

Diplomarbeit

Kernmaterie mit korrelierten realistischen
NN–Wechselwirkungen

Alexander EHRlich

20. Juni 2005

Institut für Kernphysik
TU Darmstadt

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| Einleitung | vii |
| 1 UCOM-Formalismus | 1 |
| 1.1 Unitäre Korrelationsoperator | 1 |
| 1.1.1 Das Konzept | 1 |
| 1.1.2 Zentralkorrelationen | 4 |
| 1.1.3 Tensorkorrelationen | 6 |
| 1.1.4 Spin-Isospin-Abhängigkeit | 8 |
| 1.2 Korrelierte Zustände | 8 |
| 1.2.1 Zentralkorrelationen | 8 |
| 1.2.2 Zentral- und Tensorkorrelationen | 9 |
| 1.3 Korrelierte Operatoren | 13 |
| 1.3.1 Clusterentwicklung | 13 |
| 1.3.2 Zentralkorrelationen | 14 |
| 1.3.3 Zentral- und Tensorkorrelationen | 16 |
| 2 Korrelierte Matrixelemente | 19 |
| 2.1 Korreliertes Nukleon-Nukleon-Potential | 19 |
| 2.1.1 Argonne-V18-Potential | 19 |
| 2.1.2 Korreliertes Argonne-V18-Potential - V_{ucom} | 20 |
| 2.1.3 Optimale Korrelationsfunktionen | 26 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.2 | Operatorkorrelierte Matrixelemente | 28 |
| 2.3 | Zustandskorrelierte Matrixelemente | 29 |
| 2.4 | Matrixelemente im Vergleich | 36 |
| 3 | Kernmaterie mit realistischen Potentialen | 45 |
| 3.1 | Einführung | 45 |
| 3.1.1 | Eigenschaften der Kernmaterie | 45 |
| 3.1.2 | Hartree–Fock–Näherung | 47 |
| 3.2 | Symmetrische Kernmaterie | 51 |
| 3.2.1 | Erwartungswert der kinetischen Energie | 51 |
| 3.2.2 | Erwartungswert der potentiellen Energie | 52 |
| 3.2.3 | Zustandsgleichung | 62 |
| 3.2.4 | Das Einteilchenpotential | 63 |
| 3.2.5 | Effektive Masse | 64 |
| 3.2.6 | Hughenoltz–van Hove Theorem | 65 |
| 3.3 | Neutronenmaterie | 65 |
| 3.3.1 | Erwartungswert für die kinetische Energie | 66 |
| 3.3.2 | Erwartungswert für die potentielle Energie | 66 |
| 3.3.3 | Zustandsgleichung | 67 |
| 3.4 | Ergebnisse | 67 |
| 3.4.1 | Symmetrische Kernmaterie | 68 |
| 3.4.2 | Neutronenmaterie | 72 |
| 3.5 | Phänomenologische Korrektur | 73 |
| 3.5.1 | Motivation der Korrektur | 73 |
| 3.5.2 | Ergebnisse für symmetrische Kernmaterie | 75 |
| 4 | Zusammenfassung | 79 |
| A | Notation and Konventionen | 81 |

| | |
|--|----|
| A.1 Einheiten und Konstanten | 81 |
| A.2 Gewöhnliche Funktionen | 81 |
| A.3 Operatoren und Vektoren | 82 |
| A.4 Pauli-Matrizen | 83 |
| A.5 Clebsch-Gordan Koeffizienten | 83 |
| Literatur | 93 |

Einleitung

Trotz exponentiell wachsender Rechenleistung der Computer ist die mikroskopische Beschreibung eines stark wechselwirkenden quantenmechanischen Vielteilchensystems immer noch eine der Herausforderungen der theoretischen Physik. Als Beispiele seien Atomkerne (Anzahl der Teilchen von 2 bis ca. 300) oder das idealisierte Modellsystem der Kernmaterie genannt. Bei der Lösung solcher Vielteilchenprobleme ist es man im Allgemeinen auf eine Reihe von Näherungen angewiesen.

Wir wählen für die Behandlung des nuklearen Vielteilchenproblems ein effektives Bild, in dem die relevanten Freiheitsgrade Protonen und Neutronen sind. Ihre Wechselwirkung wird durch das so genannte Nukleon–Nukleon–Potential beschrieben. Dieses Potential ist nicht fundamental, sondern lediglich eine effektive Beschreibungsweise für den Einfluss der Dynamik elementarer Freiheitsgrade auf das System. In den letzten 10 Jahren wurden verschiedene realistische Nukleon–Nukleon–Potentiale entwickelt, die auf der starken Wechselwirkung zwischen den Bausteinen der Nukleonen – Quarks und Gluons – beruhen. Aus allgemeinen Symmetrien und dem QCD–motivierten Mesonen–Austausch–Bild lässt sich eine Operator- oder Partialwellendarstellung des Potentials konstruieren. Verbleibende Parameter werden durch Anpassung an experimentelle Daten für das Zweinukleonensystem, d.h. Streuphasen und Eigenschaft des Deuterons, festgelegt.

Alle realistischen Potentiale zeigen zwei Charakteristika, die im Folgenden von großer Bedeutung sein werden. Erstens, eine starke Abstoßung bei kleineren Abständen, die auch als ‘Core’ bezeichnet wird. Zweitens, einen stark anziehenden und langreichweitigen Tensorteil, der z.B. für die D –Wellenbeimischung des Deuterons verantwortlich ist.

Insbesondere diese beiden Bestandteile des Potentials sind für starke Korrelationen im nuklearen Vielteilchensystem verantwortlich. Der abstoßende Core verhindert, dass sich Paare von Nukleonen in Abständen kleiner des Radius des Cores aufhalten. Die Diagonalelemente der Zweiteilchendichtematrix, die die Wahrscheinlichkeitsdichte angibt,

zwei Nukleonen in einem gewissen Abstand angibt, sind bei kleinen Teilchenabständen aufgrund des abstoßenden Cores stark unterdrückt. Die durch den Tensoranteil der Wechselwirkung erzeugten Korrelationen äußern sich, z.B., in der D -Wellenbeimischung des Deuteron. Sie lässt sich als starke Korrelation zwischen der Spinorientierung und der relativen räumlichen Orientierung der Nukleonen auffassen. Dass der Tensoranteil der Wechselwirkung für derartige Korrelationen verantwortlich ist, zeigt bereits die Form des Tensoroperators, die der Dipol-Dipol-Wechselwirkung entspricht.

Viele Methoden zur approximativen Lösung des nuklearen Vielteilchenproblems, insbesondere jenseits der leichtesten Isotope, sind nicht in der Lage diese Korrelationen zu beschreiben. Als Beispiel sei die Hartree-Fock-Näherung erwähnt, in der der Vielteilchenzustand durch eine einzelne Slaterdeterminante beschrieben wird. Dieser Vielteilchenzustand ist ein antisymmetrisiertes Produkt aus Einteilchenzuständen und kann deshalb die eben beschriebenen Korrelationen nicht beschreiben. Der unmittelbare Einsatz realistischer Wechselwirkungen in Hartree-Fock-Rechnungen ist daher nicht möglich.

Ein Verfahren, um realistische Wechselwirkungen doch in einfachen Vielteilchenmodellen einsetzbar zu machen, stellt die Methode der unitären Korrelatoren (Unitary Correlation Operator Method, UCOM) dar. In ihr werden die kurzreichweitigen Zentral- und Tensor Korrelationen durch eine unitäre Transformation explizit beschrieben.

Wendet man den unitären Operator dieser Transformation, den sog. Korrelationsoperator, auf einen unkorrelierten Zustand, z.B. die Slaterdeterminante der Hartree-Fock-Näherung an, so werden dem Zustand die kurzreichweitigen Korrelationen explizit aufgeprägt. Solche korrelierten Zustände bilden dann die Grundlage für Kernstrukturrechnungen mit realistischen Nukleon-Nukleon-Potentialen.

Dieser Formalismus wird in vorliegender Arbeit verwendet, um die Zustandsgleichungen von Kernmaterie im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung mit korrelierten realistischen Potentialen zu bestimmen. Dazu fassen wir in Kapitel 1 den Formalismus der Methode der unitären Korrelationen kurz zusammen. Das Kapitel 2 beschäftigt sich dann mit der Berechnung korrelierter Impulsraum-Matrixelemente, die bereits Einblick in die Wirkungsweise der unitären Korrelationsoperatoren liefern. Ausgehend von den Impulsraum-Matrixelementen wird in Kapitel 3 die Zustandsgleichung von Kern- und Neutronenmaterie konstruiert. Wir diskutieren die numerischen Resultate für die Zustandsgleichung, sowie verschiedene Einteilchengrößen.

Das Kapitel 4 fasst die wesentlichen Ergebnisse zusammen.

Kapitel 1

UCOM–Formalismus

1.1 Unitäre Korrelationsoperator

1.1.1 Das Konzept

Das Ziel der Methode der unitären Korrelatoren (UCOM) [1, 2, 3, 4] ist es, eine Möglichkeit zu schaffen, mit Hilfe moderner realistischer Potentiale die Grundzustandseigenschaften der Kerne berechnen zu können. Es geht darum, die Eigenschaften “ab initio” (= “von Anfang an”) zu berechnen.

Alle realistischen Nukleon–Nukleon–Wechselwirkungen [5, 6, 7, 8] haben zwei Eigenschaften, die ihre Verwendung in Rechnungen mit einfachen Vielteilchenzuständen behindern: Einen Bereich starker Abstoßung bei kurzen Reichweiten (hard core) und eine starke tensorielle Kraft.

Für die erfolgreiche Beschreibung von Vielteilchensystemen mit solchen zentralen und tensoriellen Korrelationen muss der Vielteilchenzustand über die dafür notwendigen Freiheitsgrade verfügen, um die starke Unterdrückung der Zweinukleondichte bei Entfernungen unterhalb des Core–Radius und die Korrelationen zwischen Gesamtspin und Abstand aufgrund der Tensorkraft zu beschreiben.

In der Kernphysik häufig benutzte Näherungsverfahren wie Hartree–Fock [9, 10, 11, 12] verwenden Slaterdeterminanten als Vielteilchenzustände. Dieser antisymmetrisierte Produktansatz ermöglicht einerseits einen einfachen mathematischen Zugang zur Theorie, führt aber andererseits zu dem auf den ersten Blick innerhalb der Hartree–Fock–Näherung nicht lösbar Problem, dass insbesondere kurzreichweitige Korrelationen zwischen den

Teilchen, die über das Pauli-Prinzip hinausgehen nicht beschreibbar sind. Die Unterdrückung ihrer Zweiteilchendichten innerhalb des Core-Radius ist schwächer als für die wirklichen Eigenzustände des Hamiltonoperators, und führt daher zu unphysikalisch großen abstoßenden Beiträgen zur Wechselwirkungsenergie.

Außerdem fehlen anziehende Beiträge der Tensorwechselwirkung, weil Slaterdeterminanten die Korrelation zwischen Gesamtspin und relativem Abstand nicht richtig beschreiben können.

Aus diesen Gründen werden die Korrelationen mittels unitärer Korrelationsoperatoren in die Vielteilchenzustände eingebaut und somit die notwendig Freiheitsgrade auf systematische Weise bereitgestellt.

Wie der Name UCOM schon verrät, werden die Transformationen der Zuständen unitär sein [1, 4]. Man gewinnt dadurch die Möglichkeit, die das System entweder durch korrelierte Operatoren oder durch korrelierte Zustände zu beschreiben. Beide Beschreibungen sind theoretisch äquivalent, allerdings treten in der Praxis verschiedene Rechenschwierigkeiten auf, die wir später genauer untersuchen werden. Somit kann man, je nach Aufgabenstellung, das günstigere Verfahren wählen.

Der korrelierte Vielteilchenzustand¹ $|\tilde{\Psi}\rangle$ wird durch die Anwendung des unitären Korrelationsoperators C auf den unkorrelierten Vielteilchenzustand $|\Psi\rangle$ gewonnen:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = C |\Psi\rangle . \quad (1.1)$$

Bei dem Zustand $|\Psi\rangle$ kann es sich z.B. um eine Slaterdeterminante von Harmonischen-Oszillator-Zuständen (Hartree-Fock, Schalenmodell) oder Gauß'schen Versuchszuständen der Fermionischen Molekulardynamik [1] handeln.

Alternativ kann man C auf den Operator O anwenden und erhält einen korrelierten Operator in dem selben (einfachen) Hilbertraum, der dafür aber eine kompliziertere Operatorstruktur besitzt:

$$\tilde{O} = C^\dagger O C = C^{-1} O C . \quad (1.2)$$

Im folgenden Kapitel wenden wir beide Methoden auf ein realistisches Potential an, berechnen damit die Matrixelemente und vergleichen die Ergebnisse, um die Unterschiede, die in der Praxis auftreten, zu untersuchen.

Es sei nochmals angemerkt, dass aufgrund der Unitarität beide Methoden gleichwertig

¹Die Tilde wird verwendet, um korrelierte Zustände und Operatoren zu bezeichnen .

sind. Erwartungswerte und Matrixelemente sind in beiden Fällen identisch:

$$\langle \Psi | C^\dagger O C | \Psi \rangle = \langle \tilde{\Psi} | O | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Psi | \tilde{O} | \Psi \rangle . \quad (1.3)$$

Der Generator

Wie konstruiert man nun einen Operator, der den Anforderungen der UCOM entspricht?

