{\nu}^{\mathsf{RPA}} \langle \mathsf{RPA} | [\mathbf{a}_m^{\dagger} \mathbf{a}_i, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}] | \mathsf{RPA} \rangle$$
 (5.10)

5.1 · Random Phase Approximation

mit $E_{\nu}^{\text{RPA}} = E_{\nu} - E_0$. Dies sind die allgemeinen Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten $X_{mi}^{(\nu)}$ und $Y_{mi}^{(\nu)}$, die die Operatoren Q_{ν}^{\dagger} festlegen. Sie sind allerdings nicht direkt lösbar, da der RPA-Grundzustand $|\text{RPA}\rangle$ unbekannt ist. Um dieses Problem zu lösen, wird die sogenannte Quasibosonnäherung angewendet. Dabei wird angenommen, daß der Grundzustand der Random Phase Approximation nicht zu stark vom Hartree-Fock-Zustand $|\text{HF}\rangle$ abweicht. Das bedeutet, daß für die Berechnung von Erwartungswerten der RPA-Zustand durch den Hartree-Fock-Zustand ersetzt werden kann:

$$\langle \mathsf{RPA} | [\mathbf{a}_{i}^{\dagger} \mathbf{a}_{m}, \mathbf{a}_{n}^{\dagger} \mathbf{a}_{j}] | \mathsf{RPA} \rangle = \delta_{ij} \delta_{mn} - \delta_{mn} \langle \mathsf{RPA} | \mathbf{a}_{j} \mathbf{a}_{i}^{\dagger} | \mathsf{RPA} \rangle - \delta_{ij} \langle \mathsf{RPA} | \mathbf{a}_{n}^{\dagger} \mathbf{a}_{m} | \mathsf{RPA} \rangle$$

$$\approx \langle \mathsf{HF} | [\mathbf{a}_{i}^{\dagger} \mathbf{a}_{m}, \mathbf{a}_{n}^{\dagger} \mathbf{a}_{j}] | \mathsf{HF} \rangle = \delta_{ij} \delta_{mn} .$$

$$(5.11)$$

Diese Näherung wäre exakt, wenn es sich bei den Teilchen-Loch-Operatoren $a_i^{\dagger}a_m$ und $a_n^{\dagger}a_i$ um Bosonerzeuger handeln würde [6, 7, 8].

Die Quasibosonnäherung kann mit Hilfe eines iterativen Verfahrens umgangen werden. Dazu werden zunächst die Matrixelemente (5.15) und (5.16) mit dem Hartree-Fock-Zustand berechnet. Anschließend werden die RPA-Gleichungen (5.14) gelöst und der RPA-Grundzustand bestimmt. Im nächsten Schritt werden die Matrixelemente mit diesem RPA-Zustand berechnet und so weiter, bis die Lösungen konvergiert sind [31].

Im Rahmen der Quasibosonnäherung geben die Betragsquadrate der Entwicklungskoeffizienten $X_{mi}^{(\nu)}$ und $Y_{mi}^{(\nu)}$ die Wahrscheinlichkeiten an, daß sich ein Zustand $a_m^{\dagger}a_i \times |\text{RPA}\rangle$ beziehungsweise $a_i^{\dagger}a_m|\text{RPA}\rangle$ im angeregten Zustand $|\Psi_{\nu}\rangle$ befindet. Das bedeutet, daß die Entwicklungskoeffizienten die Einteilchenübergangsdichtematrix festlegen:

$$\varrho_{mi}^{(1)\nu} = \langle \mathsf{RPA} | \mathbf{a}_{i}^{\dagger} \mathbf{a}_{m} | \Psi_{\nu} \rangle = \langle \mathsf{RPA} | [\mathbf{a}_{i}^{\dagger} \mathbf{a}_{m}, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}] | \mathsf{RPA} \rangle \\
\approx \langle \mathsf{HF} | [\mathbf{a}_{i}^{\dagger} \mathbf{a}_{m}, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}] | \mathsf{HF} \rangle = X_{mi}^{(\nu)}$$
(5.12)

$$\varrho_{im}^{(1)\nu} = \langle \mathsf{RPA} | \mathbf{a}_m^{\dagger} \mathbf{a}_i | \Psi_{\nu} \rangle = \langle \mathsf{RPA} | [\mathbf{a}_m^{\dagger} \mathbf{a}_i, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}] | \mathsf{RPA} \rangle \\
\approx \langle \mathsf{HF} | [\mathbf{a}_m^{\dagger} \mathbf{a}_i, \mathbf{Q}_{\nu}^{\dagger}] | \mathsf{HF} \rangle = Y_{mi}^{(\nu)} .$$
(5.13)

Mit Hilfe dieser Näherung ergeben sich aus den Gleichungen (5.9) und (5.10) die RPA-Gleichungen, die kompakt in Matrixform dargestellt werden können:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^{(\nu)} \\ Y^{(\nu)} \end{pmatrix} = E_{\nu}^{\mathsf{RPA}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^{(\nu)} \\ Y^{(\nu)} \end{pmatrix} .$$
(5.14)

Die Untermatrizen A und B sind durch

$$A_{mi,nj} = \langle \mathsf{HF} | [\mathbf{a}_i^{\dagger} \mathbf{a}_m, [\mathbf{H}, \mathbf{a}_n^{\dagger} \mathbf{a}_j]] | \mathsf{HF} \rangle = (\varepsilon_m - \varepsilon_i) \delta_{mn} \delta_{ij} + V_{mj,in}$$
(5.15)

$$B_{mi,nj} = -\langle \mathsf{HF} | [\mathbf{a}_i^{\dagger} \mathbf{a}_m, [\mathbf{H}, \mathbf{a}_j^{\dagger} \mathbf{a}_n]] | \mathsf{HF} \rangle = V_{mn,ij}$$
(5.16)

67

Kapitel 5 · Kollektive Anregungen

definiert. Dabei bezeichnen die ε_k die Hartree-Fock-Einteilchenenergien und die $V_{mj,in}$ die Matrixelemente einer allgemeinen Zweiteilchenwechselwirkung bezüglich der Hartree-Fock-Einteilchenbasis. Aus den Gleichungen (5.15) und (5.16) wird ersichtlich, daß die Matrix A hermitesch und die Matrix B symmetrisch ist. In den RPA-Gleichungen taucht die Metrik $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ auf, die zur Folge hat, daß die Eigenwerte E_{ν}^{RPA} komplex sein können.

Die Lösungen der RPA-Gleichungen erfüllen einerseits die Orthogonalitätsrelation [6, 7, 8]

$$\delta_{\mu\nu} = \sum_{mi} (X_{mi}^{(\mu)*} X_{mi}^{(\nu)} - Y_{mi}^{(\mu)*} Y_{mi}^{(\nu)})$$
(5.17)

und andererseits die Vollständigkeitsrelation

$$\delta_{mn}\delta_{ij} = \sum_{\nu} (X_{mi}^{(\nu)*} X_{nj}^{(\nu)} - Y_{mi}^{(\nu)*} Y_{nj}^{(\nu)}) .$$
(5.18)

Die Energie des RPA-Grundzustands

$$\langle \mathsf{RPA}|\mathsf{H}|\mathsf{RPA}\rangle = \langle \mathsf{HF}|\mathsf{H}|\mathsf{HF}\rangle - \sum_{\nu} E_{\nu}^{\mathsf{RPA}} \sum_{mi} |Y_{mi}^{(\nu)}|^2$$
(5.19)

ist immer kleiner als die Hartree-Fock-Energie. Das Hartree-Fock-Verfahren wurde aus dem Variationsprinzip abgeleitet (siehe Kapitel 3). Daher stellt die Hartree-Fock-Energie eine obere Schranke für die exakte Grundzustandsenergie dar. Für die Random Phase Approximation gilt dies nicht mehr. Die RPA-Energie kann daher auch kleiner sein als die exakte Grundzustandsenergie [32].

Der Grundzustand der Random Phase Approximation ist durch $Q_{\nu}|\text{RPA}\rangle = 0$ definiert. Es zeigt sich, daß der RPA-Zustand ein kohärenter Zustand von Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen aus dem Hartree-Fock-Zustand ist [6, 7, 8]:

$$|\mathsf{RPA}\rangle = N_0 \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{minj} Z_{mi,nj} \mathbf{a}_m^{\dagger} \mathbf{a}_i \mathbf{a}_n^{\dagger} \mathbf{a}_j\right\} |\mathsf{HF}\rangle .$$
(5.20)

Dabei ist N_0 eine Normierungskonstante und Z läßt sich aus $\sum_{mi} X_{mi}^{(\nu)*} Z_{mi,nj} = Y_{nj}^{(\nu)*}$ bestimmen. Das bedeutet, daß der RPA-Zustand nicht nur aus Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen des Hartree-Fock-Zustandes aufgebaut ist, sondern auch Dreiteilchen-Dreiloch-, Vierteilchen-Vierloch-Anregungen und so weiter enthält.

