# Moderne Kernstrukturtheorie: von der QCD zur Nuklidkarte



#### Robert Roth

Institut für Kernphysik Technische Universität Darmstadt

# Überblick

#### Motivation

- Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen
- exakte Lösung des Vielteilchenproblems

#### Moderne Effektive Wechselwirkungen

- Korrelationen
- Methode der unitären Korrelatoren (UCOM)

#### Anwendungen

- No-Core Schalenmodell
- Hartree-Fock & Random Phase Approximation
- Fermionische Molekulardynamik

#### Aktuelle Herausforderungen

RISING, AGATA, REX-ISOLDE,....

Kerne abseits der Stabilität

Nukleare Astrophysik Exotische Moden, Hyperkerne,...

**NuSTAR** 

**@ FAIR** 

zuverlässige Kernstrukturtheorie für exotische Kerne

Brückenschlag zwischen Niederenergie-QCD und Kernstrukturtheorie

# Von der QCD zur Nuklidkarte

# Quantenchromodynamik

# Kernstruktur



endliche Kerne

Wenig-Nukleonen-Systeme

Hadronenstruktur

- Quarks & Gluonen
- Deconfinement

# Von der QCD zur Nuklidkarte

bessere Auflösung / höhere Energie

# Quantenchromodynamik

# Kernstruktur



**Lösung** des wechselwirkenden Vielteilchenproblems

Konstruktion einer QCD-basierten NN-Wechselwirkung

# Realistische Nukleon-Nukleon Potentiale

#### Realistische NN-Potentiale

#### QCD motiviert

- Symmetrien, Mesonen-Austausch-Bild
- chirale effektive Feldtheorien

#### kurzreichweitige Phänomenologie

• kurzreichw. Parametrisierung / Kontaktterme

#### experimentelle NN-Streudaten

• Streuphasen & Deuteroneigenschaften mit hoher Genauigkeit reproduziert

#### ergänzende Dreiteilchenkraft

• angepaßt an Spektren leichter Kerne



Robert Roth - TU Darmstadt - 10/2006

# Argonne V18 Potential



Nukleares Vielteilchenproblem

#### Deuteron: Manifestation der Korrelationen

 $M_S=0 \ rac{1}{\sqrt{2}}(\left|\uparrow\downarrow
ight
angle+\left|\downarrow\uparrow
ight
angle)$ 





- exakt Lösung des Zweiteilchenproblems für AV18 Potential
- spinprojizierte **Zweiteil**chendichte  $\rho_{1,M_S}^{(2)}(\vec{r})$

Zweiteilchendichte bei kleinen Teilchenabständen stark unterdrückt Zentralkorrelationen

starke Winkelabhängigkeit der Dichte in Abhängigkeit von der Spinorientierung Tensorkorrelationen

#### Exakte Lösungen jenseits des Deuterons



#### Kernstruktur jenseits der p-Schale

#### **Realistische NN-Potentiale**

- erzeugen starke Korrelationen im Vielteilchenzustand
- kurzreichweitige Zentral- & Tensorkorrelationen sind dominant

#### Vielteilchenproblem

- angewiesen auf eingeschränkten
   Modellraum jenseits der *p*-Schale
- können kurzreichweitige Korrelationen nicht beschreiben
- Extrem: Hartree-Fock basiert auf einzelner Slaterdeterminante

#### **Moderne Effektive Wechselw.**

- Anpassung des realistischen Potentials an verfügbaren Modellraum
- Erhaltung der exp. bestimmten Eigenschaften (Streuphasen)

Unitary Correlation Operator Method (UCOM)

#### Methode der unitären Korrelatoren

#### **Korrelationsoperator**

erzeuge kurzreichweitige Korrelationen durch unitäre Transformation bzgl. der Relativkoordinaten aller Teilchenpaare

$$\mathbf{C} = \exp[-\mathrm{i}\,\mathrm{G}] = \expigg[-\,\mathrm{i}\sum_{i < j}\mathrm{g}_{ij}igg]$$

korrel. Zustände $\left| \widetilde{\psi} 
ight
angle = \mathbf{C} \; \left| \psi 
ight
angle$ 

korrel. Operatoren  $\widetilde{\mathbf{O}} = \mathbf{C}^{\dagger} \mathbf{O} \mathbf{C}$ 

$$ig\langle \widetilde{\psi} ig| \, \mathbf{O} ig| \widetilde{\psi'} ig
angle = ig\langle \psi ig| \, \mathbf{C^\dagger} \, \, \mathbf{O} \, \, \mathbf{C} ig| \psi' ig
angle = ig\langle \psi ig| \, \widetilde{\mathbf{O}} ig| \psi' ig
angle$$