Jeder unitäre Operator kann in der Form

$$C = \exp(-iG) \quad (1.4)$$

geschrieben werden, wobei G den hermiteschen Generator der Transformation bezeichnet. Der Generator soll bestimmte Voraussetzungen erfüllen.

Die erste Bedingung ist die Erhaltung der Symmetrien des ursprünglichen Hamiltonoperators. Im Falle einer nichtrelativistischen Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung bleibt er z. B. unter Rotationen oder Transformationen der Galilei–Gruppe invariant.

Somit kann G also nur vom relativen Abstand und Impuls von zwei Nukleonen abhängen. Aufgrund der Rotationsinvarianz muss G ein skalarer Operator sein. Wir wollen Zweiteilchenkorrelationen behandeln, folglich wird G ein Zweiteilchenoperator sein. Wenn wir echte Dreiteilchenkorrelationen beschreiben wollten, würden wir einen entsprechenden Dreiteilchengenerator benötigen.

Die allgemeinste Form für einen Generator, der den obigen Voraussetzungen entspricht, ist somit

$$G = \sum_{i>j} g(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{q}_{ij}, \boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j, \boldsymbol{\tau}_i, \boldsymbol{\tau}_j), \quad i, j = 1, \dots, A, \quad (1.5)$$

wobei die Indizes i und j über alle Teilchen laufen. Es wird hier formal zwischen dem im Zweiteilchenraum definierten Zweiteilchenoperator g , und dem Vielteilchenoperator G , der auf dem A -Teilchenraum definiert ist, unterscheiden. Mit dem Generator aus (1.5) können wir einen Operator konstruieren, mit dessen Hilfe die unitäre Transformation vollzogen wird.

Die Methode der Unitären Korrelationen umfasst zwei Arten von Korrelationen – radiale und tensorielle. Während erstere nur von dem relativen Abstand der wechselwirkenden Teilchen abhängen, hängen die Tensorkorrelationen von der Orientation der Teilchen im Orts- und im Spin–Isospin–Raum ab.

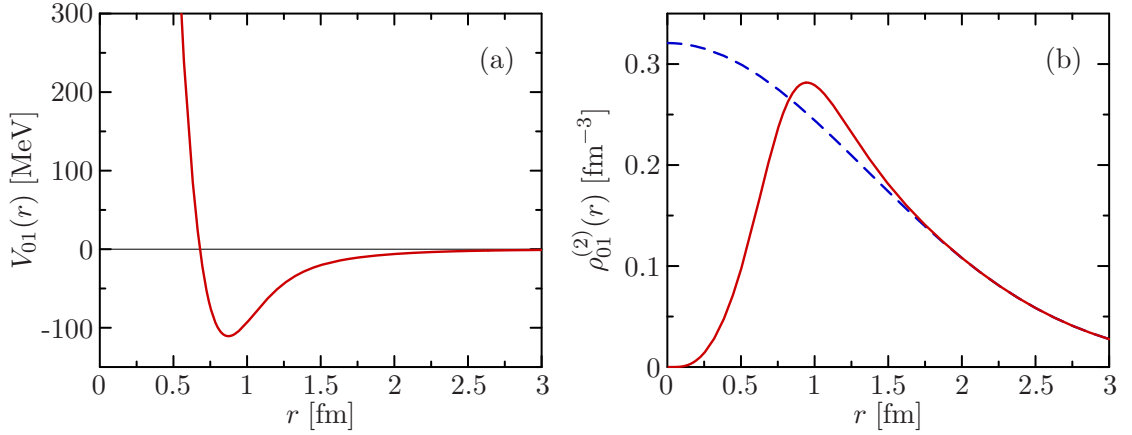


Abbildung 1.1: (a) Zentralteil des Argonne–V18–Potentials im $(S, T) = (0, 1)$ Kanal. (b) Zweiteilchendichte $\rho_{S=0, T=1}^{(2)}(\mathbf{r})$ für ${}^4\text{He}$, berechnet mit einer Slaterdeterminante von Gauß’schen Einteilchenzuständen (---), im Vergleich zur zentralkorrelierten Zweiteilchendichte (—) [4].

Zuerst betrachten wir die radialen Korrelationen, die oft auch als Zentralkorrelationen bezeichnet werden.

1.1.2 Zentralkorrelationen

Zentralkorrelationen sind bereits im Detail innerhalb des UCOM–Formalismus studiert worden [13, 1], weswegen wir in diesem Abschnitt nur die Ideen und Techniken zusammenfassen.

Für die weiteren Rechnungen ist es vorteilhafter, die Massen von Protonen und Neutronen durch die mittlere Nukleonenmasse zu nähern und Schwerpunktskoordinaten für die Nukleonen einzuführen. Zusätzlich werden die Spins und Isospins der einzelnen wechselwirkenden Nukleonen gekoppelt. Zur Veranschaulichung benutzen wir das Argonne–V18–Potential im $ST = 01$ Kanal, das in der Abb. 1.1 dargestellt ist. Zur genauen Beschreibung des vollständigen Potentials kommen wir später im Kapitel 2. Betrachten wir Zustände mit Spin $S = 0$ so brauchen wir nur über den Zentralteil der Wechselwirkung nachdenken, da der Tensor- und Spin–Bahn–Anteil nur in Kanälen $S = 1$ beitragen.

Wie alle realistischen Nukleon–Nukleon–Wechselwirkungen hat Argonne V18 einen stark abstoßenden Zentralteil bei kleinen Relativabständen der Nukleonen [14]. Mean–Field–Modelle können die starke Unterdrückung der Zweiteilchendichte nicht wiedergeben und

führen deshalb zu nichtverschwindenden Wahrscheinlichkeiten, die Nukleonen bei Abständen innerhalb des Core-Radius zu finden. Solche Rechnungen führen zu unphysikalisch hohen oder unendlichen Energien. Um diesen Mangel zu beseitigen, wird die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Nukleonen bei Abständen kleiner oder gleich des Core-Radius stark unterdrückt.

Die Aufgabe des Zentralkorrelators C_r ist es, das Loch in der Zweiteilchendichteverteilung zu erzeugen, das durch den auf kurzen Distanzen stark abstoßenden und dominierenden Anteil der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung verursacht wird.

Es wird ein Operator benötigt, der die Nukleonen aus dem Core-Bereich der Wechselwirkung verschiebt. Da diese Verschiebung in der radialen Richtung, d.h. entlang des relativen Abstandsvektor \mathbf{r} der zwei Nukleonen erfolgen muss, wird der Generator proportional zu dem radialen Impulsoperator

$$q_r = \frac{1}{2}(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{q}), \quad \hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (1.6)$$

sein. Weil die Verschiebung für Relativentfernungen innerhalb des Core-Radius stark sein muss, und in großen Entfernungen keine Verschiebung erforderlich ist, wird die Stärke der Verschiebung durch eine r -abhängige Funktion $s(r)$ modelliert. Ein passender hermitescher Generator ist dann durch

$$g_r \equiv \frac{1}{2}(q_r s(r) + s(r) q_r) = s(r) q_r - \frac{i}{2} s'(r). \quad (1.7)$$

gegeben.

Die Korrelationsfunktion

Aus technischen Gründen ist es vorteilhaft, zwei Funktionen $\mathbf{R}_+(\mathbf{r})$ und $\mathbf{R}_-(\mathbf{r})$ einzuführen, anstatt mit der Verschiebungsfunktion $s(r)$ weiterzuarbeiten. Diese vektorwertigen ortsabhängigen Funktionen $\mathbf{R}_\pm(\mathbf{r})$ wirken entlang des \mathbf{r} -Vektors:

$$\mathbf{R}_\pm(\mathbf{r}) = R_\pm(r) \hat{\mathbf{r}}. \quad (1.8)$$

Die Funktionen $R_\pm(r)$ werden als Korrelationsfunktionen bezeichnet. Sie sind ihre jeweiligen Inverse:

$$R_\pm[R_\mp(r)] = r. \quad (1.9)$$

Die Korrelationsfunktionen aus (1.8) und die Verschiebungsfunktion $s(r)$ aus (1.7) sind durch die Integralgleichung

$$\int_r^{R_{\pm}(r)} \frac{d\xi}{s(\xi)} = \pm 1 \quad (1.10)$$

verbunden. Für kleine Verschiebungen und/oder schwach r -abhängige s -Funktionen gilt näherungsweise

$$R_{\pm}(r) \approx r \pm s(r) . \quad (1.11)$$

1.1.3 Tensorkorrelationen

Der Generator der Tensorkorrelationen ist im Rahmen der Dissertation von T. Neff [3] hergeleitet worden. Um sich nicht unnötig zu wiederholen, fassen wir die wichtigsten Ergebnisse dieser Studie zusammen und verweisen auf die anderen Quellen, die sich mit dem Thema gründlicher auseinandersetzen [3, 15, 4].

Außer dem stark abstoßenden Core besitzen alle realistischen Nukleon–Nukleon–Potentiale eine starke Tensorkraft [7, 16], die in erster Linie vom Ein–Pion–Austausch erzeugt wird. Sie wirkt nur in $S = 1$ Kanälen und veranlasst dort eine starke Korrelation zwischen der Raumorientierung der Nukleonen und der Orientierung ihrer Spins.

Die Tensorkraft ist für die erfolgreiche Beschreibung von Kernen und Kernmaterie von entscheidender Bedeutung, da sie wichtige Beiträge zur Bindungsenergie liefert. Um ein anschauliches Verständnis der Beziehung zwischen Abstand und Spin–Orientierung der Nukleonen zu bekommen, betrachten wir ein System von zwei Magneten.

Die Dipol–Dipol–Wechselwirkung zwischen zwei Magneten hat dieselbe Struktur wie die Tensorkraft s_{12} , wenn wir σ_i als klassischen magnetischen Dipolmomentvektor interpretieren. Hängt man die Magnete frei Beweglich auf, richten sie ihre magnetischen Momente entlang des Entfernungsvektors aus. Abbildung 1.2 zeigt für den Fall attraktiver Wechselwirkung, die energetische Situation für in ihrer Orientierung fixierte Spins. Für Magnete mit antiparallelen magnetischen Momenten, wird die energetisch bevorzugte Konfiguration dadurch erreicht, dass die σ_i senkrecht zu \mathbf{r} stehen, Fall (a). Magnete mit parallelen magnetischen Momenten σ_i weisen größte Anziehung auf, wenn die Vektoren \mathbf{r} und σ_i parallel sind, Fall (b). Nukleonen mit parallelen Spins werden sich also in ihren Relativkoordinatensystem bevorzugt am 'Nord-' und 'Südpol' aufhalten, während Nukleonen mit antiparallelen Spins sich in der Äquatorebene ausrichten werden.

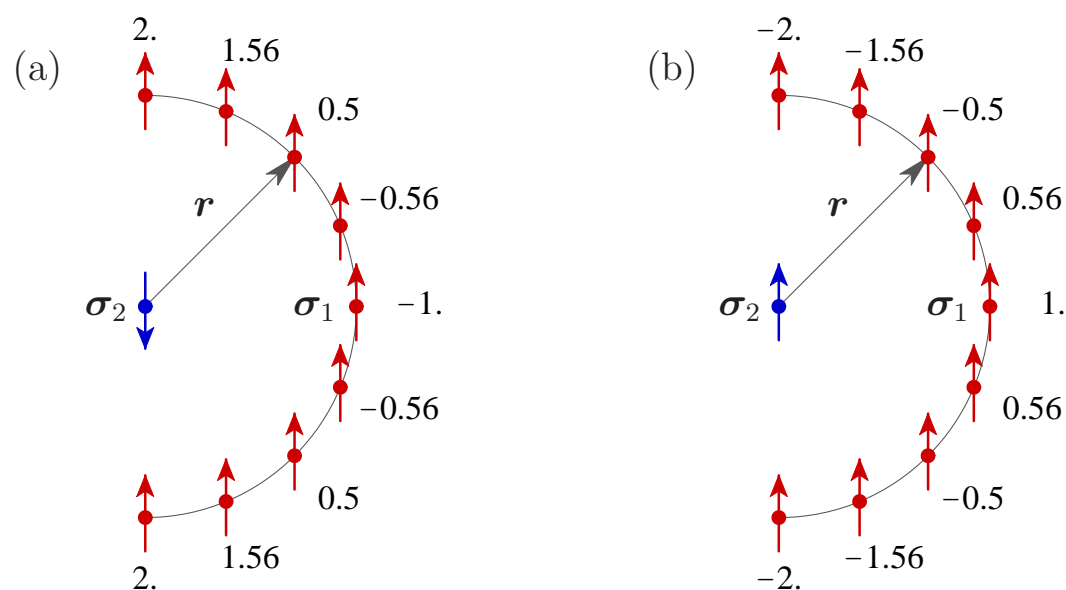


Abbildung 1.2: Klassische Analogie für die Tensorkraft zwischen parallel (linkes Bild) und antiparallel (rechtes Bild) orientierten Spins. Gezeigt sind die Werte der klassischen tensoriellen Struktur, die dem s_{12} -Operator entspricht. σ_i ist als klassischer Vektor zu verstehen, z.B. als magnetisches Dipolmoment [3, 4].