RPA mit der korrelierten Wechselwirkung

Die folgenden Berechnungen werden auf der Grundlage der korrelierten Wechselwirkung V_{UCOM} durchgeführt. Dabei wird angenommen, daß die betrachteten Kerne sphärisch

5.1 · Random Phase Approximation

symmetrisch sind. Daher können die einzelnen Drehimpulse zu einem guten Gesamtdrehimpuls J gekoppelt werden, der gleichzeitig die Multipolarität der kollektiven Anregungen angibt [33]. In dieser gekoppelten Darstellung lauten die Operatoren

$$Q_{\nu,JM}^{\dagger} = \sum_{ph} (X_{ph}^{\nu,JM} A_{ph}^{J,M^{\dagger}} - Y_{ph}^{\nu,JM} (-1)^{J-M} A_{ph}^{J,-M}) , \qquad (5.21)$$

wobei die Summe über alle Teilchen-Loch-Anregungen des Hartree-Fock-Zustands läuft. Dabei wurde anstelle der einzelnen Erzeuger und Vernichter der Teilchen-Loch-Erzeuger

$$\mathbf{A}_{ph}^{J,M^{\dagger}} = \sum_{m_p m_h} \mathbf{c} \left(\begin{array}{c} j_p & j_h \\ m_p & m_h \end{array} \middle| \begin{array}{c} J \\ M \end{array} \right) (-1)^{j_h - m_h} \mathbf{a}_{j_p m_p}^{\dagger} \mathbf{a}_{j_h m_h}$$
(5.22)

eingeführt, wobei die Indizes p und h für die Teilchen beziehungsweise Löcher stehen. Für die Berechnung der Matrizen A und B, die in den RPA-Gleichungen (5.14) auftreten, wird analog zum Hartree-Fock-Verfahren der intrinsische Hamiltonoperator H_{int} verwendet. Das bedeutet, daß der Schwerpunktanteil der kinetischen Energie nicht im Hamiltonoperator enthalten ist (vgl. Kapitel 3.3). Dann lassen sich die Matrixelemente folgendermaßen darstellen [33]:

$$A_{php'h'}^{J} = \langle \mathsf{HF}|[[\mathsf{A}_{ph}^{J,M},\mathsf{H}_{\mathsf{int}}],\mathsf{A}_{p'h'}^{J,M^{\dagger}}]|\mathsf{HF}\rangle$$
(5.23)

$$B_{php'h'}^{J} = -\langle \mathsf{HF}|[[A_{ph}^{J,M}, H_{\mathsf{int}}], (-1)^{J-M} A_{p'h'}^{J,-M}]|\mathsf{HF}\rangle .$$
(5.24)

Die Berechnung dieser Matrixelemente mit der vollen Dreiteilchenwechselwirkung wäre sehr aufwendig. Daher wird aus der Dreiteilchenwechselwirkung eine effektive Zweiteilchenwechselwirkung konstruiert. Dazu werden die Matrixelemente $V^{(3)}_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}$ der Dreiteilchenwechselwirkung mit der Einteilchendichtematrix $\varrho^{(1)}$, die in Kapitel 3.2 eingeführt wurde, gefaltet [34]:

$$V_{ab,\bar{a}\bar{b}}^{\text{eff}} = \sum_{c\bar{c}} V_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}}^{(3)} \ \varrho_{\bar{c}c}^{(1)}$$
(5.25)

Für die Berechnungen im Rahmen der Random Phase Approximation muß diese effektive Wechselwirkung mit dem Faktor 3 multipliziert werden [34], so daß sich für den Hamiltonoperator

$$H_{\text{int}} = T_{\text{int}} + V_{\text{UCOM}} + 3\sum_{c\bar{c}} V^{(3)}_{abc,\bar{a}\bar{b}\bar{c}} \ \varrho^{(1)}_{\bar{c}c} a^{\dagger}_{a} a^{\dagger}_{b} a_{\bar{b}} a_{\bar{a}}$$
(5.26)

ergibt.

69

Kapitel 5 · Kollektive Anregungen

5.2 Riesenresonanzen

In diesem Abschnitt werden einige Ergebnisse diskutiert, die sich für die Monopol-, Dipol- und Quadrupolriesenresonanzen ergeben. Dabei werden nur elektrische Multipolübergänge betrachtet, deren Übergangswahrscheinlichkeiten durch

$$B^{T}(\mathsf{E}J, J_{i} \to J_{f}) = \frac{1}{2J_{i}+1} |\langle f \| \mathbf{Q}_{J}^{T} \| i \rangle|^{2}$$
(5.27)

gegeben sind [6, 33]. Dabei bezeichnen $|i\rangle$ und $|f\rangle$ den Ausgangs- beziehungsweise Endzustand und in das reduzierte Matrixelement $\langle f \| \mathbf{Q}_J^T \| i \rangle$ geht der betrachtete Multipolübergangsoperator \mathbf{Q}_J^T ein. Das EJ deutet an, daß es sich um den elektrischen Übergang der Multipolarität J handelt. In diesem Abschnitt werden isoskalare Monopolanregungen behandelt, deren Übergangsoperator durch

$$Q_{00}^{T=0} = \sum_{i=1}^{A} x_i^2 Y_{00}(\vartheta_i, \varphi_i) , \qquad (5.28)$$

definiert ist [33], wobei $Y_{JM}(\vartheta, \varphi)$ die Kugelflächenfunktionen sind. Des weiteren werden isovektorielle Dipolanregungen mit dem Übergangsoperator

$$Q_{1M}^{T=1} = e \sum_{i=1}^{A} \tau_3^{(i)} x_i \ Y_{1M}(\vartheta_i, \varphi_i)$$
(5.29)

sowie isoskalare Quadrupolanregungen mit

$$Q_{2M}^{T=0} = e \sum_{i=1}^{A} x_i^2 Y_{2M}(\vartheta_i, \varphi_i)$$
(5.30)

diskutiert. Dabei bezeichnet e die Elementarladung und τ_3 die 3. Komponente des Isospins.

Bei Rechnungen im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren müssen alle Operatoren konsistent transformiert werden. Es zeigt sich jedoch, daß die korrelierten Anteile der Multipolübergangsoperatoren nur sehr geringe Beiträge liefern [33]. Daher wird an dieser Stelle mit den unkorrelierten Operatoren (5.28) – (5.30) gerechnet.

Zur übersichtlicheren Darstellung werden die diskreten Ubergangsstärken (5.27) mit einer Lorentzkurve (Breite 2 MeV) gefaltet, so daß sich die kontinuierlichen Übergangsstärkeverteilungen $R_J^T(E)$ in Abhängigkeit von der Anregungsenergie E ergeben.

Als erstes Beispiel sind in Abbildung 5.1 die Stärkeverteilungen der isoskalaren Monopolriesenresonanz, der sogenannten Atmungsmode, für einige Kerne mit abgeschlossenen Schalen dargestellt. Die durchgezogene Kurve zeigt jeweils die Stärkeverteilung, die sich aus einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung ergibt. Der

5.2 · Riesenresonanzen



Abbildung 5.1: Stärkeverteilungen der isoskalaren Monopolanregung für verschiedene Stärken der Dreiteilchenwechselwirkung. (-----): $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$; (-----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$; (-----): $C_3 = 3000 \text{ MeV fm}^6$. Für die Berechnung wurde der optimale Parametersatz mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, a_{HO} optimal verwendet. Für ²⁰⁸Pb beträgt die Basisgröße $e_{\text{max}} = 10$, für alle anderen Kerne ist $e_{\text{max}} = 8$. Die durchgezogene Kurve zeigt als Referenz die Ergebnisse einer Rechnung mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung und mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die Pfeile zeigen die Schwerpunkte der experimentellen Stärkeverteilungen an [35, 36, 37].

Kapitel 5 · Kollektive Anregungen

Reichweitenparameter des Tensorkorrelators beträgt dabei $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \,\mathrm{fm^3}$. Die gestrichelten Kurven geben die Ergebnisse für verschiedene Stärken der Dreiteilchenwechselwirkung ($C_3 = 2000 \,\mathrm{MeV} \,\mathrm{fm^6}, 2500 \,\mathrm{MeV} \,\mathrm{fm^6}$ und $3000 \,\mathrm{MeV} \,\mathrm{fm^6}$) wieder. Dabei wurde der in Kapitel 4.2 bestimmte optimale Parametersatz mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\mathrm{fm^3}$ und $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \,\mathrm{fm^3}$ verwendet. Die Basisgröße beträgt für ²⁰⁸Pb $e_{\max} = 10$ und für die restlichen Kerne $e_{\max} = 8$. Dabei muß berücksichtigt werden, daß die Ergebnisse bei diesen Basisgrößen noch nicht konvergiert sind, worauf am Ende dieses Abschnitts genauer eingegangen wird. Die Pfeile zeigen die Schwerpunkte der experimentellen Stärkeverteilungen an.

Aus Abbildung 5.1 wird ersichtlich, daß die isoskalaren Monopolanregungen bereits recht gut mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung beschrieben werden. Bei den Ergebnissen mit der Dreiteilchenwechselwirkung liegen die Hauptmaxima der Stärkeverteilungen bei ¹⁶O, ⁹⁰Zr und ²⁰⁸Pb energetisch etwas höher und bei ⁴⁰Ca, ⁴⁸Ca und ⁵⁶Ni etwas niedriger als die der Zweiteilchenergebnisse. Mit zunehmender Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung wird bei allen betrachteten Kernen die Übergangsstärke zu kleineren Energien verschoben. Die einzige Ausnahme bildet ²⁰⁸Pb, bei dem der Schwerpunkt der Stärkeverteilung unverändert bleibt. Besonders bei den mittelschweren Kernen zeigt sich im Vergleich zu den Resultaten ohne Dreiteilchenwechselwirkung eine starke Fragmentierung der Übergangsstärkeverteilung, die aber im wesentlichen unabhängig von der Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung ist. Eine mögliche Erklärung für diese Aufspaltung liegt in den Eigenschaften der Kontaktwechselwirkung, die als Ansatz für die Dreiteilchenwechselwirkung gewählt wurde, begründet. Auf die Besonderheiten von Kontaktwechselwirkungen wird am Ende von Kapitel 6 genauer eingegangen.

In Abbildung 5.2 sind analog zu Abbildung 5.1 die Übergangsstärkeverteilungen der isovektoriellen Dipolriesenresonanz dargestellt, bei der die Protonen gegen die Neutronen schwingen. Es zeigt sich wiederum, daß die Übergangsstärken mit zunehmender Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung zu niedrigeren Energien verschoben werden. Bei den Kernen ¹⁶O und ⁴⁰Ca zeigt sich die Dipolriesenresonanz stark ausgeprägt. Sie liegt energetisch niedriger als die Resultate ohne Dreiteilchenwechselwirkung und mit zunehmender Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung auch deutlich niedriger als das Experiment. Bei ⁴⁸Ca und ⁵⁶Ni sind die Stärkeverteilungen der reinen Zweiteilchenwechselwirkung auf einen großen Bereich verteilt. Durch Hinzunahme der Dreiteilchenwechselwirkung werden diese Verteilungen deutlich schmaler und verschieben sich gleichzeitig zu niedrigeren Anregungsenergien. Für ⁹⁰Zr und ²⁰⁸Pb werden die Stärkeverteilungen mit einer mittleren Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung stimmen gut mit dem Experiment



Abbildung 5.2: Stärkeverteilungen der isovektoriellen Dipolanregung für verschiedene Stärken der Dreiteilchenwechselwirkung. (-----): $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$; (-----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$; (-----): $C_3 = 3000 \text{ MeV fm}^6$. Für die Berechnung wurde der optimale Parametersatz mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, a_{HO} optimal verwendet. Für ²⁰⁸Pb beträgt die Basisgröße $e_{\text{max}} = 10$, für alle anderen Kerne ist $e_{\text{max}} = 8$. Die durchgezogene Kurve zeigt als Referenz die Ergebnisse einer Rechnung mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung und mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die Pfeile zeigen die Schwerpunkte der experimentellen Stärkeverteilungen an [38, 39, 40, 41].