 $G^{\dagger} = G$  $C^{\dagger}C = 1$ 

#### Zentral- und Tensorkorrelator

 $\mathrm{C}=\mathrm{C}_{\Omega}\mathrm{C}_{r}$ 

#### Zentralkorrelator $C_r$

 radiale abstandsabhängige Verschiebung in der Relativkoordinate zweier Nukleonen

$$egin{aligned} \mathbf{g}_r &= rac{1}{2} ig[ s(\mathbf{r}) \; \mathbf{q}_r + \mathbf{q}_r \; s(\mathbf{r}) ig] \ \mathbf{q}_r &= rac{1}{2} ig[ rac{ec{\mathbf{r}}}{\mathbf{r}} \cdot ec{\mathbf{q}} + ec{\mathbf{q}} \cdot rac{ec{\mathbf{r}}}{\mathbf{r}} ig] \end{aligned}$$

#### Tensorkorrelator $C_{\Omega}$

 tangentiale Verschiebung in Abhängigkeit von der relativen Orientierung von Spin und Relativkoordinate

$$egin{aligned} &\mathbf{g}_\Omega = rac{3}{2} artheta(\mathbf{r}) ig[ (ec{\sigma}_1 \!\cdot ec{\mathbf{q}}_\Omega) (ec{\sigma}_2 \!\cdot ec{\mathbf{r}}) + (ec{\mathbf{r}} \!\leftrightarrow \!ec{\mathbf{q}}_\Omega) ig] \ & ec{\mathbf{q}}_\Omega = ec{\mathbf{q}} - rac{ec{\mathbf{r}}}{ec{\mathbf{r}}} \,\mathbf{q}_r \end{aligned}$$

s(r) und  $\vartheta(r)$ für gegebenes Potential im Zweiteilchensystem bestimmt

#### Korrelierte Zustände: Das Deuteron



#### Korrelierte Zustände: Das Deuteron



# Korrelierte Wechselwirkung: $V_{\text{UCOM}}$

$$\widetilde{\mathbf{H}} = \mathbf{T} + \mathbf{V}_{UCOM} + \mathbf{V}_{UCOM}^{[3]} + \cdots$$

- geschlossene Operatordarstellung der korrelierten Wechselwirkung V<sub>UCOM</sub> in Zweiteilchennäherung
- korrelierte Ww. und Ausgangswechselwirkung sind per Konstruktion streuphasenäquivalent
- Impulsraummatrixelemente ähnlich V<sub>lowk</sub>
- konsistente korrelierte Operatoren (Übergangsoperatoren, Besetzungzahlen, etc.) leicht konstruierbar

# Anwendung I No-Core Schalenmodell

in Zusammenarbeit mit Petr Navrátil (LLNL)

#### UCOM + NCSM



- Vielteilchenzustand ist entwickelt in Slaterdeterminanten von Einteilchenzuständen des harmonischen Oszillators
- großskalige Diagonalisierung des Hamiltonian in einem trunkierten Vielteilchenraum ( $\mathcal{N}\hbar\omega$ -Trunkierung)
- Bewertung von kurz- und langreichweitigen Korrelationen

# <sup>4</sup>He: Konvergenz



# <sup>4</sup>He: Konvergenz



#### Tjon-Linie und Korrelatorreichweite



Tjon-Linie: E(<sup>4</sup>He) vs. E(<sup>3</sup>H) für streuphasenäquivalente NN-Wechselwirkungen

#### Tjon-Linie und Korrelatorreichweite



- Tjon-Linie: E(<sup>4</sup>He) vs. E(<sup>3</sup>H) für streuphasenäquivalente NN-Wechselwirkungen
- Änderung der C<sub>Ω</sub>-Reichweite erzeugt Verschiebung entlang der Tjon-Linie

minimiere Netto-Dreiteilchenkraft durch Wahl eines Korrelators nahe der exp. Energien

#### Tjon-Linie und Korrelatorreichweite



- Tjon-Linie: E(<sup>4</sup>He) vs. E(<sup>3</sup>H) für streuphasenäquivalente NN-Wechselwirkungen
- Änderung der C<sub>Ω</sub>-Reichweite erzeugt Verschiebung entlang der Tjon-Linie

minimiere Netto-Dreiteilchenkraft durch Wahl eines Korrelators nahe der exp. Energien

# <sup>6</sup>Li: NCSM für p-Schalenkerne



# <sup>10</sup>B: Signatur einer Dreiteilchenkraft?



# <sup>10</sup>B: Signatur einer Dreiteilchenkraft?



# Ausblick: NCSM jenseits der p-Schale

#### NCSM

- konvergente Rechnungen auf p-Schalenkerne beschränkt
- 6ħω-Rechnung für <sup>40</sup>Ca derzeit nicht machbar (~10<sup>10</sup> Zustände)

#### Importance Sampling NCSM

- Diagonalisierung im Raum der relevanten Vielteilchenkonfigurationen
- a priori Maß für Relevanz durch Störungstheorie gegeben



Anwendung II: Hartree-Fock

#### UCOM + HF



- Vielteilchenzustand ist einzelne Slaterdeterminante von Einteilchenzuständen dargestellt in Oszillatorbasis
- HF-Zustände können keinerlei Korrelationen beschreiben
- Ausgangspunkt f
   ür verbesserte Vielteilchenrechnungen: MBPT, RPA, SM/CI, CC,...