Wir müssen dabei aber die kinetische Energie der Nullpunktsbewegung des Zweiteilchensystems berücksichtigen die einer zu starken Lokalisierung entgegensteht. Die räumliche Verteilung wird so erfolgen, dass die Summe aus potentieller und kinetischer Energie minimal wird.

Einer einzelnen Slaterdeterminante fehlen die passenden Freiheitsgrade [17, 12], um diesen physikalischen Zustand richtig zu beschreiben. Weil die Slaterdeterminanten eine vollständige Basis bilden, kann der echte Zustand im Prinzip immer als eine Superposition geschrieben werden. Für die erfolgreiche Beschreibung bräuchte man jedoch eine riesige Zahl von Slaterdeterminanten, was den Zugang zur Lösung enorm erschwert.

Die Idee ist nun, die Tensorkorrelationen wie die Zentralkorrelationen mittels eines unitären Korrelationsoperators in den Vielkörperzustand einzubauen.

1.1.4 Spin-Isospin-Abhängigkeit

Eine praktische und oft in der Beschreibung der Kernkräfte benutzte Schreibweise ist die Zerlegung der Wechselwirkung in die vier ST-Kanäle. Dies ist nützlich, weil nicht alle Anteile der Wechselwirkung in allen Kanälen vorhanden sind. Insbesondere tragen die Tensor- und Spin-Bahn-Anteile nur in den Kanälen mit $S = 1$ bei. Außerdem ist die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung in guter Näherung isospin-symmetrisch, so dass es Sinn macht $T = 0$ und $T = 1$ Kanälen einzuführen.

Weil die Kernkraft von Spin und Isospin abhängt, werden auch die Korrelationen in den verschiedenen Spin- und Isospinkanälen unterschiedlich sein. Für einen spin-isospin-abhängigen Generator im Zweiteilchenraum benutzen wir daher den Ansatz:

$$g = \sum_{ST} g_{ST} \Pi_{ST} , \quad (1.12)$$

mit dem Projektor Π_{ST} auf Spin S und Isospin T . Aufgrund der Eigenschaft

$$\Pi_{ST} \Pi_{S'T'} = \Pi_{ST} \delta_{SS'} \delta_{TT'} \quad (1.13)$$

können wir den Korrelationsoperator umschreiben:

$$c = e^{-ig} = \sum_{ST} e^{-ig_{ST}} \Pi_{ST} . \quad (1.14)$$

Weil die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung die unterschiedlichen Spin- und Isospinkanäle nicht verbindet, bekommen wir für das korrelierte Potential im Zweikörperraum

$$v = c^\dagger v c = \sum_{ST} e^{ig_{ST}} v_{ST} e^{-ig_{ST}} \Pi_{ST} . \quad (1.15)$$

Somit können die Korrelationsoperatoren für jeden Kanal unabhängig bestimmt werden, was das Problem erheblich vereinfacht.

1.2 Korrelierte Zustände

1.2.1 Zentralkorrelationen

Nachdem wir das Prinzip der Methode der Unitären Korrelatoren erläutert haben, schauen wir uns die einzelnen im Abschnitt 1.1.1 erwähnten Methoden an und wenden die Korrelatoren zunächst auf die Zustände an. Korrelierte Operatoren werden das Thema des nächsten Unterkapitels sein.

Wir erhalten eine zentralkorrelierte Wellenfunktion, wenn wir den Korrelationsoperator

$$c_r = e^{-ig_r} \quad (1.16)$$

gemäß (1.1) auf die Wellenfunktion Ψ anwenden. Die Korrelationsoperatoren sind durch die Angabe ihrer Korrelationsfunktionen eindeutig bestimmt. Der Begriff ‘Korrelator’ wird daher synonym für den Korrelationsoperator und die Korrelationsfunktion verwendet.

Wenn wir einen Korrelationsoperator mit Hilfe des Generators (1.7) konstruieren und auf die Zweiteilchenwellenfunktion im Ortsraum anwenden, bekommen wir folgende zwei Relationen:

$$\langle \mathbf{x}_{cm}, \mathbf{r} | c_r | \phi \rangle = \mathcal{R}_-(r) \langle \mathbf{x}_{cm}, \mathbf{R}_-(\mathbf{r}) | \phi \rangle \quad (1.17)$$

und

$$\langle \mathbf{x}_{cm}, \mathbf{r} | c_r^\dagger | \phi \rangle = \mathcal{R}_+(r) \langle \mathbf{x}_{cm}, \mathbf{R}_+(\mathbf{r}) | \phi \rangle . \quad (1.18)$$

Dabei stellen

$$\mathcal{R}_\pm(r) = \frac{R_\pm(r)}{r} \sqrt{R'_\pm(r)} \quad (1.19)$$

metrische Faktoren dar, die zusammen mit der Umkehrreigenschaft (1.9) die Unitarität der Transformation widerspiegeln.

Die korrelierte Wellenfunktion ist außerhalb des abstoßenden Core der Wechselwirkung fast mit der unkorrelierten identisch. Weil die Korrelationen die Norm der Wellenfunktion erhalten, muss das bei kurzen Relativabständen geschaffene Loch in der Zweiteilchendichte durch eine Erhöhung der Amplitude der Wellenfunktion bei größeren Abständen ausgeglichen werden.

1.2.2 Zentral- und Tensorkorrelationen

Das Deuteron ist das Paradebeispiel für den Einfluss der Tensorkraft in einem Kern. In relativen Koordinaten und unter Berücksichtigung der $(LS)J$ -Kopplung ist sein exakter Grundzustand durch

$$|\hat{\varphi}^d; 1M\rangle = |\hat{\varphi}_0^d(01)1M\rangle + |\hat{\varphi}_2^d(21)1M\rangle \quad (1.20)$$

gegeben, wobei

$$\langle r | \hat{\varphi}_{L=0,2}^d \rangle = \hat{\varphi}_{L=0,2}^d(r) \quad (1.21)$$

die radialen Wellenfunktionen in den Partialwellen 3S_1 und 3D_1 sind und die weggelassenen Isospinquantenzahlen durch die Antisymmetrie des Zustands fixiert sind: $T = 0$ und $M_T = 0$. Die $\hat{\varphi}_L^d(r)$ kann man bestimmen, indem man ein System gekoppelter Schrödinger-Gleichungen auf einem Gitter numerisch exakt löst. Die Tensorkraft mischt zwei Partialwellen, weil der Tensoroperator s_{12} vom Rang zwei im Ortsraum ist und die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkungen aus diesem Grund den Bahndrehimpuls L nicht erhält.

Im Falle der Tensorkorrelationen ist die Form des Generators nicht unmittelbar ersichtlich. Man verlangt daher, dass der Tensorkorrelator einen Testzustand mit $L = 0$ auf die exakte Lösung abbildet [3],

$$|\hat{\varphi}_d; 1M\rangle = c_\Omega |\varphi_d; 1M\rangle = e^{-ig_\Omega} |\varphi_d; 1M\rangle, \quad (1.22)$$

und konstruiert g_Ω entsprechend. Die $L = 2$ -Beimischung wird völlig durch c_Ω erzeugt. Dies bedeutet, dass der Generator g_Ω vom Rang zwei im Ortsraum sein muss.

Durch unsere allgemein formulierten Voraussetzungen können wir schließen, dass g_Ω auch ein Rang–2–Tensor im Spinraum sein muss, weil dies die einzige Möglichkeit ist, wie beide Teile zu einem Skalaroperator unter der vollen Drehgruppe verbunden werden können. Es gibt nur einen solchen Operator im Zweiteilchenspinraum:

$$s_q^{(2)} = \{s^{(1)} s^{(1)}\}_q^{(2)}, \quad (1.23)$$

wobei

$$s_q^{(1)} = \frac{1}{2}(\sigma^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \sigma^{(1)}). \quad (1.24)$$

Die gleiche Argumentation trifft auch auf den Tensoroperator s_{12} zu, und deshalb hat g_Ω eine ähnliche Struktur.

Man muss jetzt noch dem Ortsraumteil spezifizieren, und hier werden die durch den Generator g_Ω erzeugten Verschiebungen so eingeschränkt, dass sie senkrecht zu den radialen, durch g_r erzeugten Verschiebungen erfolgen. Daher verwendet man den Bahn–Impuls–Operator

$$\mathbf{q}_\Omega = \frac{1}{2r}(\mathbf{1} \times \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{1}), \quad (1.25)$$

um den hermiteschen Tensoroperator

$$s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega) = \frac{3}{2} \{ (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{q}_\Omega) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{q}_\Omega)(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) \}, \quad (1.26)$$

zu konstruieren. Damit erhält man den Generator

$$g_\Omega = \vartheta(r) s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega). \quad (1.27)$$

Dass durch g_Ω die relative Radialwellenfunktion nicht beeinflusst wird, kann aus den Eigenschaften von \mathbf{q}_Ω und \mathbf{r} leicht abgeleitet werden, denn beide kommutieren mit beliebigen Funktionen von r .

Ähnlich wie im Fall der Zentralkorrelationen, wo letztere durch die Korrelationsfunktion charakterisiert werden, kann man eine entsprechend angepasste Korrelationsfunktion für die Tensorkorrelationen einführen. Die Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$ kann verwendet werden, um die Stärke des Tensorkorrelators zu regulieren.

Die Wirkung des Tensorkorrelators auf Drehimpulseigenzustände kann aus seinen Matrixelementen hergeleitet werden. Mit Hilfe des Wigner–Eckart–Theorems [11] erhält man die folgende Relation:

$$\begin{aligned} \langle (L'S')J'M' | s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega) | (LS)JM \rangle &= \\ &= \delta_{SS'} \delta_{MM'} \delta_{JJ'} \frac{\langle (L'S)J || s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega) || (LS)J \rangle}{\sqrt{2J'+1}}, \end{aligned} \quad (1.28)$$

wobei

$$\begin{aligned} \langle (L'S)J || s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega) || (LS)J \rangle &= \\ &= 3i\sqrt{J(J+1)(2J+1)}(\delta_{L'J+1}\delta_{LJ-1} - \delta_{L'J-1}\delta_{LJ+1})\delta_{S1} \end{aligned} \quad (1.29)$$

die reduzierten Matrixelemente sind. Für die resultierenden 2×2 -Matrizen in jedem J -Unterraum findet man:

$$\begin{aligned} c_\Omega | (J \mp 1, 1)JM \rangle &= \\ &= \cos(\theta^{(J)}(r)) | (J \mp 1, 1)JM \rangle \pm \sin(\theta^{(J)}(r)) | (J \pm 1, 1)JM \rangle, \end{aligned} \quad (1.30)$$

mit der Abkürzung

$$\theta^{(J)}(r) \equiv 3\sqrt{J(J+1)} \vartheta(r). \quad (1.31)$$

Für alle anderen Zustände wird der Tensorkorrelator zum Einheitsoperator.

In Abb. 1.3 sind die Wirkungen von Zentral- und Tensorkorrelator auf einen Versuchszustand zusammengefasst.