Kapitel 5 · Kollektive Anregungen



Abbildung 5.3: Stärkeverteilungen der isoskalaren Quadrupolanregung für verschiedene Stärken der Dreiteilchenwechselwirkung. (-----): $C_3 = 2000 \text{ MeV fm}^6$; (-----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$; (-----): $C_3 = 3000 \text{ MeV fm}^6$. Für die Berechnung wurde der optimale Parametersatz mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, a_{HO} optimal verwendet. Für ²⁰⁸Pb beträgt die Basisgröße $e_{\text{max}} = 10$, für alle anderen Kerne ist $e_{\text{max}} = 8$. Die durchgezogene Kurve zeigt als Referenz die Ergebnisse einer Rechnung mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung und mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die Pfeile zeigen die Schwerpunkte der experimentellen Stärkeverteilungen an [35, 36, 42].

überein. Insgesamt zeigt sich bei der isovektoriellen Dipolriesenresonanz eine Verbesserung der Ergebnisse durch Hinzunahme der Dreiteilchenwechselwirkung.

Schließlich werden noch isoskalare Quadrupolanregungen betrachtet, die in Abbildung 5.3 dargestellt sind. Wie auch bei den beiden vorangegangenen Beispielen verschiebt sich die Übergangsstärke mit zunehmender Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung zu niedrigeren Energien. Es zeigt sich bei allen Kernen ein stark ausgeprägter kollektiver Zustand, die Quadrupolriesenresonanz. Bei ¹⁶O und ⁴⁰Ca stimmen die Rechnungen gut mit den Experimenten überein, wobei die Quadrupolanregung bei ⁴⁰Ca die Struktur eines Doppelpeaks aufweist. Bei den restlichen Kernen zeigt sich zusätzlich eine Anregung bei kleinen Energien, besonders ausgeprägt bei ⁵⁶Ni. Diese Anregungen haben allerdings keinen kollektiven Charakter, sondern sind einfache Teilchen-Loch-Anregungen von einzelnen Nukleonen. Bei ⁹⁰Zr und ²⁰⁸Pb liegen die berechneten Stärken energetisch etwas höher als die gemessenen. Allerdings muß hier beachtet werden, daß die verwendeten Basisgrößen für große Kerne nicht ausreichend sind, das heißt, die Ergebnisse sind noch nicht konvergiert.

Als nächstes wird der Einfluß des Tensorkorrelators auf die Ubergangsstärkeverteilungen untersucht. Dazu sind in Abbildung 5.4 die drei diskutierten Anregungsarten am Beispiel von ⁴⁰Ca und ⁹⁰Zr jeweils für die Werte $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.15 \text{ fm}^3$ und 0.20 fm^3 des Reichweitenparameters dargestellt. Bei ⁴⁰Ca hat die Reichweite des Tensorkorrelators nur einen geringen Einfluß auf alle betrachteten Riesenresonanzen. Bei ⁹⁰Zr wird die Übergangsstärke der Monopolanregung leicht zu niedrigeren Energien verschoben. Die Dipol- und die Quadrupolanregung werden dagegen nur wenig vom Tensorkorrelator beeinflußt.

Abschließend sind die Riesenresonanzen in Abbildung 5.5 für verschiedene Basisgrößen dargestellt. Die Übergangsstärkeverteilungen wurden für ⁴⁰Ca für die Basisgrößen $e_{max} = 6,8$ und 10 berechnet, für ⁹⁰Zr wurden die Berechnungen zusätzlich für $e_{max} = 12$ durchgeführt. Bei allen betrachteten Anregungsarten zeigt sich mit zunehmender Basisgröße eine stärkere Fragmentierung der Stärkeverteilungen. Gleichzeitig werden die Schwerpunkte der Verteilungen zu niedrigeren Energien verschoben. Bei keinem der Kerne zeigen sich Anzeichen von Konvergenz. Dabei muß allerdings berücksichtigt werden, daß bei diesen Basisgrößen selbst die Ergebnisse mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung noch nicht vollständig konvergiert sind. Daher können auch die Resultate mit der Dreiteilchenwechselwirkung nicht konvergiert sein. Hinzu kommt, daß es sich bei der verwendeten Dreiteilchenwechselwirkung um eine Kontaktkraft handelt. An dieser Stelle läßt sich noch keine Aussage darüber treffen, ob die fehlende Konvergenz nur in den kleinen Basisgrößen begründet ist, oder ob die Kontaktkraft die Konvergenz der Resultate verhindert. Die Probleme einer Kontaktwech-

Kapitel 5 · Kollektive Anregungen



Abbildung 5.4: Stärkeverteilungen der isoskalaren Monopol, isovektoriellen Dipol- und isoskalaren Quadrupolanregung für verschiedene Reichweiten des Tensorkorrelators. (-----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6, I_{\vartheta}^{(10)} = 0.15 \text{ fm}^3$; (----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6, I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$. Für die Berechnung wurde der optimale Parametersatz mit $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3, a_{\text{HO}}$ optimal und $e_{\text{max}} = 8$ verwendet. Die durchgezogene Kurve zeigt als Referenz die Ergebnisse einer Rechnung mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung und mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die Pfeile zeigen die Schwerpunkte der experimentellen Stärkeverteilungen an [36, 39, 37, 40, 42].



Abbildung 5.5: Stärkeverteilungen der isoskalaren Monopol, isovektoriellen Dipolund isoskalaren Quadrupolanregung für verschiedene Basisgrößen. (-----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6, e_{\max} = 6$; (-----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6, e_{\max} = 8$; (----): $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6, e_{\max} = 12$. Für die Berechnung wurde der optimale Parametersatz mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3, I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3, a_{\text{HO}}$ optimal verwendet. Die durchgezogene Kurve zeigt als Referenz die Ergebnisse einer Rechnung mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung und mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die Pfeile zeigen die Schwerpunkte der experimentellen Stärkeverteilungen an[36, 39, 37, 40, 42].

Kapitel 5 · Kollektive Anregungen

selwirkung werden am Ende von Kapitel 6 ausführlicher diskutiert. Trotzdem zeigt sich sowohl bei der isovektoriellen Dipolriesenresonanz als auch bei der isoskalaren Quadrupolriesenresonanz eine deutliche Verbesserung der Ergebnisse durch Hinzunahme der Dreiteilchenwechselwirkung. Kapitel 6

Vielteilchenstörungstheorie

Mit der Methode der unitären Korrelatoren (Kapitel 2) werden nur die kurzreichweitigen Anteile der Tensorkorrelationen behandelt. Die langreichweitigen Korrelationen müssen durch die Versuchszustände beschrieben werden. Die Slaterdeterminanten der Hartree-Fock-Methode sind dazu jedoch nicht geeignet. Eine einfache Möglichkeit, diese langreichweitigen Korrelationen einzubringen, bietet die Vielteilchenstörungstheorie. Dabei werden die Ergebnisse der Hartree-Fock-Rechnungen als Ausgangspunkt verwendet.

Die Störungstheorie ist zwar einfach anzuwenden, aber sie hat auch einige Nachteile. So ist zum Beispiel die Konvergenz sichergestellt. Sobald in den Einteilchenspektren der betrachteten Kerne einige Energieniveaus zu dicht beieinander liegen oder Entartungen auftreten, ist bei der Störungstheorie keine Konvergenz zu erreichen. Trotzdem bieten die niedrigen Ordnungen der Vielteilchenstörungstheorie eine gute Möglichkeit, den Einfluß von langreichweitigen Korrelationen quantitativ zu untersuchen.

In diesem Kapitel werden zunächst die wichtigsten Punkte der allgemeinen Störungstheorie dargestellt (Abschnitt 6.1). Anschließend wird in Abschnitt 6.2 die zweite Ordnung der Vielteilchenstörungstheorie abgeleitet, die auf den Resultaten einer Hartree-Fock-Rechnung aufbaut. In Abschnitt 6.3 werden dann einige Ergebnisse der Vielteilchenstörungstheorie gezeigt und die Probleme diskutiert, die auftreten, wenn die Störungstheorie auf eine Kontaktkraft angewendet wird. Kapitel 6 · Vielteilchenstörungstheorie

6.1 Grundlagen der Störungstheorie

Mit Hilfe der Störungstheorie können Probleme von der Form

$$H|\Phi_i\rangle = (H_0 + W)|\Phi_i\rangle = E_i|\Phi_i\rangle$$
(6.1)

näherungsweise gelöst werden, wobei die Eigenwerte $E_i^{(0)}$ und Eigenzustände $|\Psi_i^{(0)}\rangle$ des Hamiltonoperators H₀ bekannt sind [9]: H₀ $|\Psi_i^{(0)}\rangle = E_i^{(0)}|\Psi_i^{(0)}\rangle$. Wenn die Störung W hinreichend klein ist, so läßt sich ein Verfahren entwickeln, nach dem die Energien $E_i^{(0)}$ und die Zustände $|\Psi_i^{(0)}\rangle$ Schritt für Schritt der gesuchten Lösung E_i beziehungsweise $|\Phi_i\rangle$ des Hamiltonoperators H angenähert werden. Zu diesem Zweck wird der formale Entwicklungsparameter λ eingeführt, der später auf den Wert 1 gesetzt wird [9]:

$$H = H_0 + \lambda W . \tag{6.2}$$

Damit können die exakten Eigenenergien und -zustände in eine Potenzreihe entwickelt werden:

$$E_i = E_i^{(0)} + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \dots$$
(6.3)

$$|\Phi_i\rangle = |\Psi_i^{(0)}\rangle + \lambda |\Psi_i^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\Psi_i^{(2)}\rangle + \dots$$
(6.4)

Die Aufgabe besteht nun darin, die höheren Ordnungen der Eigenenergien $E_i^{(n)}$ durch die Energien und Zustände der nullten Ordnung auszudrücken.