#### Hartree-Fock mit V<sub>UCOM</sub>



### Störungstheorie mit $V_{UCOM}$



# Anwendung III Random Phase Approximation

#### UCOM + RPA



- voll selbst-konsistente RPA ausgehend von der Hartree-Fock-Lösung für die gleiche korrelierte Wechselwirkung V<sub>UCOM</sub>
- Summenregeln mit großer Genauigkeit erfüllt; spuriose Schwerpunktsmode vollständig entkoppelt bei  $\sim 10 \text{ keV}$
- Extended-RPA und Second-RPA zur Einbeziehung von Grundzustandskorrelationen und komplexen Konfigurationen

#### RPA Grundzustandskorrelationen

- Berechnung der Korrelationsenergie jenseits von Hartree-Fock mittels RPA-Ringsumme
- Einbeziehung aller Multipolaritäten, Paritäten und Ladungsaustausch, sowie Korrektur der zweiten Ordnung (double-counting) nötig



#### Isoskalare Monopolresonanz



#### Isovektor Dipol & Isosalarer Quadrupol



# Ausblick: RPA mit Dreiteilchenww.



- Iangreichweitiger Tensorkorrelator & abstoßende Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung
- systematische Verbesserung von

  - → Einteilchenspektren
  - → Stärkeverteilungen

**\_\_\_** Standardparameter

langreichw. Tensorkorrelator & Dreiteilchen-Kontaktwechselw.

Anwendung IV:

Fermionische Molekulardynamik

in Zusammenarbeit mit T. Neff, H. Feldmeier et al.

#### UCOM + FMD



- Variationsrechnung mit Slaterdeterminante gaußförmiger Einteilchenzustände; alle Einteilchenparameter (mittlerer Ort & Impuls, komplexe Breite, Spin) sind Variationsfreiheitsgrade
- Projektion (Drehimpuls, Parität, Schwerpunkt) zur Wiederherstellung gebrochener Symmetrien (PAV/VAP)
- Multikonfigurationsrechnungen zur Mischung verschiedener intrinsischer Konfigurationen (GCM)

#### Intrinsische Einteilchendichten



 $ho^{(1)}(ec{x})~[
ho_0]$ 

# Struktur von <sup>12</sup>C



	$E [\mathrm{MeV}]$	$R_{ch} \; [ { m fm}]$	$B(E2) \ [e^2  { m fm}^4]$
V/PAV	81.4	2.36	-
VAP $\alpha$ -cluster	79.1	2.70	76.9
$PAV^{\pi}$	88.5	2.51	36.3
VAP	89.2	2.42	26.8
Multi-Config	92.2	2.52	42.8
Experiment	92.2	2.47	$39.7\pm3.3$



Robert Roth - TU Darmstadt - 10/2006

# Struktur von <sup>12</sup>C — Hoyle-Zustand



	Multi-Config	Experiment
E [MeV]	92.4	92.2
$R_{\rm ch}$ [fm]	2.52	2.47
$B(E2,0^+_1  o 2^+_1) \; [e^2  { m fm}^4]$	42.9	$39.7\pm3.3$
$M(E0,0^+_1 ightarrow 0^+_2)~[{ m fm}^2]$	5.67	$5.5\pm0.2$





# Ausblick: Resonanzen & Streuung in FMD



 kollektive Koordinatendarstellung als Werkzeug zur Bescheibung von Kontinuumszuständen in der FMD

> erste Schritte in Richtung einer konsistenten Beschreibung von Struktur und Reaktionen

## Zusammenfassung

#### Unitary Correlation Operator Method (UCOM)

- explizite Beschreibung kurzreichw. Zentral- und Tensorkorrelationen
- $\bullet$  universelle streuphasenäquiv. korrelierte Wechselwirkung  $\mathbf{V}_{\text{UCOM}}$

#### Innovative Vielteilchenmethoden

- No-Core Schalenmodell
- Hartree-Fock, MBPT, SM, CC,...
- RPA, ERPA, SRPA, GFRPA,...
- Fermionische Molekulardynamik

vereinheitlichte Beschreibung von Struktur & Reaktionen über die gesamte Nuklidkarte hinweg

# Epilog

#### Dank an meine Gruppe & meine Kollaborationspartner:

- T. Böhlen, P. Hedfeld, H. Hergert, M. Hild, N. Paar, P. Papakonstantinou, F. Schmitt, I. Türschmann, A. Zapp Institut für Kernphysik, TU Darmstadt
- P. Navrátil

Lawrence Livermore National Laboratory

• T. Neff

NSCL, Michigan State University

• H. Feldmeier, C. Barbieri, S. Bacca, C. Özen,...

Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI)



gefördert durch die DFG im Rahmen des SFB 634 "Kernstruktur, nukleare Astrophysik und fundamentale Experimente am S-DALINAC"