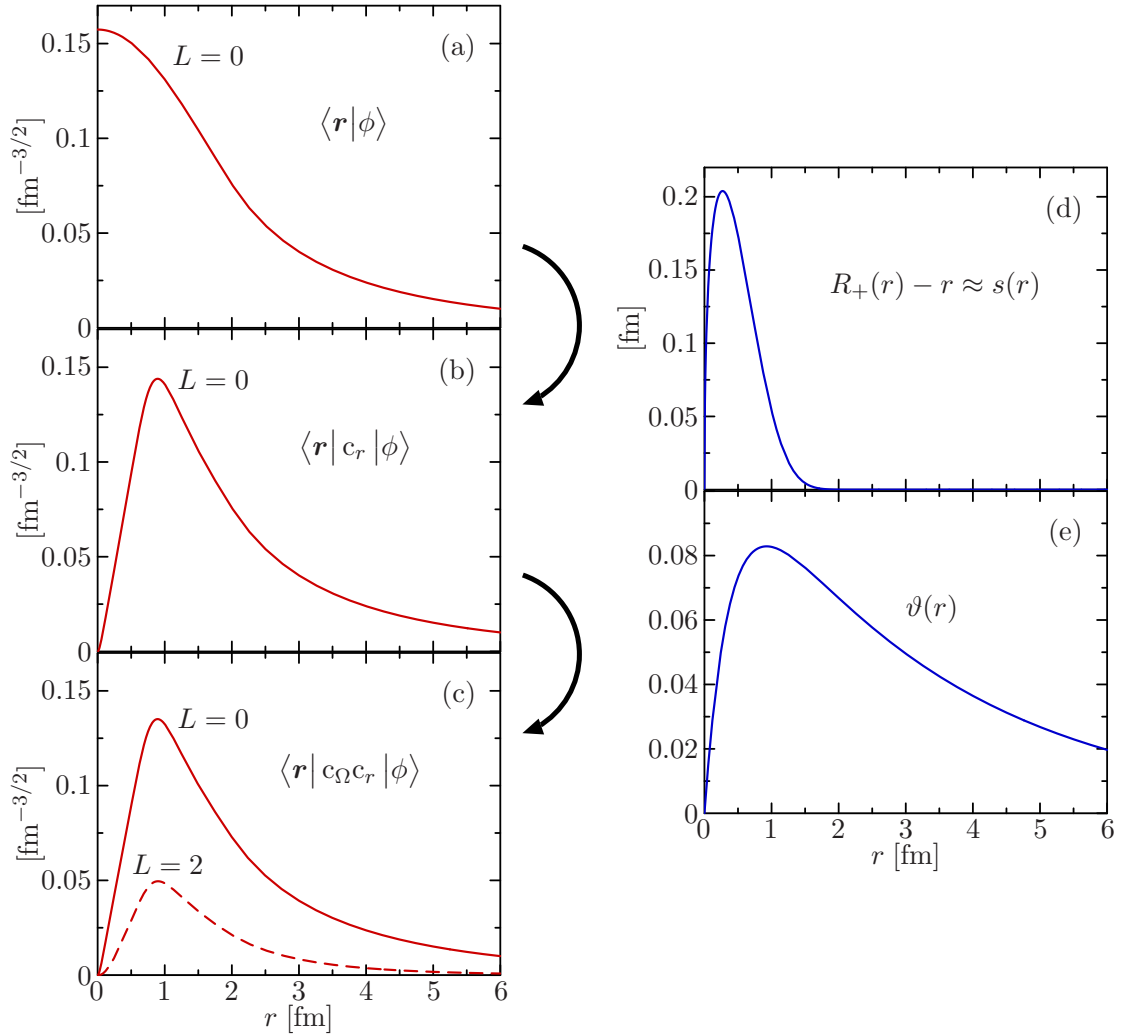


Abbildung 1.3: Konstruktion von Deuteron Wellenfunktion für Argonne-V18-Potential. Wir starten bei der unkorrelierten Wellenfunktion auf der Abbildung (a). Anwendung des Zentralkorrelators mit der Korrelationsfunktion $R_+(r)$, die in (d) abgebildet ist, führt zur zentral-korrelierten Wellenfunktion im Bild (b). Durch Anwendung des Tensor-korrelators mit der im Bild (e) gezeigten Korrelationsfunktion erhält man die vollständig korrelierte Wellenfunktion in Abbildung (c). Diese Wellenfunktion enthält eine $L = 2$ (D -Welle) Beimischung und stellt somit eine realistische Deuteron-Wellenfunktion dar.

1.3 Korrelierte Operatoren

1.3.1 Clusterentwicklung

Die Clusterentwicklung vereinfacht auf natürliche Weise die Berechnung der korrelierten Operatoren [2]. Bei der Clusterzerlegung geht es darum, die Teilchen in unabhängige Teilsysteme zu unterteilen. Damit eine solche Zerlegung gerechtfertigt werden kann, wird gefordert, dass die Abstände zwischen benachbarten Cluster wesentlich größer als die Reichweite der Wechselwirkung sind. Somit wechselwirkt ein Teilchen nur mit Teilchen aus dem gleichen Cluster.

Formal gesehen separiert der Zustand des Vielteilchensystems in ein direktes Produkt der Zustände der Cluster. Das vereinfacht die Anwendung der Methode der Unitären Korrelatoren, denn für ein in nichtwechselwirkende Cluster aufgespaltenes System muss auch der Korrelationsoperator in ein direktes Produkt der Korrelationsoperatoren der Teilsysteme zerfallen. Daher gilt für den korrelierten Zustand [4]:

$$C_A |\Psi, A\rangle \rightarrow C_n |\Psi_n, n\rangle \otimes C_{A-n} |\Psi_{A-n}, A-n\rangle. \quad (1.32)$$

Damit keine Korrelationen für Abstände jenseits der Wechselwirkungsreichweite vorkommen, müssen die irreduziblen Generatoren $G^{[k]}(i_1, \dots, i_k)$ verschwinden, sobald sich eines der Teilchen (i_1, \dots, i_k) außerhalb der Wechselwirkungsreichweite befindet. Daher müssen die korrelierten Operatoren dem Clusterzerlegungsprinzip genügen, in gleicher Weise wie der Korrelator selbst, und deshalb kann man den korrelierten Operator in irreduzible Beiträge zu allen Teilchenzahlen bis zur Gesamtteilchenzahl A zerlegen

$$\tilde{O} = C^\dagger O C = \sum_{i=1}^A \tilde{O}^{[i]}. \quad (1.33)$$

Der Operator $\tilde{O}^{[i]}$ ist ein irreduzibler i -Teilchenoperator und wird rekursiv definiert:

$$\tilde{O}^{[1]} = \sum_{k, k'} \langle k | C^\dagger O C | k' \rangle a_k^\dagger a_{k'} = \sum_{k, k'} \langle k | O | k' \rangle a_k^\dagger a_{k'}, \quad (1.34)$$

$$\tilde{O}^{[n]} = \frac{1}{(n!)^2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ k'_1, \dots, k'_n}} a \langle k_1 \dots k_n | C^\dagger O C - \sum_i^{n-1} \tilde{O}^{[i]} | k'_1 \dots k'_n \rangle_a a_{k_1}^\dagger \dots a_{k_n}^\dagger a_{k'_n} \dots a_{k'_1}, \quad (1.35)$$

wobei der Subskript a bei Bra- und Ketvektoren bedeutet, dass die Zustände antisymmetrisiert sind.

In praktischen Anwendungen möchten wir die Rechnungen auf die zweite Clusterordnung einschränken, da die Beiträge dritter Ordnung bereits sehr kompliziert werden.

Diese Näherung wird berechtigt sein, wenn die Dichte des Systems und die Reichweite des Korrelators ausreichend klein ist. Sonst wird die Wahrscheinlichkeit, mehr als zwei Teilchen gleichzeitig innerhalb des Korrelationsvolumens zu finden, zunehmen, und die höheren Ordnungen der Clusterentwicklungen sind nicht mehr vernachlässigbar.

An dieser Stelle führen wir die folgende Notation für die Zweiteilchennäherung ein:

$$[C^\dagger OC]^{C2} = \tilde{O}^{[1]} + \tilde{O}^{[2]} . \quad (1.36)$$

1.3.2 Zentralkorrelationen

Allgemein ist es sinnvoll, die Zustände zu korrelieren, wenn man mit einer Basis aus Drehimpulseigenzuständen arbeitet, da man über Gleichung (1.30) die Tensorkorrelationen exakt² behandeln kann. Hat man keine Basis aus Drehimpulseigenzuständen, so korreliert man die Operatoren, weil ansonsten beim Korrelieren der Zustände auf Schwierigkeiten stößt.

Wir werden sehen, dass das Korrelieren von Operatoren neben der Zweiteilchennäherung weitere Näherungen erfordert und daher genauerer Betrachtung bedarf.

Der korrelierte Hamiltonian in der zweiten Clusterordnung ist durch

$$\tilde{H}^{C2} = \tilde{T}^{[1]} + \tilde{T}^{[2]} + \tilde{V}^{[2]} = \sum_i \tilde{t}_i^{[1]} + \sum_{i<j} \tilde{t}_{ij}^{[2]} + \sum_{i<j} \tilde{v}_{ij}^{[2]} \quad (1.37)$$

gegeben, wobei die Indizes über alle Nukleonen laufen und $o_{i_1, \dots, i_k}^{[k]}$ einen irreduziblen k -Teilchenoperator bezeichnet, welcher in dem Unterraum $\mathcal{H}_{i_1, \dots, i_k} \subseteq \mathcal{H}_A$ definiert ist.

Im Zweiteilchenraum sind für die korrelierte kinetische Energie nur Ein- und Zweiteilchenoperatoren von Bedeutung. Der korrelierte Einteilchenoperator ist identisch mit der unkorrelierten kinetischen Energie, weil g_r in (1.7) ein Zweiteilchenoperator ist und das Ergebnis von (1.2) nur Terme ab Rang zwei enthält:

$$\tilde{t}^{[1]} = c_r^\dagger t^{[1]} c_r = t^{[1]} . \quad (1.38)$$

Für die Berechnung des Zweiteilchenbeitrags der korrelierten kinetischen Energie benutzen wir das Schwerpunktskoordinatensystem.

²im Rahmen der Zweiteilchennäherung

Die kinetische Energie im Zweiteilchenraum ist die Summe der kinetischen Energie t_{cm} des Schwerpunktes und der kinetischen Energie der Relativbewegung. Da die Schwerpunktsbewegung von den Korrelationen nicht beeinflusst wird, ist hier nur der relative Anteil der kinetischen Energie relevant:

$$t_{\text{rel}} = t_r + t_{\Omega} = \frac{q_r^2}{m_N} + \frac{\mathbf{l}^2}{m_N r^2}. \quad (1.39)$$

Der korrelierte radiale Anteil der kinetischen Energie enthält eine impulsabhängige Wechselwirkung

$$\tilde{t}_r^{[2]} = c_r^\dagger t_r c_r - t_r = \frac{1}{2} \left(q_r^2 \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(r)} + \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(r)} q_r^2 \right) + \tilde{w}(r) \quad (1.40)$$

ähnlich der kinetischen Energie, aber mit einer *korrelierten radialen Masse*,

$$\frac{1}{2\tilde{\mu}_r(r)} = \frac{1}{m_N} \left(\frac{1}{|R'_+(r)|^2} - 1 \right), \quad (1.41)$$

und einem zusätzlichen lokalen Potential

$$\tilde{w}(r) = \frac{1}{m_N} \left(\frac{7R''_+(r)^2}{4R'_+(r)^4} - \frac{R'''_+(r)}{2R'_+(r)^3} \right). \quad (1.42)$$

Die Anwendung des Korrelators auf den winkelabhängigen Anteil der kinetischen Energie ergibt

$$\tilde{t}_{\Omega}^{[2]} = c_r^\dagger t_{\Omega} c_r - t_{\Omega} = \frac{1}{2\tilde{\mu}_{\Omega}(r)} \frac{\mathbf{l}^2}{r^2}, \quad (1.43)$$

mit³

$$\frac{1}{2\tilde{\mu}_{\Omega}(r)} = \frac{1}{m_N} \left(\frac{r^2}{R_+^2(r)} - 1 \right). \quad (1.44)$$

Da der radiale Impulsoperator mit den meisten Wechselwirkungsoperatoren kommutiert und nur auf den Betrag von \mathbf{r} wirkt, reduziert sich die Anwendung des Zentralkorrelators auf eine einfache Transformation der Radialabhängigkeit des Potentials:

$$\tilde{v}^i = c_r^\dagger v^i c_r = v^i(R_+(r)) o_i. \quad (1.45)$$

³Die Faktoren $-1/m_N$ in den *korrelierten Massen* (1.41) und (1.44) treten durch die Subtraktion der unkorrelierten kinetischen Energie auf.

1.3.3 Zentral- und Tensorkorrelationen

Die Unitaritat der Korrelationsoperatoren erleichtert die Konstruktion von korrelierten Potentialen. Der Korrelationsoperator wird entsprechend (1.4) durch den Generator spezifiziert. Wenden wir die Tensorkorrelation auf ein beliebigen Zweiteilchenoperator o , so bekommen wir

$$c_{\Omega}^{\dagger} o c_{\Omega} = e^{i g_{\Omega}} o e^{-i g_{\Omega}} . \quad (1.46)$$

Die Gleichung (1.46) kann mit Hilfe der Baker–Campbell–Hausdorff Formel [18]

$$e^{i g_{\Omega}} o e^{-i g_{\Omega}} = o + i[g, o] + \frac{i^2}{2}[g_{\Omega}, [g, o]] + \dots \equiv e^{L_{\Omega}} o \quad (1.47)$$

berechnet werden. Dabei wird der Superoperator L_{Ω} eingeführt:

$$L_{\Omega} \equiv i[g_{\Omega}, o] . \quad (1.48)$$

Für r und q_r bricht die Reihe (1.47) ab, und man erhalt

$$c_{\Omega}^{\dagger} r c_{\Omega} = r \quad (1.49)$$

und

$$c_{\Omega}^{\dagger} q_r c_{\Omega} = q_r - \vartheta'(r) s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_{\Omega}) . \quad (1.50)$$

Aus (1.50) folgt sofort der tensor-korrelierte Operator

$$\begin{aligned} c_{\Omega}^{\dagger} q_r^2 c_{\Omega} &= q_r^2 - (q_r \vartheta'(r) + \vartheta'(r) q_r) + \vartheta'(r)^2 s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_{\Omega})^2 \\ &= q_r^2 - (q_r \vartheta'(r) + \vartheta'(r) q_r) + \vartheta'(r)^2 \left((18 + 6\mathbf{l}^2) \Pi_1 + \frac{45}{2} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + \frac{3}{2} s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}) \right) . \end{aligned} \quad (1.51)$$

Leider sind dies die einzigen einfachen Falle, die sich analytisch berechnen lassen. Die algebraischen Beziehungen zwischen $s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ und den nichtradialen Teilen der Wechselwirkung wie \mathbf{l}^2 oder $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ erzeugen zunehmende Potenzen der Drehimpuls- und Tensoroperatoren [3, 15]. Als Beispiel sei der $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ -Operator erwahnt:

$$[s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}), \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}] = -i(2\mathbf{r}^2 s_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) + s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}) - \frac{1}{2} s_{12}) \equiv -i \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) \quad (1.52)$$

mit

$$s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}) \equiv \frac{3}{2} ((\sigma_1 \cdot \mathbf{l})(\sigma_2 \cdot \mathbf{l}) + (\sigma_2 \cdot \mathbf{l})(\sigma_1 \cdot \mathbf{l})) - (\sigma_1 \cdot \sigma_2) \mathbf{l}^2 \quad (1.53)$$

und

$$s_{12}(\mathbf{q}_\Omega, \mathbf{q}_\Omega) \equiv \frac{3}{2}((\sigma_1 \cdot \mathbf{q}_\Omega)(\sigma_2 \cdot \mathbf{q}_\Omega) + (\sigma_2 \cdot \mathbf{q}_\Omega)(\sigma_1 \cdot \mathbf{q}_\Omega)) - (\sigma_1 \cdot \sigma_2) \mathbf{q}_\Omega^2. \quad (1.54)$$

Wenn wir vollständig korrelierte Operatoren in Rechnungen benutzen wollen, müssen wir die Reihe nach einer gewissen Ordnung abbrechen. Entsprechende Vorschriften sind in [3] und [15] zu finden (vergleiche auch Kapitel 2).