Es wird angenommen, daß die ungestörten Zustände normiert sind: $\langle \Psi_i^{(0)} | \Psi_i^{(0)} \rangle = 1$. Darüber hinaus wird die Normierung des gesuchten Zustands so gewählt, daß gilt $\langle \Psi_i^{(0)} | \Phi_i \rangle = 1$ [9]. Wird hier die Entwicklung des Zustandes $| \Phi_i \rangle$ eingesetzt, so folgt aus der Annahme, daß die Gleichung für beliebige λ erfüllt sein soll:

$$\langle \Psi_i^{(0)} | \Psi_i^{(n)} \rangle = 0 \quad \text{für} \quad n \ge 1 \;.$$
 (6.5)

Für die Schrödingergleichung ergibt sich nach Einsetzen der Taylorentwicklungen (6.3) und (6.4):

$$(\mathrm{H}_{0} + \lambda \mathrm{W})(|\Psi_{i}^{(0)}\rangle + \lambda |\Psi_{i}^{(1)}\rangle + \lambda^{2} |\Psi_{i}^{(2)}\rangle + \dots) = (E_{i}^{(0)} + \lambda E_{i}^{(1)} + \lambda^{2} E_{i}^{(2)} + \dots)(|\Psi_{i}^{(0)}\rangle + \lambda |\Psi_{i}^{(1)}\rangle + \lambda^{2} |\Psi_{i}^{(2)}\rangle + \dots) .$$
(6.6)

Diese Gleichung kann nach Potenzen in λ sortiert werden:

$$\lambda^{0}: \quad \mathbf{H}_{0}|\Psi_{i}^{(0)}\rangle = E_{i}^{(0)}|\Psi_{i}^{(0)}\rangle \tag{6.7}$$

$$\lambda^{1}: \quad \mathbf{H}_{0}|\Psi_{i}^{(1)}\rangle + \mathbf{W}|\Psi_{i}^{(0)}\rangle = E_{i}^{(0)}|\Psi_{i}^{(1)}\rangle + E_{i}^{(1)}|\Psi_{i}^{(0)}\rangle$$
(6.8)

$$\lambda^{2}: \quad \mathbf{H}_{0}|\Psi_{i}^{(2)}\rangle + \mathbf{W}|\Psi_{i}^{(1)}\rangle = E_{i}^{(0)}|\Psi_{i}^{(2)}\rangle + E_{i}^{(1)}|\Psi_{i}^{(1)}\rangle + E_{i}^{(2)}|\Psi_{i}^{(0)}\rangle$$

$$\vdots \qquad (6.9)$$

6.2 · Vielteilchenstörungstheorie

Wenn diese Gleichungen mit $\langle \Psi_i^{(0)} |$ multipliziert werden, so ergeben sich unter Ausnutzung der Orthogonalität (6.5) die Energien der einzelnen Ordnungen [9]:

$$\lambda^{0}: \qquad E_{i}^{(0)} = \langle \Psi_{i}^{(0)} | \mathcal{H}_{0} | \Psi_{i}^{(0)} \rangle \tag{6.10}$$

$$\lambda^{1}: \quad E_{i}^{(1)} = \langle \Psi_{i}^{(0)} | \mathbf{W} | \Psi_{i}^{(0)} \rangle \tag{6.11}$$

$$\lambda^{2}: \qquad E_{i}^{(2)} = \langle \Psi_{i}^{(0)} | \mathbf{W} | \Psi_{i}^{(1)} \rangle$$
(6.12)

Die Energie der 1. Ordnung kann also direkt berechnet werden. Für die 2. Ordnung müssen die Zustände $|\Psi_i^{(1)}\rangle$ auf die ungestörten Zustände $|\Psi_i^{(0)}\rangle$ zurückgeführt werden. Dazu wird $|\Psi_i^{(1)}\rangle$ nach den ungestörten Zustände entwickelt [9]:

÷

$$|\Psi_i^{(1)}\rangle = \sum_n c_n^{(1)} |\Psi_n^{(0)}\rangle = \sum_{\substack{n \\ n \neq i}} |\Psi_n^{(0)}\rangle \langle \Psi_n^{(0)} |\Psi_i^{(1)}\rangle .$$
(6.13)

Wird Gleichung (6.8) mit $\langle \Psi_n^{(0)} |$ multipliziert, so läßt sich folgende Beziehung ableiten:

$$\langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_i^{(1)} \rangle = \frac{\langle \Psi_n^{(0)} | \mathbf{W} | \Psi_i^{(0)} \rangle}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} .$$
(6.14)

Zusammen mit Gleichung (6.12) und der Entwicklung (6.13) ergibt sich daraus die Energiekorrektur der 2. Ordnung der Störungstheorie [9]:

$$E_i^{(2)} = \sum_{\substack{n \\ n \neq i}} \frac{|\langle \Psi_i^{(0)} | \mathbf{W} | \Psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} .$$
(6.15)

Analog lassen sich die Terme der dritten und aller höheren Ordnungen bestimmen.

6.2 Vielteilchenstörungstheorie

Mit Hilfe der Vielteilchenstörungstheorie sollen die Grundzustandsenergien, die sich aus den Hartree-Fock-Rechnungen ergeben (siehe Kapitel 3), verbessert werden. Der Hartree-Fock-Zustand dient also als Ausgangspunkt für die Störungsrechnung. Bei der Hartree-Fock-Methode wurde der intrinsische Hamiltonoperator

$$H_{int} = H_{int}^{(2)} + V^{(3)} = T_{int} + V_{UCOM} + V^{(3)} , \qquad (6.16)$$

verwendet, der aus dem Zweiteilchenoperator ${\rm H}_{\rm int}^{(2)}$ und der Dreiteilchenwechselwirkung ${\rm V}^{(3)}$ aufgebaut ist. Stellt man ${\rm H}_{\rm int}$ in der Hartree-Fock-Basis dar, so gehen in die

Kapitel 6 · Vielteilchenstörungstheorie

Berechnung der Hartree-Fock-Energie nur die Diagonalelemente des Hamiltonoperators ein (siehe Kapitel 3). Daher ist es sinnvoll, den Hamiltonoperator H_0 folgendermaßen darzustellen:

$$H_{0} = \frac{1}{2} \sum_{\nu_{1}\nu_{2}} {}_{a} \langle \nu_{1}\nu_{2} | \mathcal{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \nu_{1}\nu_{2} \rangle_{a} a_{\nu_{1}}^{\dagger} a_{\nu_{2}}^{\dagger} a_{\nu_{2}} a_{\nu_{1}} + \frac{1}{6} \sum_{\nu_{1}\nu_{2}\nu_{3}} {}_{a} \langle \nu_{1}\nu_{2}\nu_{3} | \mathcal{V}^{(3)} | \nu_{1}\nu_{2}\nu_{3} \rangle_{a} a_{\nu_{1}}^{\dagger} a_{\nu_{2}}^{\dagger} a_{\nu_{3}}^{\dagger} a_{\nu_{3}} a_{\nu_{2}} a_{\nu_{1}} .$$
(6.17)

In die Störung gehen ausschließlich die außerdiagonalen Matrixelemente des Hamiltonoperators ein [20]:

$$W = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\nu_1\nu_2\\\kappa_1\kappa_2}} {}_a \langle \nu_1\nu_2 | \mathcal{H}_{int}^{(2)} | \kappa_1\kappa_2 \rangle_a a_{\nu_1}^{\dagger} a_{\nu_2}^{\dagger} a_{\kappa_2} a_{\kappa_1} + \frac{1}{36} \sum_{\substack{\nu_1\nu_2\nu_3\\\kappa_1\kappa_2\kappa_3}} {}_a \langle \nu_1\nu_2\nu_3 | \mathcal{V}^{(3)} | \kappa_1\kappa_2\kappa_3 \rangle_a a_{\nu_1}^{\dagger} a_{\nu_2}^{\dagger} a_{\nu_3}^{\dagger} a_{\kappa_3} a_{\kappa_2} a_{\kappa_1} , \quad (6.18)$$

wobei sich die Slaterdeterminanten $|\nu_1\nu_2\rangle_a$ und $|\kappa_1\kappa_2\rangle_a$ beziehungsweise $|\nu_1\nu_2\nu_3\rangle_a$ und $|\kappa_1\kappa_2\kappa_3\rangle_a$ in wenigstens einem Einteilchenzustand unterscheiden müssen.

Die nullte Ordnung der Grundzustandsenergie ist gleich der Hartree-Fock-Energie: $E_0^{(0)} = E_{\text{HF}}$ und die erste Ordnung verschwindet: $E_0^{(1)} = 0$. Daher ergibt sich die erste Korrektur der Grundzustandsenergie aus der zweiten Ordnung der Vielteilchenstörungstheorie. Die allgemeine Form dieser Ordnung lautet (Gleichung (6.15)):

$$E_0^{(2)} = \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \frac{|\langle \Psi_0^{(0)} | \mathbf{W} | \Psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} .$$
(6.19)

Der ungestörte Zustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ ist der Hartree-Fock-Zustand und die Zustände $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ stellen Anregungszustände dar. Sie werden durch Teilchen-Loch-Anregungen des Hartree-Fock-Zustands repräsentiert.

Einteilchen-Einloch-Anregungen treten hier nicht auf, da der Hamiltonoperator den Hartree-Fock-Zustand nicht mit dieser Art von Anregungen verbindet [9]:

$$\langle \mathsf{HF}|\mathcal{H}_{\mathsf{int}}|\mathsf{HF}_{\alpha}^{\beta}\rangle = 0$$
 . (6.20)

Dabei bezeichnet $|HF_{\alpha}^{\beta}\rangle$ den Hartree-Fock-Zustand, bei dem ein Teilchen aus dem Zustand $|\alpha\rangle$ entfernt wurde und ein Teilchen im Zustand $|\beta\rangle$ hinzugefügt wurde.

Im folgenden werden zunächst getrennt die Störungsbeiträge für den Zweiteilchenanteil $\mathrm{H}_{\mathsf{int}}^{(2)}$ des Hamiltonoperators und die Dreiteilchenwechselwirkung $\mathrm{V}^{(3)}$ bestimmt.

6.2 · Vielteilchenstörungstheorie

Störungsbeitrag des Zweiteilchenoperators $H_{int}^{(2)}$

Dreiteilchen-Dreiloch-Anregungen liefern hier keine Beiträge, da es sich bei $H^{(2)}_{int}$ um einen Zweiteilchenoperator handelt [9]. Es müssen also nur Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen der Form $|\mathsf{HF}^{\beta\beta'}_{\alpha\alpha'}\rangle$ betrachtet werden. Daher lautet die zweite Ordnung der Störungstheorie

$$E_0^{(2)}(\mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)}) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'}^{<\varepsilon_F} \sum_{\beta\beta'}^{>\varepsilon_F} \frac{|\langle \mathsf{HF}|\mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)}|\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}\rangle|^2}{E_{\mathsf{HF}} - E_{\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}}} .$$
(6.21)

Dabei wird über alle Löcher α, α' unterhalb der Fermikante ε_F und über alle Teilchen β, β' oberhalb der Fermikante summiert. Der Energienenner kann durch die Einteilchenenergien der Teilchen und Löcher angenähert werden [9]:

$$E_{\mathsf{HF}} - E_{\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'}}^{\beta\beta'} \approx \varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\beta'} .$$
(6.22)

Die Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen werden durch Anwendung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf den Hartree-Fock-Zustand generiert:

$$|\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}\rangle = a_{\beta}^{\dagger}a_{\beta'}^{\dagger}a_{\alpha'}a_{\alpha}|\mathsf{HF}\rangle .$$
(6.23)

Der Zweiteilchenoperator lautet in zweiter Quantisierung [7, 8]:

$$\mathbf{H}_{\text{int}}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\nu_1 \nu_2 \\ \kappa_1 \kappa_2}}^{\infty} {}_a \langle \nu_1 \nu_2 | \mathbf{H}_{\text{int}}^{(2)} | \kappa_1 \kappa_2 \rangle_a \; \mathbf{a}_{\nu_1}^{\dagger} \mathbf{a}_{\nu_2}^{\dagger} \mathbf{a}_{\kappa_2} \mathbf{a}_{\kappa_1} \; . \tag{6.24}$$

Damit läßt sich die Energiekorrektur folgendermaßen schreiben:

$$E_{0}^{(2)}(\mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)}) = \frac{1}{64} \sum_{\alpha\alpha'}^{<\varepsilon_{F}} \sum_{\beta\beta'}^{>\varepsilon_{F}} \sum_{\nu_{1}\nu_{2}\atop\kappa_{1}\kappa_{2}}^{\infty} \frac{|_{a}\langle\nu_{1}\nu_{2}|\mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)}|\kappa_{1}\kappa_{2}\rangle_{a} \ \langle\mathsf{HF}|\mathbf{a}_{\nu_{1}}^{\dagger}\mathbf{a}_{\nu_{2}}^{\dagger}\mathbf{a}_{\kappa_{2}}\mathbf{a}_{\kappa_{1}}\mathbf{a}_{\beta}^{\dagger}\mathbf{a}_{\beta'}^{\dagger}\mathbf{a}_{\alpha'}\mathbf{a}_{\alpha}|\mathsf{HF}\rangle|^{2}}{\varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\beta'}} .$$

$$(6.25)$$

Da es sich bei den Hartree-Fock-Zuständen um Slaterdeterminanten handelt, kann der Zähler vereinfacht werden:

$$\sum_{\substack{\nu_{1}\nu_{2}\\\kappa_{1}\kappa_{2}}}^{\infty} a \langle \nu_{1}\nu_{2} | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \kappa_{1}\kappa_{2} \rangle_{a} \langle \mathsf{HF} | \mathbf{a}_{\nu_{1}}^{\dagger} \mathbf{a}_{\nu_{2}}^{\dagger} \mathbf{a}_{\kappa_{2}} \mathbf{a}_{\kappa_{1}} \mathbf{a}_{\beta}^{\dagger} \mathbf{a}_{\beta'}^{\dagger} \mathbf{a}_{\alpha'} \mathbf{a}_{\alpha} | \mathsf{HF} \rangle$$

$$= \sum_{\substack{\nu_{1}\nu_{2}\\\kappa_{1}\kappa_{2}}}^{\infty} a \langle \nu_{1}\nu_{2} | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \kappa_{1}\kappa_{2} \rangle_{a} \{ \delta_{\nu_{1}\alpha} \delta_{\nu_{2}\alpha'} \delta_{\kappa_{2}\beta'} \delta_{\kappa_{1}\beta} - \delta_{\nu_{1}\alpha'} \delta_{\nu_{2}\alpha} \delta_{\kappa_{2}\beta'} \delta_{\kappa_{1}\beta}$$

$$= -\delta_{\nu_{1}\alpha} \delta_{\nu_{2}\alpha'} \delta_{\kappa_{2}\beta} \delta_{\kappa_{1}\beta'} + \delta_{\nu_{1}\alpha'} \delta_{\nu_{2}\alpha} \delta_{\kappa_{2}\beta} \delta_{\kappa_{1}\beta'} \}$$

$$= a \langle \alpha \alpha' | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \beta \beta' \rangle_{a} - a \langle \alpha' \alpha | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \beta' \beta \rangle_{a}$$

$$- a \langle \alpha \alpha' | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \beta' \beta \rangle_{a} + a \langle \alpha' \alpha | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \beta' \beta \rangle_{a} \qquad (6.26)$$

83

Kapitel 6 · Vielteilchenstörungstheorie

Das bedeutet, daß im Bra und im Ket der Slaterdeterminante jeweils die gleichen Zustände vernichtet beziehungsweise erzeugt werden müssen, damit das Matrixelement von Null verschieden ist. Damit vereinfacht sich die Energiekorrektur der 2. Ordnung zu [20]

$$E_0^{(2)}(\mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)}) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'}^{<\varepsilon_F} \sum_{\beta\beta'}^{>\varepsilon_F} \frac{|_a \langle \alpha\alpha' | \mathbf{H}_{\mathsf{int}}^{(2)} | \beta\beta' \rangle_a |^2}{\varepsilon_\alpha + \varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_\beta - \varepsilon_{\beta'}} .$$
(6.27)

Störungsbeitrag der Dreiteilchenwechselwirkung V⁽³⁾

Für den Störungsbeitrag der Dreiteilchenwechselwirkung müssen sowohl Zweiteilchen-Zweiloch- als auch Dreiteilchen-Dreiloch-Anregungen betrachtet werden. Die Energiekorrektur der 2. Ordnung lautet

$$E_{0}^{(2)}(\mathbf{V}^{(3)}) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'}^{<\varepsilon_{F}} \sum_{\beta\beta'}^{>\varepsilon_{F}} \frac{|\langle \mathsf{HF}|\mathbf{V}^{(3)}|\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'}^{\beta\beta'}\rangle|^{2}}{E_{\mathsf{HF}} - E_{\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'}}} + \frac{1}{36} \sum_{\alpha\alpha'\alpha''}^{<\varepsilon_{F}} \sum_{\beta\beta'\beta''}^{>\varepsilon_{F}} \frac{|\langle \mathsf{HF}|\mathbf{V}^{(3)}|\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'\alpha''}^{\beta\beta'\beta''}\rangle|^{2}}{E_{\mathsf{HF}} - E_{\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'\alpha''}}}, \qquad (6.28)$$

wobei wieder über die Löcher $\alpha, \alpha', \alpha''$ und über die Teilchen β, β', β'' summiert wird. Die Dreiteilchen-Dreiloch-Anregungen lassen sich durch

$$|\mathsf{HF}_{\alpha\alpha'\alpha''}^{\beta\beta'\beta''}\rangle = \mathbf{a}_{\beta}^{\dagger}\mathbf{a}_{\beta'}^{\dagger}\mathbf{a}_{\beta''}^{\dagger}\mathbf{a}_{\alpha''}\mathbf{a}_{\alpha'}\mathbf{a}_{\alpha}|\mathsf{HF}\rangle$$
(6.29)

darstellen und die Dreiteilchenwechselwirkung lautet

$$V^{(3)} = \frac{1}{36} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \atop \kappa_1 \kappa_2 \kappa_3}^{\infty} {}_a \langle \nu_1 \nu_2 \nu_3 | V^{(3)} | \kappa_1 \kappa_2 \kappa_3 \rangle_a \; a_{\nu_1}^{\dagger} a_{\nu_2}^{\dagger} a_{\nu_3}^{\dagger} a_{\kappa_3} a_{\kappa_2} a_{\kappa_1} \; . \tag{6.30}$$

Damit läßt sich die Energiekorrektur analog zum Fall des Zweiteilchenoperators umformen. Dies liefert als Ergebnis

$$E_{0}^{(2)}(\mathbf{V}^{(3)}) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'}^{<\varepsilon_{F}} \sum_{\beta\beta'}^{>\varepsilon_{F}} \frac{\left|\sum_{\nu}^{<\varepsilon_{F}} a \langle \alpha\alpha'\nu | \mathbf{V}^{(3)} | \beta\beta'\nu \rangle_{a}\right|^{2}}{\varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\beta'}} + \frac{1}{36} \sum_{\alpha\alpha'\alpha''}^{<\varepsilon_{F}} \sum_{\beta\beta'\beta''}^{>\varepsilon_{F}} \frac{|a \langle \alpha\alpha'\alpha'' | \mathbf{V}^{(3)} | \beta\beta'\beta'' \rangle_{a}|^{2}}{\varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha'} + \varepsilon_{\alpha''} - \varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\beta'} - \varepsilon_{\beta''}}.$$
(6.31)

84

Bei den Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen bleibt eine der ν -Summationen aus der Darstellung (6.30) des Dreiteilchenoperators erhalten. Bei der Herleitung zeigt sich, daß diese Summe nur über besetzte Zustände läuft, denn der Zustand $|\nu\rangle$ wird in der Slaterdeterminante vernichtet.