Kapitel 2

Korrelierte Matrixelemente

2.1 Korreliertes Nukleon–Nukleon–Potential

2.1.1 Argonne–V18–Potential

Als Ausgangspunkt für unsere Berechnungen wählen wir das Argonne–V18–Potential [14], das wir schon im Kapitel 1 erwähnt haben. Das Argonne–V18–Potential ist ein lokales Potential und besteht aus drei Hauptteilen:

- lokalen OPE–Potential (*one pion exchange*),
- phänomenologische Parametrisierung des mittel- und kurzreichweitigen Teils, und
- elektromagnetischer Kraft der Nijmegen–Gruppe

Mit dieser Unterteilung können wir schreiben

$$v_{AV18} \equiv v = v_{\pi} + v_{sr} + v_{em} . \quad (2.1)$$

Das Potential kann durch 18 Operatoren dargestellt werden. Wir benutzen hier eine vereinfachte Version, die die Ladungsabhängigkeit der Wechselwirkung nicht berücksichtigt und eine einfache Darstellung in ST –Kanälen erlaubt. Den ladungsunabhängigen Teil des Argonne–V18–Potentials schreiben wir mit fünf Summanden

$$v = \sum_{ST} v_{ST}^{c,CI}(\mathbf{r}) \Pi_{ST} + \sum_T v_{1T}^{t,CI}(\mathbf{r}) s_{12} \Pi_{1T} + \sum_{ST} v_{ST}^{l^2}(\mathbf{r}) \mathbf{l}^2 \Pi_{ST} \\ + \sum_T v_{1T}^{ls}(\mathbf{r}) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \Pi_{1T} + \sum_T v_{1T}^{(ls)^2}(\mathbf{r}) (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})^2 \Pi_{1T} , \quad (2.2)$$

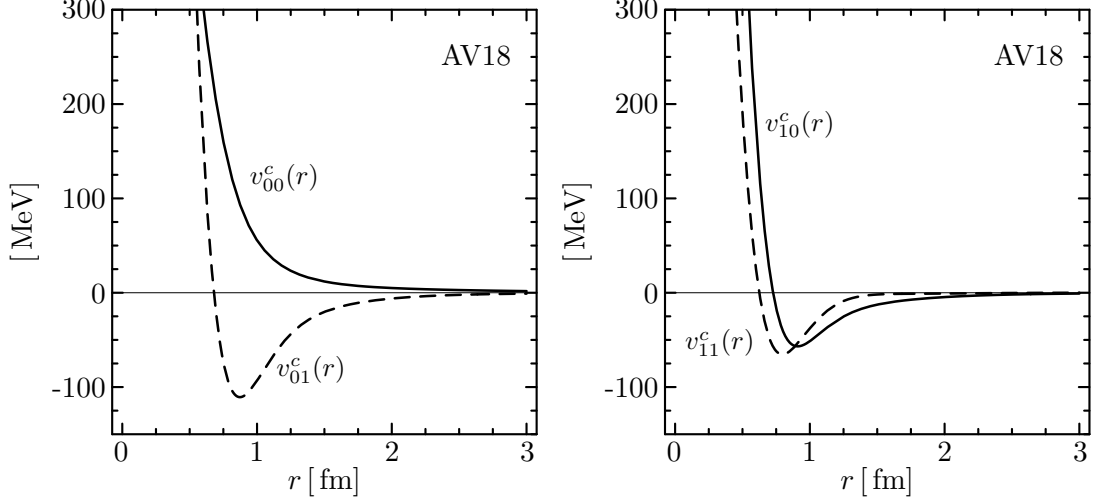


Abbildung 2.1: Radiale Abhängigkeiten $v_{ST}^c(r)$ der Zentralterme des Argonne-V18-Potentials. Die Plots sind der Arbeit [15] entnommen.

wobei

$$v_{ST}^{i,CI}(r) = \begin{cases} \frac{1}{3}(v_{S1,pp}^i(r) + v_{S1,nn}^i(r) + v_{S1,np}^i(r)) & \text{für } T = 1 \\ v_{ST}^i(r) & \text{für } T = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

mit $i = c$ für den Zentral- und $i = t$ für den Tensoranteil [14]. Die Radialabhängigkeiten des AV18 Potentials sind in den Abbildungen 2.1 und 2.2 gezeigt.

2.1.2 Korreliertes Argonne-V18-Potential – V_{ucom}

Nuklearer Hamiltonoperator

Um die korrelierte Wechselwirkung zu erhalten, wenden wir die Methode der unitären Korrelatoren auf das Argonne-V18-Potential an. Die geschlossene Operatordarstellung des AV18 erleichtert den Gebrauch des UCOM Formalismus. Der Startpunkt ist ein unkorrelierter Hamiltonian für das A -Teilchensystem

$$H = T + V = \sum_{i=1}^A \frac{1}{2m_N} \mathbf{k}_i^2 + \sum_{i>j=1}^A v_{ij} . \quad (2.4)$$

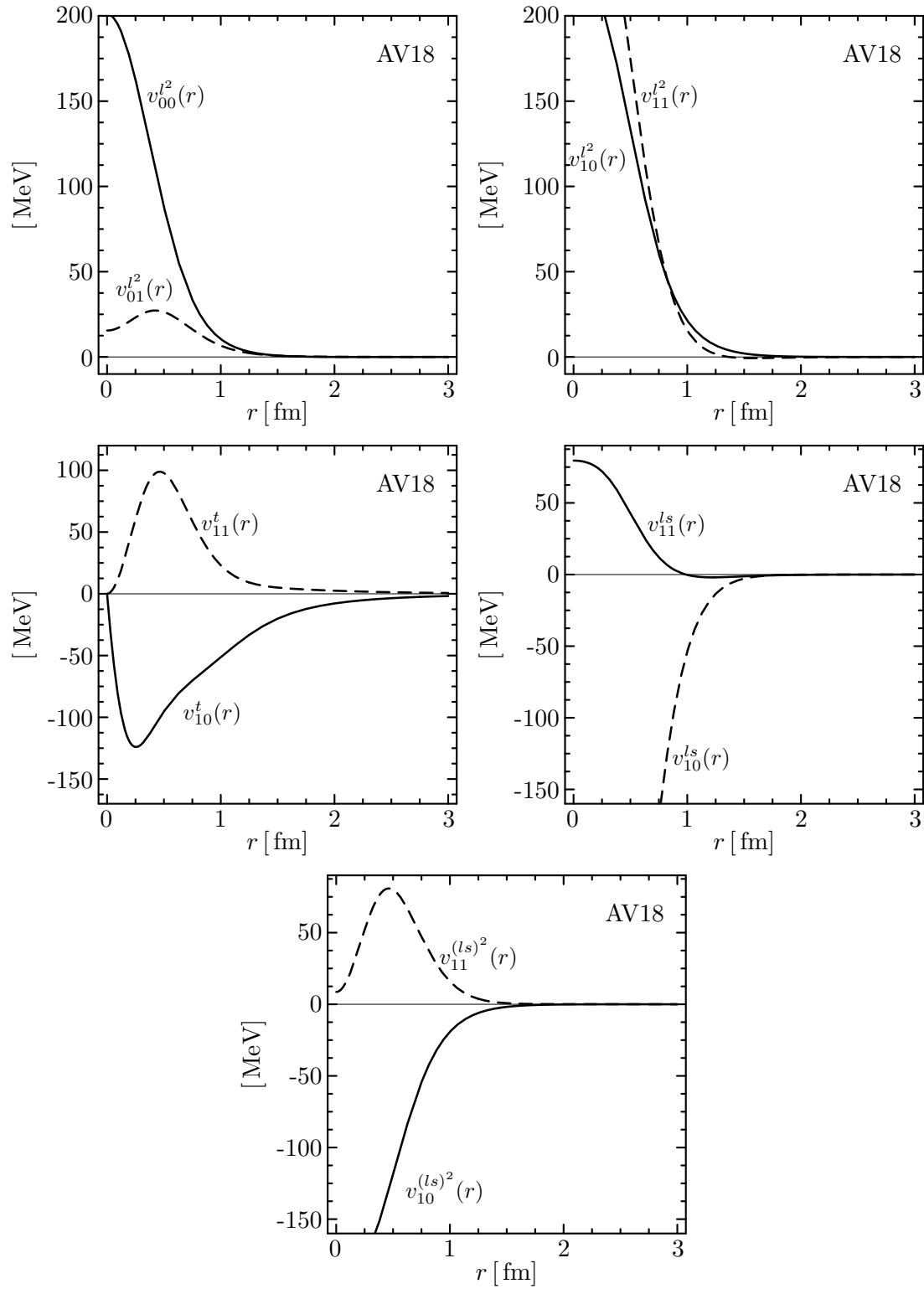


Abbildung 2.2: Radiale Abhängigkeiten der nichtzentralen Terme des Argonne-V18-Potentials. Die Plots stammen aus [15].

Die ladungsunabhängigen Terme des Argonne–V18–Potentials haben (ausgehend von der Gleichung (2.2)) folgende Operatorstruktur

$$v_{\text{AV18}} = \sum_{S,T} [v_{ST}^c(\mathbf{r}) + v_{ST}^{l2}(\mathbf{r})\mathbf{I}^2] \Pi_{ST} + \sum_T [v_T^t(\mathbf{r}) + v_T^{ls}(\mathbf{r})(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}) + v_T^{ls2}(\mathbf{r})(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s})^2] \Pi_{1T} . \quad (2.5)$$

Der quadratische Spin–Bahn–Term kann in

$$(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s})^2 = \frac{2}{3}\mathbf{I}^2\Pi_1 - \frac{1}{2}(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}) + \frac{1}{6}s_{12}(\mathbf{I}, \mathbf{I}) \quad (2.6)$$

umgeschrieben werden mit

$$s_{12}(\mathbf{I}, \mathbf{I}) = \frac{3}{2}[(\sigma_1 \cdot \mathbf{I})(\sigma_2 \cdot \mathbf{I}) + (\sigma_2 \cdot \mathbf{I})(\sigma_1 \cdot \mathbf{I})] - (\sigma_1 \cdot \sigma_2)\mathbf{I}^2 . \quad (2.7)$$

Nun müssen wir diesen Hamiltonoperator (2.4) korrelieren, was wir in zwei Teilschritte gliedern:

$$\tilde{\text{H}} = \text{C}^\dagger \text{H C} = \text{C}_r^\dagger \text{C}_\Omega^\dagger \text{H C}_\Omega \text{C}_r = \text{C}_r^\dagger \left(\text{C}_\Omega^\dagger \text{H C}_\Omega \right) \text{C}_r . \quad (2.8)$$

Zuerst wird der Tensorkorrelator angewandt und anschließend der Zentralkorrelator.

Konstruktion des tensorkorrelierten Hamiltonoperator

Der erste Schritt, um den korrelierten Hamiltonian in Zweiteilchennäherung zu konstruieren, ist die Anwendung des Tensorkorrelator $c = \exp(-ig_\Omega)$ im Zweiteilchenraum. Dafür benutzt man die Baker–Campbell–Hausdorff–Entwicklung

$$c_\Omega^\dagger o c_\Omega = e^{ig_\Omega} o e^{-ig_\Omega} = o + i[g_\Omega, o] + \frac{i^2}{2}[g_\Omega, [g_\Omega, o]] + \dots . \quad (2.9)$$

Zuerst untersuchen wir, wie die einzelnen Terme des Argonne–Potentials transformiert werden. Ein minimaler Satz von Operatoren, den wir konstruieren müssen, um die tensorkorrelierte Wechselwirkung zu formulieren, ist durch die Operatoren

$$\{r, q_r^2, \mathbf{I}^2, (\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}), s_{12}, s_{12}(\mathbf{I}, \mathbf{I})\} \quad (2.10)$$

gegeben. Da r mit c_Ω kommutiert, gilt

$$c_\Omega^\dagger r c_\Omega = r . \quad (2.11)$$

Für den radialen Anteil des Impulses q_r^2 bricht die Baker–Campbell–Hausdorff Reihe schon nach der zweiten Ordnung ab (vgl. (1.51)), weshalb man einen geschlossenen Ausdruck für den tensorkorrelierten Operator erhält

$$c_\Omega^\dagger q_r^2 c_\Omega = q_r^2 - [\vartheta'(r)q_r + q_r\vartheta'(r)]s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega) + [\vartheta'(r)s_2(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega)]^2 . \quad (2.12)$$

Alle anderen grundlegenden Operatoren verlangen die Auswertung der vollen Baker–Campbell–Hausdorff Reihe. Dazu werden hier einige Kommutatorrelationen aufgelistet (siehe [3, 15])

$$[g_{\Omega}, s_{12}] = i\vartheta(r)[-24 \Pi_1 - 18 (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + 3 s_{12}] , \quad (2.13)$$

$$[g_{\Omega}, (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})] = i\vartheta(r)[- \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})] , \quad (2.14)$$

$$[g_{\Omega}, \mathbf{l}^2] = i\vartheta(r)[2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})] , \quad (2.15)$$

$$[g_{\Omega}, s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l})] = i\vartheta(r)[7 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})] , \quad (2.16)$$

wobei die Kurznotation

$$\bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) = 2r^2 s_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) + s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}) - \frac{1}{2} s_{12} \quad (2.17)$$

eingeführt wurde.