Um nun die gesamte 2. Ordnung der Vielteilchenstörungstheorie für den Hamiltonoperator H_{int} zu bestimmen, werden die Energiekorrekturen des Zweiteilchenhamiltonoperators (6.27) und der Dreiteilchenwechselwirkung (6.31) kombiniert. Als Resultat ergibt sich

$$E_{0}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'}^{<\varepsilon_{F}} \sum_{\beta\beta'}^{>\varepsilon_{F}} \frac{\left| a \langle \alpha\alpha' | \mathcal{H}_{int}^{(2)} | \beta\beta' \rangle_{a} + \sum_{\nu}^{<\varepsilon_{F}} a \langle \alpha\alpha'\nu | \mathcal{V}^{(3)} | \beta\beta'\nu \rangle_{a} \right|^{2}}{\varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\beta'}} + \frac{1}{36} \sum_{\alpha\alpha'\alpha''}^{<\varepsilon_{F}} \sum_{\beta\beta'\beta''}^{>\varepsilon_{F}} \frac{\left| a \langle \alpha\alpha'\alpha'' | \mathcal{V}^{(3)} | \beta\beta'\beta'' \rangle_{a} \right|^{2}}{\varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha'} + \varepsilon_{\alpha''} - \varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\beta'} - \varepsilon_{\beta''}}$$

$$(6.32)$$

6.3 Ergebnisse der Vielteilchenstörungstheorie

In diesem Abschnitt werden einige Ergebnisse der Vielteilchenstörungstheorie vorgestellt. Als erstes werden in Abbildung 6.1 die Bindungsenergien pro Nukleon gezeigt, die sich aus einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung ergeben. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder und die Punkte zeigen die Resultate der Hartree-Fock-Rechnungen. Dabei wurde das Tensorkorrelationsvolumen auf den optimalen Wert von $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$ gesetzt. Die Hartree-Fock-Energien zeigen die bereits diskutierte Abweichung von den experimentellen Werten (siehe Kapitel 3.4). Wird jedoch die 2. Ordnung der Energiekorrektur der Vielteilchenstörungstheorie hinzugenommen (Quadrate), so werden die experimentellen Bindungsenergien über den ganzen Bereich von ⁴He bis ²⁰⁸Pb sehr gut beschrieben. Für einige leichte Kerne wurde zusätzlich die 3. Ordnung der Störungstheorie berechnet (Rauten) [20], hier zeigt sich allerdings nur eine minimale Verbesserung der Grundzustandsenergien.

Mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung wurde außerdem die 2. Ordnung der Vielteilchenstörungstheorie für die Ladungsradien berechnet [20]. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.2 dargestellt. Die schwarzen Balken geben wiederum die experimentellen Werte an und die Punkte zeigen die Resultate der Hartree-Fock-Rechnungen. Wie bereits in Kapitel 3.4 erwähnt, liefert die Vielteilchenstörungstheorie nur eine leichte

Kapitel 6 · Vielteilchenstörungstheorie



Abbildung 6.1: Energiekorrekturen der Vielteilchenstörungstheorie für die reine Zweiteilchenwechselwirkung. (●): Hartree-Fock-Energien, (■): Hartree-Fock + 2. Ordnung der Störungstheorie (♦): Hartree-Fock + 2. und 3. Ordnung der Störungstheorie. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder (aus [20]).



Abbildung 6.2: Beiträge der Vielteilchenstörungstheorie für die Ladungsradien. (•): Hartree-Fock-Ergebnisse, (•): Hartree-Fock + 2. Ordnung der Störungstheorie. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder (aus [20]).

Verbesserung der Ladungsradien (Quadrate). Besonders die Radien der schweren Kerne weichen deutlich vom Experiment ab. Daraus folgt, daß die Zweiteilchenwechselwirkung zur korrekten Beschreibung der Ladungsradien nicht ausreicht.

Im folgenden werden daher einige Ergebnisse diskutiert, die sich unter Einbeziehung der Dreiteilchenwechselwirkung ergeben. Dabei wird der Einfluß der Vielteilchenstörungstheorie nur am Beispiel der Bindungsenergien pro Nukleon untersucht. Als erstes werden in Abbildung 6.3 die Resultate der Hartree-Fock-Rechnungen mit dem in Kapitel 4.2 bestimmten, optimalen Parametersatz (Quadrate) gezeigt: Der Reichweitenparameter des Tensorkorrelators beträgt im S = 1, T = 0 Kanal $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,\mathrm{fm}^3$



Abbildung 6.3: Energien der Vielteilchenstörungstheorie. (•): Hartree-Fock-Energie, (•): Hartree-Fock + Zweiteilchenbeitrag der Störungstheorie. Zur Berechnung wurde der optimale Parametersatz verwendet: $a_{\rm HO}$ optimal, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \,{\rm fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,{\rm fm}^3$, $C_3 = 2500 \,{\rm MeV} \,{\rm fm}^6$, $e_{\rm max} = 10$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \,{\rm fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28].

und im $S\,=\,1,T\,=\,1$ Kanal $I_{\vartheta}^{(11)}\,=\,0.10\,{\rm fm^3}.$ Die Dreiteilchenwechselwirkung hat eine Stärke von $C_3 = 2500 \,\mathrm{MeV \, fm}^6$. Die Punkte geben als Referenz die Ergebnisse der Hartree-Fock-Rechnungen ohne Dreiteilchenwechselwirkung an. In diesem Beispiel wurde die Störungstheorie nur auf den Zweiteilchenanteil des Hamiltonoperators angewendet. Das heißt, es wurde nur die Korrektur $E_0^{(2)}(\mathrm{H}_{\mathrm{int}}^{(2)})$ aus Gleichung (6.27) berechnet (Rauten). Die korrigierten Bindungsenergien pro Nukleon liegen zwar dichter an den experimentellen Werten, aber es fällt auf, daß sie im Gegensatz zu den Ergebnissen ohne Dreiteilchenwechselwirkung (Abbildung 6.1) immernoch eine deutliche Abweichung aufweisen. Das läßt sich folgendermaßen erklären: Zum einen sind die Abweichungen der Hartree-Fock-Energien bereits etwas größer, da die abstoßende Dreiteilchenwechselwirkung den mittleren Abstand zwischen den Nukleonen vergrößert. Das hat zur Folge, daß die Bindungsenergien der Kerne verringert werden. Und zum anderen liefert die Störungstheorie eine kleinere Energiekorrektur, denn für die Rechnungen mit Dreiteilchenwechselwirkung wurde eine größere Tensorkorrelatorreichweite verwendet. Das bedeutet, daß bereits durch die Methode der unitären Korrelatoren längerreichweitige Korrelationen miteinbezogen wurden. Daher bleiben weniger Anteile der langreichweitigen Korrelationen, die im Rahmen der Vielteilchenstörungstheorie beschrieben werden.

Die Bestimmung der Störungsbeiträge für die Dreiteilchenwechselwirkung ist sehr



Abbildung 6.4: Energien der Vielteilchenstörungstheorie für die Basisgrößen $e_{\max} = 4$ (oben) und $e_{\max} = 6$ (unten). (•): Hartree-Fock-Energie, (•): Hartree-Fock + Zweiteilchenbeitrag der Störungstheorie, (•): Hartree-Fock + Zweiteilchenbeitrag + Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen des Dreiteilchenbeitrages, (•): Hartree-Fock + gesamte Vielteilchenstörungstheorie. Zur Berechnung wurde der optimale Parametersatz verwendet: a_{HO} optimal, $I_{\vartheta}^{(11)} =$ 0.10 fm^3 , $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28].

rechenaufwendig. Daher werden nur die Kerne bis ⁹⁰Zr betrachtet. In den Abbildungen 6.4 und 6.5 sind die Energiekorrekturen für verschiedene Basisgrößen dargestellt. Die Basisgrößen reichen von $e_{max} = 4$ und 6 in Abbildung 6.4 bis $e_{max} = 8$ und 10 in Abbildung 6.5. Bei der größten Basis konnten aus rechentechnischen Gründen nur die Kerne bis ⁵⁶Ni berechnet werden. Analog zu Abbildung 6.3 zeigen die Punk-



Abbildung 6.5: Energien der Vielteilchenstörungstheorie für die Basisgrößen $e_{\max} = 8$ (oben) und $e_{\max} = 10$ (unten). (•): Hartree-Fock-Energie, (•): Hartree-Fock + Zweiteilchenbeitrag der Störungstheorie, (•): Hartree-Fock + Zweiteilchenbeitrag + Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen des Dreiteilchenbeitrages, (•): Hartree-Fock + gesamte Vielteilchenstörungstheorie. Zur Berechnung wurde der optimale Parametersatz verwendet: a_{HO} optimal, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \text{ fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \text{ fm}^3$, $C_3 = 2500 \text{ MeV fm}^6$. Die blaue Kurve (•) zeigt als Referenz die Resultate einer Rechnung ohne Dreiteilchenwechselwirkung mit $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.09 \text{ fm}^3$. Die schwarzen Balken geben die experimentellen Werte wieder [28].

te die Hartree-Fock-Energien ohne Dreiteilchenwechselwirkung und die Quadrate die Hartree-Fock-Energien mit Dreiteilchenwechselwirkung, die als Ausgangspunkt für die Vielteilchenstörungstheorie verwendet werden. Dabei wurde wiederum der optimale Parametersatz verwendet.