Zusätzlich zum ursprünglichen Satz von Operatoren wird ein neuer Tensoroperator, der zwei Impulsoperatoren enthält, erzeugt

$$s_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) = \frac{3}{2} [(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{q}_{\Omega})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{q}_{\Omega}) + (\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{q}_{\Omega})(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{q}_{\Omega})] - (\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2) \mathbf{q}_{\Omega}^2 . \quad (2.18)$$

Für die Berechnung der zweiten Ordnung in der Reihe (2.9) ist ein weiterer Kommutator nötig:

$$[g_{\Omega}, \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega})] = i\vartheta(r) [(108 + 96 \mathbf{l}^2) \Pi_1 + (153 + 36 \mathbf{l}^2)(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + 15 s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l})] . \quad (2.19)$$

Der Kommutator des neu erzeugten Operators $\mathbf{l}^2(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})$ mit dem Generator ist

$$[g_{\Omega}, \mathbf{l}^2(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})] = i\vartheta(r) \left[-3 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) - \{ \mathbf{l}^2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) \}_H \right] . \quad (2.20)$$

Dabei tritt

$$\{ \mathbf{l}^2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) \}_H = \frac{1}{2} (\mathbf{l}^2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) + \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) \mathbf{l}^2) , \quad (2.21)$$

erstmalig in der 3. Ordnung der Baker–Campbell–Hausdorff Reihe auf. Die Schreibweise $\{ \dots \}_H$ deutet an, dass die eingeklammerten Operatoren explizit zu hermitisieren sind. In der vierten Ordnung der Entwicklung entsteht

$$\begin{aligned} [g_{\Omega}, \{ \mathbf{l}^2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_{\Omega}, \mathbf{q}_{\Omega}) \}_H] &= i\vartheta(r) [324 \Pi_1 + 477 (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + 600 \mathbf{l}^2 + 51 s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}) \\ &\quad + 477 \mathbf{l}^2(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + 144 \mathbf{l}^4 + 27 \mathbf{l}^2 s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}) + 36 \mathbf{l}^4(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})] . \end{aligned} \quad (2.22)$$

Es ist offensichtlich, dass mit zunehmender Ordnung der Baker–Campbell–Hausdorff–Entwicklung zunehmende Potenzen des Drehimpulses \mathbf{l} auftreten. Die letzten drei Terme in (2.22) sind bereits von der vierten Ordnung in \mathbf{l} .

Im folgenden, werden wir Beiträge jenseits der dritten Ordnung im Drehimpuls vernachlässigen. So bekommen wir folgenden Satz von Operatoren:

$$\{ \mathbf{r}, \mathbf{q}_r^2, \mathbf{l}^2, (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}), s_{12}, s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}), \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_\Omega, \mathbf{q}_\Omega), \\ \mathbf{q}_r s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega), \{ \mathbf{l}^2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_\Omega, \mathbf{q}_\Omega) \}_H, \mathbf{l}^2(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) \} . \quad (2.23)$$

Der Satz (2.23) enthält bereits die für die Transformation der kinetischen Energie relevanten Operatoren. Man kann die kinetische Energie T im Zweiteilchenraum in einen relativen, t_{rel} , und ein schwerpunktsabhängigen Anteil, t_{cm} , zerlegen, wobei letzterer nicht durch die Korrelationen beeinflusst wird. Der Relativanteil wird weiter in einen radialen und einen winkelabhängigen Term zerlegt:

$$T = t_{\text{cm}} + t_{\text{rel}} = t_{\text{cm}} + \frac{1}{m_N} \left(\mathbf{q}_r^2 + \frac{\mathbf{l}^2}{r^2} \right) . \quad (2.24)$$

Folglich kann die Transformation der kinetischen Energie aus der Transformation der ersten drei Operatoren im Satz (2.23) abgeleitet werden.

Anwendung des Zentralkorrelators

Als zweiter Schritt wendet man, entsprechend der Gleichung (2.8), den zentralen Korrelator auf den schon mit dem Tensorkorrelator transformierten Hamiltonian an. Die Anwendung des Zentralkorrelators c_r auf die tensor-korrelierten Terme des Hamiltonian ist technisch einfach. Im Abschnitt 1.2.1 wurde gezeigt, dass der Zentralkorrelator wie eine normerhaltende Transformation der Relativkoordinate wirkt. Wenn man diese Transformationseigenschaften in der Ortsdarstellung verwendet, dann kann man den Ausdruck für den zentralkorrelierten Operator in Zweiteilchennäherung sofort ableiten. Die Auswertung der Baker–Campbell–Hausdorff Reihe für den Zentralkorrelator ist nicht erforderlich.

Die Anwendung des Zentralkorrelationsoperators c_r auf den Abstandssoperator \mathbf{r} entspricht der Koordinatentransformation

$$c_r^\dagger \mathbf{r} c_r = R_+(\mathbf{r}) . \quad (2.25)$$

Die Funktion $R_+(r)$ ist die Korrelationsfunktion aus Abschnitt 1.1.2 und wurde durch (1.8) definiert. Durch diese Funktion wird jetzt jeder im Hamiltonian auftretende Operator r ersetzt, was einem transformierten r -Operator entspricht. Diese Ersetzung betrifft alle radialen Abhängigkeiten der Wechselwirkung

$$c_r^\dagger v(r) c_r = v(R_+(r)) . \quad (2.26)$$

Die Komponenten des Impulsoperators \mathbf{q} werden wie folgt durch den Zentralkorrelator transformiert:

$$c_r^\dagger \mathbf{q}_r c_r = \frac{1}{\sqrt{R'_+(r)}} \mathbf{q}_r \frac{1}{\sqrt{R'_+(r)}} \quad (2.27)$$

und

$$c_r^\dagger \mathbf{q}_\Omega c_r = \frac{\mathbf{r}}{R_+(r)} \mathbf{q}_\Omega . \quad (2.28)$$

Für das Quadrat des radialen Anteils des Impulsoperators \mathbf{q}_r^2 , der im tensorkorrelierten Potential sowie in der kinetischen Energie (2.24) erscheint, gilt

$$c_r^\dagger \mathbf{q}_r^2 c_r = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{[R'_+(r)]^2} \mathbf{q}_r^2 + \mathbf{q}_r^2 \frac{1}{[R'_+(r)]^2} \right\} + \frac{7 [R''_+(r)]^2}{4 [R'_+(r)]^4} - \frac{1}{2} \frac{R'''_+(r)}{[R'_+(r)]^3} . \quad (2.29)$$

Wie im Abschnitt 1.3.2 erwähnt, erzeugt die Transformation zusätzlich zu den impulsabhängigen Termen ein lokales Potential.

Alle grundlegenden Operatoren, die nur auf den winkelabhängigen Teil der Zweiteilchenwellenfunktion wirken, sind invariant unter der Wirkung des Zentralkorrelators, z.B.

$$c_r^\dagger \mathbf{1} c_r = \mathbf{1} \quad (2.30)$$

und

$$c_r^\dagger \frac{\mathbf{r}}{r} c_r = \frac{\mathbf{r}}{r} . \quad (2.31)$$

Die Form beliebiger zentralkorrelierter Operatoren kann man unter Ausnutzung der Unitarität der Korrelationsoperatoren aus den oben angegebenen elementaren Beziehungen ableiten. Von den Operatoren in (2.23) werden

$$\mathbf{l}^2, (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}), s_{12}, s_{12}(\mathbf{l}, \mathbf{l}), \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_\Omega, \mathbf{q}_\Omega), \{\mathbf{l}^2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_\Omega, \mathbf{q}_\Omega)\}_H, \mathbf{l}^2(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) \quad (2.32)$$

nicht durch die Anwendung des Zentralkorrelators beeinflusst.

2.1.3 Optimale Korrelationsfunktionen

Unser Ziel ist es, einen optimalen Satz zustandsunabhängiger Korrelationsfunktionen zu finden. Dieser Satz definiert die korrelierte Wechselwirkung V_{UCOM} vollständig, und hängt natürlich von dem verwendeten Ausgangspotential ab.

Für die Konstruktion der Korrelationsfunktionen muss man die Kurzreichweitigen von den Langreichweitigen Effekten trennen. Das ist ein besonderes Problem für den Tensor-korrelator im $ST = 10$ -Kanal. Die langreichweitige Korrelationsfunktion $\vartheta(r)$ (siehe die Abbildung 2.3) ist für ein Vielteilchensystem nicht angemessen.

Zum einen erlaubt sie keine Zweiteilchennäherung, zum anderen werden die langreichweitigen Tensorkorrelationen eines Paares von Nukleonen durch die Wechselwirkung mit anderen Nukleonen abgeschirmt. Man beschränkt deshalb die Tensorkorrelationsfunktionen auf kurze Reichweiten. Die langreichweitigen Tensorkorrelationen, die nicht durch den kurzreichweitigen Korrelator berücksichtigt werden, müssen durch die Freiheitsgrade der Vielteilchenzustände beschrieben werden.

Die Zentralkorrelationen sind automatisch kurzreichweitig, da der stark abstoßende Core, der sie verursacht, selbst kurzreichweitig ist.

Die Zweiteilchennäherung ist nur gültig, solange die Korrelationsreichweite im Vergleich zu den Abständen zwischen den Teilchen klein ist. In diesem Fall ist die Wahrscheinlichkeit klein, drei Nukleonen innerhalb der Reichweite des Korrelator zu finden, und die höheren Ordnungen der Clusterentwicklung können vernachlässigt werden.

Verschiedene Methoden für die Konstruktion der optimalen Korrelationsfunktionen wurden im Detail in [3, 4] besprochen. Wir verwenden hier lediglich eine Energieminimierung im Zweiteilchensystem unter Verwendung einer einfachen Parametrisierung für die Zentral- und Tensorkorrelationsfunktionen. Für die Korrelationsfunktionen $R_+(r)$ in den vier möglichen ST -Kanälen benutzen wir eine der beiden Formen:

$$R_+^A(r) = r + \alpha (r/\beta)^\eta \exp[-\exp(r/\beta)] , \quad (2.33)$$

$$R_+^B(r) = r + \alpha \left(1 - \exp[-(r/\gamma)^\eta]\right) \exp[-(r/\beta)] . \quad (2.34)$$

Für die Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$ in den beiden $S = 1$ -Kanäle wird eine der folgenden Parametrisierungen verwendet:

$$\vartheta^A(r) = \alpha \left(1 - \exp[-(r/\gamma)^\eta]\right) \exp[-\exp(r/\beta)] , \quad (2.35)$$

$$\vartheta^B(r) = \alpha \left(1 - \exp[-(r/\gamma)^\eta]\right) \exp[-(r/\beta)] . \quad (2.36)$$

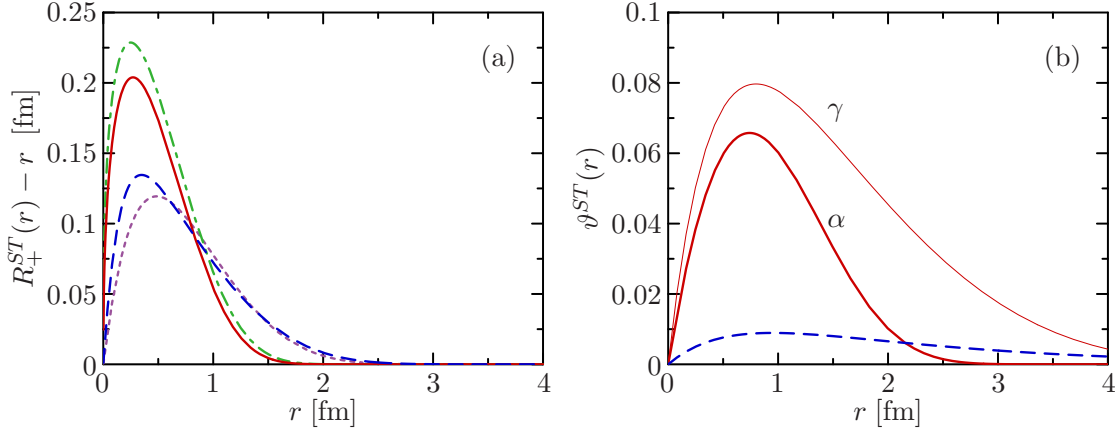


Abbildung 2.3: Optimale zentrale (a) und tensorielle (b) Korrelationsfunktionen für das Argonne–V18–Potential. Die unterschiedlichen Linien zeigen einzelne (S, T) –Kanäle: $(0, 1)$ – (.....), $(1, 0)$ – (—), $(0, 0)$ – (.....), $(1, 1)$ – (---).