Die Beiträge, die sich aus der 2. Ordnung der Vielteilchenstörungstheorie ergeben,



Abbildung 6.6: Energien der Vielteilchenstörungstheorie in Abhängigkeit von der Basisgröße. (•): Hartree-Fock-Energie, (•): Hartree-Fock + Zweiteilchenbeitrag der Störungstheorie, (•): Hartree-Fock + Zweiteilchenbeitrag + Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen des Dreiteilchenbeitrages, (•): Hartree-Fock + gesamte Vielteilchenstörungstheorie. Zur Berechnung wurde der optimale Parametersatz verwendet: $a_{\rm HO}$ optimal, $I_{\vartheta}^{(11)} = 0.10 \,{\rm fm}^3$, $I_{\vartheta}^{(10)} = 0.20 \,{\rm fm}^3$, $C_3 = 2500 \,{\rm MeV} \,{\rm fm}^6$.

sind getrennt dargestellt: Die Rauten zeigen die Korrekturen $E_0^{(2)}(\mathrm{H}_{\mathrm{int}}^{(2)})$ des Zweiteilchenanteils des Hamiltonoperators (Gleichung (6.27)), die Dreiecke beinhalten zusätzlich die Beiträge der Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen der Dreiteilchenwechselwirkung. Sie zeigen also den ersten Term aus Gleichung (6.32). Die Kreuze geben schließlich die gesamte Energiekorrektur $E_0^{(2)}$ wieder. Aus den Differenzen zwischen den Rauten und den Dreiecken beziehungsweise den Dreiecken und den Kreuzen können also die Beiträge abgelesen werden, die sich aus den Zweiteilchen-Zweiloch- beziehungsweise Dreiteilchen-Dreiloch-Anregungen der Dreiteilchenwechselwirkung ergeben. Besonders in Abbildung 6.5 ist zu erkennen, daß die Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen für die meisten Kerne einen deutlich größeren Beitrag liefern als die Dreiteilchen-Dreiloch-Anregungen.

Insgesamt sind die Beiträge für die einzelnen Kerne sehr unterschiedlich und lassen keine Systematik erkennen. Aus den Abbildungen 6.4 und 6.5 wird ersichtlich, daß mit zunehmender Basisgröße auch die Störungsbeiträge größer werden. Um dies zu verdeutlichen, sind in Abbildung 6.6 die oben diskutierten Beiträge der Vielteilchenstörungstheorie für einige Kerne in Abhängigkeit von der Basisgröße dargestellt. Es wird ersichtlich, daß die Hartree-Fock-Energien (Punkte) konvergiert sind. Die Dreiteilchenbeiträge der Störungstheorie (Dreiecke) zeigen dagegen keine Anzeichen von Konvergenz. Der Grund dafür liegt in der Wahl der Dreiteilchenwechselwirkung. Die hier verwendete Wechselwirkung wird durch zwei Diracsche Deltadistributionen beschrieben (siehe Kapitel 4):

$$V_3 = C_3 \,\,\delta^{(3)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \,\,\delta^{(3)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3) \,\,. \tag{6.33}$$

Solche Kontaktkräfte sind allgemein für die Störungstheorie und auch für andere Vielteilchenmethoden, die über einfache Mean-Field-Beschreibungen hinausgehen, ungeeignet. Eine Deltakraft hat die Reichweite Null. Daher wird die gesamte Stärke der Wechselwirkung in einem einzigen Punkt konzentriert.

Die Slaterdeterminanten, die bei der Hartree-Fock-Methode verwendet werden, sind nicht flexibel genug, um vollständig auf diese starke und sehr kurzreichweitige Absto-Bung zu reagieren. Aus dem gleichen Grund sind sie nicht dazu geeignet, die Korrelationen, die durch die nukleare Wechselwirkung erzeugt werden, zu beschreiben. Daher liefern die Hartree-Fock-Rechnungen auch in Zusammenhang mit einer Kontaktwechselwirkung sinnvolle Ergebnisse. Bei der Vielteilchenstörungstheorie ändert sich dieses Verhalten. Die hier verwendeten Zustände, Teilchen-Loch-Anregungen des Hartree-Fock-Zustandes, reagieren stärker auf die starke Abstoßung der Dreiteilchenwechselwirkung. Die beliebig kurze Reichweite hat zur Folge, daß mit zunehmender Basisgröße auch die Beiträge zu den Energiekorrekturen weiter steigen und nicht konvergieren.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Probleme einer Kontaktwechselwirkung zu umgehen. Zum einen kann die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung für jede Basisgröße getrennt festgelegt werden. Oder es kann eine Regularisierung der Dreiteilchenwechselwirkung eingeführt werden. Zum anderen kann aber auch ein anderer Ansatz mit endlicher Reichweite gewählt werden, der zu einer realistischeren Darstellung der Dreiteilchenwechselwirkung führt. Diese drei Möglichkeiten werden in Kapitel 7 genauer diskutiert. Kapitel 6 · Vielteilchenstörungstheorie

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Kernstrukturuntersuchungen mit einer Dreiteilchenwechselwirkung durchgeführt. Als Ausgangspunkt wurde dabei die Methode der unitären Korrelatoren verwendet, um die kurzreichweitigen Zentral- und Tensorkorrelationen, die durch die nukleare Wechselwirkung hervorgerufen werden, explizit zu behandeln. Mit Hilfe dieser Methode wurde aus dem realistischen Argonne v_{18} Potential eine korrelierte Wechselwirkung konstruiert. Auf der Grundlage dieser korrelierten Wechselwirkung können Berechnungen im Rahmen der Hartree-Fock-Methode durchgeführt werden. Zunächst wurden einige Ergebnisse diskutiert, die sich aus Rechnungen mit der reinen Zweiteilchenwechselwirkung ergeben. Dabei wurde deutlich, daß sowohl die Bindungsenergien als auch die Ladungsradien der betrachteten Kerne systematisch kleiner sind als die experimentellen Daten. Darüber hinaus zeigt sich, daß die Einteilchenspektren zwar die Reihenfolge der Niveaus richtig wiedergeben, aber insgesamt zu stark gestreckt sind. Die fehlenden Beiträge zu den Bindungsenergien und den Ladungsradien können einerseits aus langreichweitigen Korrelationen resultieren, die auf der Ebene der Hartree-Fock-Rechnungen nicht beschrieben werden. Andererseits wurden sowohl die Dreiteilchenbeiträge der Clusterentwicklung als auch die genuine Dreiteilchenwechselwirkung vernachlässigt. Die Untersuchungen im Rahmen der Vielteilchenstörungstheorie, die die langreichweitigen Korrelationen miteinbezieht, deuten daraufhin, daß zur besseren Beschreibung der Ladungsradien eine abstoßende Dreiteilchenwechselwirkung notwendig ist.

Als ersten Ansatz für eine Dreiteilchenwechselwirkung wurde eine Kontaktkraft gewählt. Diese hat den Vorteil, daß ihre Matrixelemente zwischen den Eigenzuständen des harmonischen Oszillators weitgehend analytisch ausgewertet werden können. Auf

Kapitel 7 · Zusammenfassung und Ausblick

der Grundlage der Hartree-Fock-Rechnungen wurde die optimale Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung bestimmt. Dazu wurden jeweils die Bindungsenergien und die Ladungsradien einiger Kerne mit dem Experiment verglichen. Dabei zeigt sich, daß die Reichweite des Tensorkorrelators vergrößert werden muß, um den Verlust an Bindungsenergie, der durch die zusätzliche Abstoßung entsteht, zu kompensieren.

Nachdem mit der Hartree-Fock-Methode die Grundzustandseigenschaften einiger Kerne untersucht wurden, wurden als weitere Observablen kollektive Anregungen betrachtet. Diese können mit Hilfe der Random Phase Approximation beschrieben werden, die auf den Hartree-Fock-Ergebnissen aufbaut. Dazu wird aus der Dreiteilchenwechselwirkung eine effektive Zweiteilchenwechselwirkung konstruiert, indem die Matrixelemente mit der Einteilchendichtematrix gefaltet werden. Die isovektorielle Dipolriesenresonanz und die isoskalare Quadrupolriesenresonanz werden nach Hinzunahme der Dreiteilchenwechselwirkung deutlich besser wiedergegeben. Bei der isoskalaren Monopolriesenresonanz zeigt sich dagegen bei einigen Kernen eine starke Fragmentierung der Übergangsstärkeverteilung. Dies kann als mögliches Anzeichen für die Grenzen der Kontaktwechselwirkung interpretiert werden.

Schließlich wurde noch die Vielteilchenstörungstheorie für die Anwendung auf eine Dreiteilchenwechselwirkung erweitert. Bei den Berechnungen mit der Vielteilchenstörungstheorie werden die Probleme deutlich, die aufgrund der Verwendung einer Kontaktwechselwirkung auftreten. Eine Kontaktwechselwirkung ist allgemein für Vielteilchenmethoden, die über einfache Mean-Field-Beschreibungen hinausgehen, ungeeignet. Bei der Vielteilchenstörungstheorie äußert sich dies durch sehr unterschiedlich große Korrekturen zu den Bindungsenergien für die unterschiedlichen Kerne, die mit zunehmender Basisgröße immer weiter anwachsen ohne zu konvergieren.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, um diese Probleme der Kontaktwechselwirkung zu umgehen. Ein Weg besteht darin, die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung für jede verwendete Basisgröße getrennt zu bestimmen. Hier bleibt allerdings noch zu untersuchen, ob sich durch ein solches Verfahren die Ergebnisse sinnvoll verbessern. Eine andere Möglichkeit ist, eine Regularisierung der Kontaktwechselwirkung einzuführen. Dabei wäre es möglich, die Regularisierung so zu wählen, daß die Hartree-Fock-Rechnungen mit der reinen Kontaktkraft durchgeführt werden können und die Regularisierung erst bei weiterführenden Rechnungen in Kraft tritt. Durch eine Regularisierung wird einerseits ein weiterer willkürlicher Parameter eingeführt, der sinnvoll festgelegt werden muß, und andererseits wird die Berechnung der Matrixelemente der regularisierten Dreiteilchenwechselwirkung aufwendiger. Eine dritte Möglichkeit besteht darin, einen anderen, realistischeren Ansatz für die Dreiteilchenwechselwirkung zu wählen. Anstelle der Kontaktkraft kann eine Wechselwirkung mit endlicher Reichweite verwendet werden, die zum Beispiel durch eine Gaußfunktion beschrieben wird. Dabei tritt ebenfalls das Problem auf, daß mehrere Parameter, wie zum Beispiel die Breite der Gaußfunktion, festgelegt werden müssen. Darüber hinaus wird die Berechnung der Matrixelemente komplizierter. Andererseits hat diese Variante den Vorteil, daß sie konsistent für alle Anwendungen eingesetzt werden kann.