Die unkorrelierte Zweiteilchenwellenfunktion ist die freie $E = 0$ –Lösung der Schrödingergleichung mit dem kleinsten Bahndrehimpuls, der für den gegebenen ST –Kanal mit der Antisymmetrie verträglich ist. Die Energieminimierung erfolgt für jeden ST Kanal getrennt.

Die Reichweite der Tensorkorrelators im $ST = 10$ –Kanal wird durch das folgende Integral kontrolliert:

$$\int dr r^2 \vartheta(r) = \begin{cases} 0.1 \text{ fm}^3 & \alpha\text{-Korrelator} \\ 0.2 \text{ fm}^3 & \beta\text{-Korrelator} \\ 0.5 \text{ fm}^3 & \gamma\text{-Korrelator} \end{cases} . \quad (2.37)$$

Abhängig von dieser Einschränkung werden wir uns auf den α -, β -, beziehungsweise γ –Korrelator beziehen.

Die für das Argonne–V18–Potential durch Energieminimierung bestimmten Parameter für die Korrelationsfunktionen sind in [4] zu finden. Für die Details zu diesen Berechnungen sei [3] als Referenz angegeben.

In der Abbildung 2.3 sind die Korrelationsfunktionen dargestellt. Alle zentralen Korrelationsfunktionen $R_+(r) - r$ sind von ähnlicher Reichweite. Für Abstände jenseits $r \approx 1.5$ fm für gerade und $r \approx 2.0$ fm für ungerade Kanäle verschwindet $R_+(r) - r$ und der unitäre Korrelationsoperator wirkt wie ein Identitätsoperator.

2.2 Operatorkorrelierte Matrixelemente

Für die folgenden Untersuchungen zur Zustandsgleichung von Kernmaterie benötigen wir die Matrixelemente der korrelierten Wechselwirkung, oder allgemein korrelierte Matrixelemente, in Impulseigenzuständen. Wir gehen von Zweiteilchenrelativzuständen in LS -Kopplung aus: $|q(LS)JM; TM_T\rangle$. Hierbei ist q der Betrag des Relativimpulses der beiden Nukleonen.

Ein Weg, die korrelierten Matrixelemente zu berechnen, ist die direkte Auswertung der Matrixelemente der korrelierten Wechselwirkung V_{ucom} in Operatorform:

$$\langle q(LS)JM; TM_T | v_{\text{ucom}} | q'(L'S)JM; TM_T \rangle, \quad (2.38)$$

wobei

$$\begin{aligned} v_{\text{ucom}} = & \sum_{s,T} \left[v_{ST}^c(\mathbf{r}) + \{v_{ST}^{qr2}(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r^2\}_{\text{H}} + v_{ST}^{l2}(\mathbf{r}) \mathbf{I}^2 \right] \Pi_{ST} \\ & + \sum_T \left[v_T^{ls}(\mathbf{r}) (\mathbf{1} \cdot \mathbf{s}) + v_T^t(\mathbf{r}) s_{12} + v_T^{tl}(\mathbf{r}) s_{12}(\mathbf{1}, \mathbf{1}) \right. \\ & \quad + v_T^{tqq}(\mathbf{r}) \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_\Omega, \mathbf{q}_\Omega) + v_T^{l2tqq}(\mathbf{r}) \{ \mathbf{I}^2 \bar{s}_{12}(\mathbf{q}_\Omega, \mathbf{q}_\Omega) \}_{\text{H}} \\ & \quad \left. + \{v_T^{qrtrq}(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega)\}_{\text{H}} + v_T^{l2(ls)}(\mathbf{r}) \mathbf{I}^2 (\mathbf{1} \cdot \mathbf{s}) \right] \Pi_{1T}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Wir bezeichnen die auf diese Weise berechneten Matrixelemente als ‘‘operatorkorrelierte Matrixelemente’’. Der Grund für die im Folgenden gemachte Unterscheidung liegt darin, dass zur Konstruktion des korrelierten Wechselwirkungsoperators V_{ucom} eine zusätzliche Näherung, nämlich der Abbruch der Baker–Campbell–Hausdorff–Reihe (2.9), eingeführt werden musste.

Wir können nun die Matrixelemente der einzelnen Terme in (2.39) separat berechnen. Für die lokalen Beiträge schreiben wir allgemein

$$\langle q(LS)JMTM_T | v(\mathbf{r}) \circ | q'(L'S)JMTM_T \rangle \equiv \langle q(LS)JT | v(\mathbf{r}) \circ | q'(L'S)JT \rangle, \quad (2.40)$$

wobei die Projektionsquantenzahlen M und M_T unterdrückt werden. Zur expliziten Berechnung der Matrixelemente in Ortsdarstellung setzen wir die Spektraldarstellung [19]

$$v(\mathbf{r}) = \int dr r^2 \sum_{\substack{L'', S'' \\ J'', T''}} |r(L''S'')J''T''\rangle v(r) \langle r(L''S'')J''T''|. \quad (2.41)$$

ein. Für die Matrixelemente der lokalen Komponenten von V_{ucom} erhalten wir somit

$$\begin{aligned}
& \langle q(LS)JT | v(\mathbf{r}) \circ | q'(L'S)JT \rangle = \\
& = \langle q(LS)JT | \int dr r^2 \sum_{\substack{L'',S'' \\ J'',T''}} | r(L''S'')J''T'' \rangle v(r) \langle r(L''S'')J''T'' | \circ | q'(L'S)JT \rangle \\
& = \int dr r^2 \sum_{\substack{L'',S'' \\ J'',T''}} \langle q(LS)JT | r(L''S'')J''T'' \rangle v(r) \langle r(L''S'')J''T'' | \circ | q'(L'S)JT \rangle ,
\end{aligned} \tag{2.42}$$

wobei

$$\langle q(LS)JT | r(L''S'')J''T'' \rangle = i^L \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_L(qr) \delta_{LL''} \delta_{SS''} \delta_{JJ''} \delta_{TT''} . \tag{2.43}$$

Ist der Operator \circ weder vom Abstandoperator noch von der Radialkomponente des Relativimpulsoperators abhängig, können wir das Matrixelement von \circ getrennt berechnen. Mit (2.43) folgt dann aus (2.42)

$$\langle r(LS)JT | \circ | q'(L'S)JT \rangle \hat{=} (-i)^{L'} \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_{L'}(q'r) \langle (LS)JT | \circ | (L'S)JT \rangle . \tag{2.44}$$

Die numerische Werte der Matrixelementen $\langle (LS)JT | \circ | (L'S)JT \rangle$ für die von uns verwendeten Operatoren (aus dem Satz (2.23)) sind in [3] und [15] gerechnet. Wir beziehen uns auf die Tabellen mit diagonalen und außerdiagonalen Matrixelementen aus der [15], die dort im Anhang (Appendix B) angegeben sind.

Dadurch können wir die Formel für die Matrixelemente im Impulsraum (2.38) auch folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned}
& \langle q(LS)JT | V(\mathbf{r}) \circ | q'(L'S)JT \rangle = \\
& = \frac{2}{\pi} \int dr r^2 j_L(qr) V(r) j_{L'}(q'r) \langle (LS)JT | \circ | (L'S)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{2.45}$$

2.3 Zustandskorrelierte Matrixelemente

Wie schon im Kapitel 1 erwähnt wurde, kann man die Methode der Unitären Korrelationen auf zwei verschiedenen Weisen benutzen: entweder man wendet die Korrelationsoperatoren auf den untersuchten Operator an und bekommt einen neuen korrelierten Operator, oder man wendet den Korrelator auf die Zustände an und erhält einen korrelierten Zustand.

Beide Methoden sind prinzipiell äquivalent, bringen aber unterschiedliche technische Schwierigkeiten mit sich. Weil beim Korrelieren der Operatoren zusätzliche Operatoren erzeugt werden, erscheint die zweite Möglichkeit, die Zustände zu korrelieren und die Operatoren unberührt lassen, zumindest auf den ersten Blick wesentlich eleganter. Allein deswegen macht es Sinn, die Korrelation der Zustände an einem praktischen Beispiel genauer zu betrachten.

In diesem Abschnitt wenden wir dieses Verfahren auf die Berechnung der korrelierten Matrixelemente an. Im Folgenden bezeichnen wir diese Variante als “zustandskorrelierte Matrixelemente”. Da hierbei die Baker–Campbell–Hausdorff–Entwicklung vollkommen umgangen wird, sind die zustandskorrelierten Matrixelemente – im Gegensatz zu den operatorkorrelierten Matrixelementen exakt.

Für die zustandskorrelierten Matrixelemente müssen wir formal das folgende Matrixelement auswerten:

$$\langle q(LS)JT | c_r^\dagger c_\Omega^\dagger v(r) \circ c_\Omega c_r | q'(L'S)JT \rangle . \quad (2.46)$$

Dabei steht $v(r) \circ$ für die einzelnen Terme des unkorrelierten Argonne–V18–Potentials entsprechend der Gleichung (2.5).

Bei der Anwendung der Korrelationsfunktionen auf die LS –gekoppelten Zustände erweist es sich als vorteilhaft, den Tensorkorrelator zuerst anzuwenden. Formal müssen wir dazu Zentral- und Tensorkorrelator ‘vertauschen’, was durch Ausnutzung der Unitarität in folgender Weise geschehen kann:

$$c_\Omega c_r = c_r c_r^\dagger c_\Omega c_r = c_r (c_r^\dagger c_\Omega c_r) . \quad (2.47)$$

Weil g_r mit $s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega)$ kommutiert, lässt sich der zentralkorrelierte Tensorkorrelator in der Gl. (2.47) leicht berechnen:

$$c_r^\dagger c_\Omega c_r = c_r^\dagger e^{-i\vartheta(r)s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega)} c_r = e^{-i\vartheta(R_+(r))s_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_\Omega)} . \quad (2.48)$$

Wiederum bewirken die Zentralkorrelationen nur eine Transformation des Abstandsoperators $r \rightarrow R_+(r)$. Es bietet sich an, auch für die zustandskorrelierten Matrixelemente den Zentralkorrelator weiterhin auf die Operatoren wirken zu lassen und nur den Tensorkorrelator auf die Zustände zu beziehen. Der Übersicht halber unterdrücken wir die Zentralkorrelationen für die folgenden Rechnungen. Sie lassen sich nachträglich durch obige Ersetzung der Abstandsoperatoren leicht ergänzen.

Aus dem Abschnitt 1.2 wissen wir bereits, wie der Tensorkorrelator auf LS -gekoppelte Zustände wirkt, und können deshalb für $L = J - 1$

$$\begin{aligned} c_{\Omega} |q'(J-1, 1)JT\rangle &= \\ &= \cos(\theta_J(r)) |q'(J-1, 1)JT\rangle + \sin(\theta_J(r)) |q'(J+1, 1)JT\rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

und für $L = J + 1$

$$\begin{aligned} c_{\Omega} |q'(J+1, 1)JT\rangle &= \\ &= \cos(\theta_J(r)) |q'(J+1, 1)JT\rangle - \sin(\theta_J(r)) |q'(J-1, 1)JT\rangle \end{aligned} \quad (2.50)$$

schreiben, wobei $\theta_J(r)$ durch

$$\theta_J(r) \equiv 3\sqrt{J(J+1)}\vartheta(r) \quad (2.51)$$

zu verstehen ist.

Auf alle anderen Kombinationen von L , S und J , d.h. für $L = J$, wirkt der Tensorkorrelator wie der Einheitsoperator:

$$c_{\Omega} |q(J, S)JT\rangle = |q(J, S)JT\rangle . \quad (2.52)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (2.49) und (2.50) lassen sich vier nichttriviale Klassen von tensorkorrelierten Matrixelementen identifizieren.

Zwei davon sind diagonal in L , d.h. $L = L'$, z.B.

$$\begin{aligned} &\langle q(J-1, 1)JT | c_{\Omega}^{\dagger} v(r) \circ c_{\Omega} |q'(J-1, 1)JT\rangle \\ &= \langle q(J-1, 1)JT | \cos(\theta_J(r)) v(r) \circ \cos(\theta_J(r)) |q'(J-1, 1)JT\rangle \\ &\quad + \langle q(J-1, 1)JT | \cos(\theta_J(r)) v(r) \circ \sin(\theta_J(r)) |q'(J+1, 1)JT\rangle \\ &\quad + \langle q(J+1, 1)JT | \sin(\theta_J(r)) v(r) \circ \cos(\theta_J(r)) |q'(J-1, 1)JT\rangle \\ &\quad + \langle q(J+1, 1)JT | \sin(\theta_J(r)) v(r) \circ \sin(\theta_J(r)) |q'(J+1, 1)JT\rangle , \end{aligned} \quad (2.53)$$

und zwei sind nicht-diagonal in L , z.B.

$$\begin{aligned} &\langle q(J-1, 1)JT | c_{\Omega}^{\dagger} v(r) \circ c_{\Omega} |q'(J+1, 1)JT\rangle \\ &= \langle q(J-1, 1)JT | \cos(\theta_J(r)) v(r) \circ \cos(\theta_J(r)) |q'(J+1, 1)JT\rangle \\ &\quad - \langle q(J-1, 1)JT | \cos(\theta_J(r)) v(r) \circ \sin(\theta_J(r)) |q'(J-1, 1)JT\rangle \\ &\quad + \langle q(J+1, 1)JT | \sin(\theta_J(r)) v(r) \circ \cos(\theta_J(r)) |q'(J+1, 1)JT\rangle \\ &\quad - \langle q(J+1, 1)JT | \sin(\theta_J(r)) v(r) \circ \sin(\theta_J(r)) |q'(J-1, 1)JT\rangle . \end{aligned} \quad (2.54)$$

Wir bemerken, dass selbst für die diagonalen korrelierten Matrixelemente außerdiagonale Terme beitragen können. Diese Konsequenz der Tensorkorrelationen steht im Zusammenhang mit der Erzeugung zusätzlicher Operatoren bei der Konstruktion des korrelierten Wechselwirkungsoperatoren.