Insgesamt läßt sich zusammenfassen, daß bereits mit der einfachen Dreiteilchenkontaktwechselwirkung gute und vielversprechende Resultate erzielt wurden. Aber es gibt auch noch viele Ansatzmöglichkeiten für weitere Verbesserungen und physikalischere Darstellungen der Dreiteilchenwechselwirkung. Kapitel 7 · Zusammenfassung und Ausblick

Literaturverzeichnis

- R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, and R. Schiavilla. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking. Phys. Rev. C 51, 38 (1995).
- [2] R. Roth. Die Methode der unitären Korrelatoren und ihre Anwendung auf kurzreichweitig abstoßende Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen, diploma thesis, TH Darmstadt, 1997.
- [3] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, and J. Schnack. A unitary correlation operator method. Nucl. Phys. A 632, 61 (1998).
- [4] T. Neff. Short-Ranged Central and Tensor Correlations in Nuclear Many-Body Systems, PhD thesis, TU Darmstadt, 2002.
- [5] T. Neff and H. Feldmeier. Tensor correlations in the unitary correlation operator method. Nucl. Phys. A 713, 311 (2003).
- [6] P. Ring and P. Schuck. *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer Verlag, 1st edition, 2000 (2nd printing).
- [7] R. Roth. Theoretische Kernphysik, Vorlesungsskript WS 2004/2005.
- [8] H. Feldmeier. Einführung in die Theoretische Kernphysik, Vorlesungsskript WS 2005/2006.
- [9] Attila Szabo and Neil S. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry*. Dover Publications, Inc., New York, 1996.
- [10] J. Chadwick. Possible existence of a neutron. Nature 129, 312 (1932).
- [11] W. Heisenberg. Über den Bau der Atomkerne. Zeitschrift für Physik 77, 1 (1932).
- [12] D. Iwanenko. The neutron hypothesis. Nature 129, 798 (1932).
- [13] Judah M. Eisenberg and Walter Greiner. Nuclear Structure, Vol.3: Microscopic Theory of the Nucleus. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [14] H. Yukawa. On the interaction of elementary particles. Proc. Phys. Math. Soc. Japan 17, 48 (1935).

- [15] R. Machleidt. The meson theory of nuclear forces and nuclear structure. Adv. Nucl. Phys. 19, 189 (1989).
- [16] R. B. Wiringa, R. A. Smith, and T. L. Ainsworth. Nucleon-nucleon potentials with and without $\Delta(1232)$ degrees of freedom. Phys. Rev. C **29**, 1207 (1984).
- [17] R. Roth, T. Neff, H. Hergert, and H. Feldmeier. Nuclear Structure based on Correlated Realistic Nucleon-Nulceon Potentials. Nucl. Phys. A 745, 3 (2004).
- [18] H. Hergert. Correlated NN-Interactions and Phenomenological Corrections for Nuclear Structure Calculations, diploma thesis, TU Darmstadt, 2004.
- [19] R. Roth, H. Hergert, P. Papakonstantinou, T. Neff, and H. Feldmeier. *Matrix elements and few-body calculations within the unitary correlation operator method*. Phys. Rev. C 72, 034002 (2005).
- [20] R. Roth, P. Papakonstantinou, N. Paar, H. Hergert, T. Neff, and H. Feldmeier. Hartree-Fock and Many-Body Perturbation Theory with Correlated Realistic NN-Interactions. Phys. Rev. C 73, 044312 (2006).
- [21] I. Talmi. Nuclear spectroscopy with harmonic-oscillator wave functions. Helv. Phys. Acta 25, 185 (1952).
- [22] M. Moshinsky. Transformation brackets for harmonic oscillator functions. Nucl. Phys. 13, 104 (1959).
- [23] Kris L. G. Heyde. The Nuclear Shell Model. Springer Verlag, Second Corrected and Enlarged Edition, 1994.
- [24] G. P. Kamuntavicius, R. K. Kalinauskas, B. R. Barret, S. Mickevicius, and D. Germanas. The general harmonic-oscillator brackets: compact expression, symmetries, sums and Fortran code. Nucl. Phys. A 695, 191 (2001).
- [25] B. Buck and A. C. Merchant. A simple expression for the general oscillator bracket. Nucl. Phys. A 600, 387 (1996).
- [26] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë. Quantenmechanik, Teil 1. Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, Berlin, 1999.
- [27] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii. Quantum Theory of Angular Momentum. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1988.
- [28] G. Audi and A. Wapstra. The 1995 update to the atomic mass evaluation. Nucl. Phys. A 595, 409 (1995).

- [29] H. d. Vries, C. W. d. Jager, and C. d. Vries. At. Data Nucl. Data Tables 36, 495 (1987).
- [30] V. I. Isakov, K. I. Erokhina, H. Mach, M. Sanchez-Vega, and B. Fogelberg. On the difference between the proton and neutron spin-orbit splittings in nuclei. Eur. Phys. J. A 14, 29 (2002).
- [31] P. Papakonstantinou, R. Roth, and N. Paar. Nuclear collective excitations using correlated realistic interactions: the role of explicit RPA correlations. arXiv: nucl-th/0609039 (2006).
- [32] C. Barbieri, N. Paar, R. Roth, and P. Papakonstantinou. Correlation energies in the random phase approximation using realistic interactions. arXiv: nucl-th/0608011 (2006).
- [33] N. Paar, P. Papakonstantinou, H. Hergert, and R. Roth. Collective multipole excitations based on correlated realistic nucleon-nucleon interactions. Phys. Rev. C 74, 014318 (2006).
- [34] M. K. Weigel and J. Winter. Self-consistent random-phase approximation for three-body forces. J. Phys. G: Nucl. Phys. 4, 1427 (1978).
- [35] Y.-W. Lui, H. L. Clark, and D. H. Youngblood. *Giant resonances in* ¹⁶O. Phys. Rev. C 64, 064308 (2001).
- [36] D. H. Youngblood, Y.-W. Lui, and H. L. Clark. Isoscalar E0, E1 and E2 strength in ⁴⁰Ca. Phys. Rev. C 63, 067301 (2001).
- [37] D. H. Youngblood, H. L. Clark, and Y.-W. Lui. Incompressibility of Nuclear Matter from the Giant Monopole Resonance. Phys. Rev. Lett. 82, 691 (1999).
- [38] S. F. LeBrun and A. M. Nathan amd S. D. Hoblit. *Photon scattering in the giant dipole resonance region of* ¹⁶O. Phys. Rev. C 35, 2005 (1987).
- [39] A. Veyssière, H. Beil, R. Bergère, P. Carlos, A. Leptrêtre, and A. De Miniac. A study of the photoneutron contribution to the giant dipole resonance in s-d shell nuclei. Nucl. Phys. A 227, 513 (1974).
- [40] B. L. Berman, J. T. Caldwell, R. R. Harvey, M. A. Kelly, R. L. Bramblett, and S. C. Fultz. *Photoneutron Cross Sections for* ⁹⁰Zr, ⁹¹Zr, ⁹²Zr, ⁹⁴Zr, and ⁸⁹Y. Phys. Rev. 162, 1098 (1967).
- [41] A. Veyssière, H. Beil, R. Bergère, P. Carlos, and A. Leptrêtre. *Photoneutron cross sections of ²⁰⁸Pb and ¹⁹⁷Au*. Nucl. Phys. A **159**, 561 (1970).
- [42] F. E. Bertrand, G. R. Satchler, D. J. Horen, and A. van der Woude. Systematics of the isoscalar giant monopole resonance from 60 MeV inelastic proton scattering. Phys. Lett. B 80, 198 (1979).
Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Professor Dr. Robert Roth bedanken für die Uberlassung dieses spannenden Themas und die freundliche Aufnahme in seine Arbeitsgruppe sowie die hervorragende Betreuung während der Anfertigung meiner Diplomarbeit.

Professor Dr. Hans Feldmeier danke ich dafür, daß er in mir das Interesse für die theoretische Kernphysik geweckt hat und für die Übernahme des Zweitgutachtens dieser Arbeit.

Darüber hinaus möchte ich mich natürlich bei allen Mitgliedern der Theorieabteilung des Instituts für Kernphysik für die freundliche Aufnahme und die angenehme und lockere Arbeitsatmosphäre bedanken. Besonderer Dank geht an dieser Stelle an Heiko Hergert für die Beantwortung meiner Fragen zu den verschiedensten Problemen und an Felix Schmitt für die Unterstützung bei Computerproblemen und das Korrekturlesen dieser Arbeit.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die Unterstützung im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 634.

Nicht zuletzt bedanke ich mich bei meinen Eltern Birge Steinhagen-Zapp und Hans-Christian Zapp für ihre Unterstützung vor und während meines Studiums sowie ihr anhaltendes Interesse an meiner Arbeit. Außerdem möchte ich an dieser Stelle meine beiden Schwestern Korinna und Irene, meine beiden Omas Luise Steinhagen und Ingeborg Zapp, meine Großtante Hanna Urbrock und meine Tante Angelika Weihermüller erwähnen, die mich alle nach ihren Möglichkeiten unterstützt haben.

Ganz besonderer Dank geht an Marc Günther für sein Verständnis, seine Geduld und seine steten Bemühungen, mich besonders in der Endphase zu motivieren und mir beim Lösen meiner Probleme zu helfen. Darüber hinaus danke ich ihm für das Korrekturlesen meiner Diplomarbeit.