Die allgemeine Formeln für die zustandskorrelierte Matrixelemente sehen wie folgt aus: die Matrixelemente, die in L diagonal sind, lauten

$$\begin{aligned}
& \langle q(J \mp 1, 1)JT | c_{\Omega}^{\dagger} v(\mathbf{r}) \circ c_{\Omega} | q'(J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&= \langle q(J \mp 1, 1)JT | \cos(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \cos(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&\quad \pm \langle q(J \mp 1, 1)JT | \cos(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \sin(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&\quad \pm \langle q(J \pm 1, 1)JT | \sin(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \cos(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&\quad + \langle q(J \pm 1, 1)JT | \sin(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \sin(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \pm 1, 1)JT \rangle ,
\end{aligned} \tag{2.55}$$

und die außerdiagonalen Matrixelemente sehen so aus

$$\begin{aligned}
& \langle q(J \mp 1, 1)JT | c_{\Omega}^{\dagger} v(\mathbf{r}) \circ c_{\Omega} | q'(J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \langle q(J \mp 1, 1)JT | \cos(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \cos(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&\quad \mp \langle q(J \mp 1, 1)JT | \cos(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \sin(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&\quad \pm \langle q(J \pm 1, 1)JT | \sin(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \cos(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&\quad - \langle q(J \pm 1, 1)JT | \sin(\theta_J(\mathbf{r})) v(\mathbf{r}) \circ \sin(\theta_J(\mathbf{r})) | q'(J \mp 1, 1)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{2.56}$$

Wie im vorigen Abschnitt können wir die Matrixelemente für den Radial- und den Operatoranteil getrennt berechnen. Dafür verwenden wir die Spektraldarstellung (2.41) und

Analog folgt für Gleichung (2.56):

$$\begin{aligned}
& \langle q(J \mp 1, 1)JT | c_{\Omega}^{\dagger} v(\mathbf{r}) \circ c_{\Omega} | q'(J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \langle (J \mp 1, 1)JT | o | (J \pm 1, 1)JT \rangle \int dr r^2 \cos^2(\theta_J(r)) j_{J \mp 1}(qr) v(r) j_{J \pm 1}(q'r) \\
&\mp \langle (J \mp 1, 1)JT | o | (J \mp 1, 1)JT \rangle \int dr r^2 \cos(\theta_J(r)) \sin(\theta_J(r)) j_{J \mp 1}(qr) v(r) j_{J \mp 1}(q'r) \\
&\pm \langle (J \pm 1, 1)JT | o | (J \pm 1, 1)JT \rangle \int dr r^2 \sin(\theta_J(r)) \cos(\theta_J(r)) j_{J \pm 1}(qr) v(r) j_{J \pm 1}(q'r) \\
&- \langle (J \pm 1, 1)JT | o | (J \mp 1, 1)JT \rangle \int dr r^2 \sin^2(\theta_J(r)) j_{J \pm 1}(qr) v(r) j_{J \mp 1}(q'r) .
\end{aligned} \tag{2.59}$$

An dieser Stelle diskutieren wir einige Beispiele für zustandskorrelierte Matrixelemente des Argonne–V18–Potentials. Wir verkürzen die Notation weiter, indem der Radialteil der Zustände zunächst unterdrückt wird. Er kann leicht entsprechend obigem Schema ergänzt werden.

Als erstes Beispiel betrachten wir die korrelierten Matrixelemente des Spin–Bahnteils der Wechselwirkung. Die diagonalen Matrixelementen lauten

$$\begin{aligned}
& \langle (J \mp 1, 1)JT | c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} v(\mathbf{r}) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} c_{\Omega} c_r | (J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&= v(R_+(r)) \left[\cos^2(\theta^{(J)}(R_+(r))) \langle (J \mp 1, 1)JT | \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} | (J \mp 1, 1)JT \rangle \right. \\
&\quad \left. + \sin^2(\theta^{(J)}(R_+(r))) \langle (J \pm 1, 1)JT | \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \right] .
\end{aligned} \tag{2.60}$$

Darüber hinaus werden durch die unitäre Transformation nichtverschwindende außerdiagonale korrelierte Matrixelemente des Spin–Bahnteils erzeugt:

$$\begin{aligned}
& \langle (J \mp 1, 1)JT | c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} v(\mathbf{r}) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} c_{\Omega} c_r | (J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \pm v(R_+(r)) \sin(\theta^{(J)}(R_+(r))) \cos(\theta^{(J)}(R_+(r))) \times \\
&\quad \times \left[\langle (J \pm 1, 1)JT | \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \right. \\
&\quad \left. - \langle (J \mp 1, 1)JT | \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} | (J \mp 1, 1)JT \rangle \right] .
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Für die diagonalen korrelierten Matrixelemente des Tensoroperators gilt

$$\begin{aligned}
& \langle (J \mp 1, 1)JT | c_r^{\dagger} c_{\Omega}^{\dagger} v(\mathbf{r}) s_{12} c_{\Omega} c_r | (J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&= v(R_+(r)) \left[\cos^2(\theta^{(J)}(R_+(r))) \langle (J \mp 1, 1)JT | s_{12} | (J \mp 1, 1)JT \rangle \right. \\
&\quad \pm 2 \cos(\theta^{(J)}(R_+(r))) \sin(\theta^{(J)}(R_+(r))) \langle (J \mp 1, 1)JT | s_{12} | (J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&\quad \left. + \sin^2(\theta^{(J)}(R_+(r))) \langle (J \pm 1, 1)JT | s_{12} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \right] ,
\end{aligned} \tag{2.62}$$

und für die außerdiagonalen korrelierten Matrixelemente:

$$\begin{aligned}
& \langle (J \mp 1, 1)JT | c_r^\dagger c_\Omega^\dagger v(r) s_{12} c_\Omega c_r | (J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= v(R_+(r)) \left[\cos^2 \left(\theta^{(J)}(R_+(r)) \right) \langle (J \mp 1, 1)JT | s_{12} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \right. \\
&\quad \left. + \sin^2 \left(\theta^{(J)}(R_+(r)) \right) \langle (J \pm 1, 1)JT | s_{12} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \right] .
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Abschließend betrachten wir die korrelierten Matrixelemente der kinetische Energie. Der korrelierte radiale Teil der kinetischen Energie im Zweiteilchenraum hat sowohl diagonale

$$\begin{aligned}
& \langle (J \pm 1, 1)JT | \tilde{t}_r^{[2]} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \langle (J \pm 1, 1)JT | c_r^\dagger c_\Omega^\dagger t_r c_\Omega c_r - t_r | (J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \frac{1}{2} \left(q_r^2 \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(r)} + \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(r)} q_r^2 \right) + \frac{1}{m_N} (3\sqrt{J(J+1)} \vartheta'(R_+(r)))^2 + \tilde{w}(r) ,
\end{aligned} \tag{2.64}$$

als auch außerdiagonale korrelierte Matrixelemente

$$\begin{aligned}
& \langle (J \mp 1, 1)JT | \tilde{t}_r^{[2]} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \langle (J \mp 1, 1)JT | c_r^\dagger c_\Omega^\dagger t_r c_\Omega c_r - t_r | (J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \pm 3i\sqrt{J(J+1)} \left[q_r \frac{\vartheta'(R_+(r))}{mR'_+(r)} + \frac{\vartheta'(R_+(r))}{mR'_+(r)} q_r \right] .
\end{aligned} \tag{2.65}$$

Die Tensor Korrelationen erzeugen einen zusätzlichen Term, der wegen der Abhängigkeit von $\vartheta(r)$ an das Zentrifugalpotential erinnert.

Für den Winkelanteil der kinetischen Energie ergeben sich ausgehend von (1.43) folgende korrelierte diagonale Matrixelemente

$$\begin{aligned}
& \langle (J \mp 1, 1)JT | \tilde{t}_\Omega^{[2]} | (J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&= \langle (J \mp 1, 1)JT | c_r^\dagger c_\Omega^\dagger t_\Omega c_\Omega c_r - t_\Omega | (J \mp 1, 1)JT \rangle \\
&= \frac{1}{m_N R_+^2(r)} \left[\cos^2 \left(\theta^{(J)}(R_+(r)) \right) \langle (J \mp 1, 1)JT | \mathbf{I}^2 | (J \mp 1, 1)JT \rangle \right. \\
&\quad \left. + \sin^2 \left(\theta^{(J)}(R_+(r)) \right) \langle (J \pm 1, 1)JT | \mathbf{I}^2 | (J \pm 1, 1)JT \rangle \right] \\
&\quad - \frac{1}{m_N r^2} \langle (J \pm 1, 1)JT | \mathbf{I}^2 | (J \pm 1, 1)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{2.66}$$

Für die außerdiagonale bekommen wir

$$\begin{aligned}
& \langle (J \mp 1, 1)JT | \tilde{t}_\Omega^{[2]} | (J \pm 1, 1)JT \rangle \\
&= \frac{\pm 1}{m_N R_+^2(r)} \sin \left(\theta^{(J)}(R_+(r)) \right) \cos \left(\theta^{(J)}(R_+(r)) \right) \times \\
&\quad \times \left[\langle (J \pm 1, 1)JT | \mathbf{I}^2 | (J \pm 1, 1)JT \rangle - \langle (J \mp 1, 1)JT | \mathbf{I}^2 | (J \mp 1, 1)JT \rangle \right] .
\end{aligned} \tag{2.67}$$

2.4 Matrixelemente im Vergleich

In diesem Abschnitt diskutieren wir die numerischen Ergebnisse für die korrelierten Impulsraummatrixelemente des Argonne–V18–Potentials. Für eine gegebene Partialwelle, d.h. einen gegebenen Satz von Quantenzahlen L , S und J , werden die korrelierten Impulsraummatrixelemente nach einer der beiden beschriebenen Methoden für ein Gitter von q -Werten berechnet. Dabei ist die Radialintegration für die Matrixelemente (in der Regel) numerisch auszuwerten. Hierzu wird das Computeralgebrasystem ‘Mathematica’ verwendet. Wir betrachten dabei Bahndrehimpulse bis $L = 3$.

Zuerst vergleichen wir in Abbildungen 2.4 und 2.5 die unkorrelierten Matrixelemente mit den operatorkorrelierten bzw. den zustandskorrelierten Matrixelementen für den α -Korrelator aus Abschnitt 2.1.3.

Der Vergleich zeigt, dass die Matrixelemente in den dominanten S -Wellenkanälen durch die Anwendung der Korrelation deutlich zu niedrigeren Werten verschoben werden. Dies ist eine Konsequenz der Zentralkorrelationen, die den abstoßende Core der unkorrelierten Wechselwirkung, der in den $L = 0$ Partialwellen besonders deutlich wird, zähmen. Bezüglich der Tensorkorrelationen sind Partialwellen mit $S = 1$ und $T = 0$ besonders interessant, da hier der dominante Teil der Tensorkraft wirkt.

In solchen Partialwellen, z.B. 3D_1 , 3S_1 – 3D_1 , etc. zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen operator- und zustandskorrelierten Matrixelementen. Hier machen sich die in den operatorkorrelierten Matrixelementen vernachlässigten höheren Ordnungen der Baker–Campbell–Hausdorff–Reihe bemerkbar.

Bei höheren Impulsen $q \gtrsim 1 \text{ fm}^{-1}$ ist bei der Verwendung der operatorkorrelierten Matrixelemente daher Vorsicht geboten.

In den Abbildungen 2.6 und 2.7 stellen wir die Matrixelemente für die verschiedenen Sätze von Korrelationsfunktionen aus Abschnitt 2.1.3 gegenüber. Es ist zu beachten, dass sich die drei Parametersätze α , β und γ nur bezüglich des Tensorkorrelators im $S = 1$, $T = 0$ Kanal unterscheiden. Dementsprechend sind die zustandskorrelierten Matrixelemente in allen anderen Kanälen identisch.

In den führenden $S = 1$ $T = 0$ Partialwellen, d.h. 3S_1 , 3D_1 und 3S_1 – 3D_1 , zeigt sich, dass die Matrixelemente weiter vom unkorrelierten Wert abweichen je langreichweitiger der

Tensor Korrelator wird. Im 3S_1 -Kanal bedeutet das, dass die Matrixelemente mit zunehmender Korrelatorreichweite immer anziehender werden.

Abschließend vergleichen wir in den Abbildungen 2.8 und 2.9 die zustandskorrelierten Matrixelemente für den α -Korrelator mit den Matrixelementen der so genannten $V_{\text{low-k}}$ -Wechselwirkung [20, 21]. Diese Wechselwirkung wird durch die Anwendung von Renormierungsgruppenmethoden auf eine realistisches Potential konstruiert, und stellt den modelunabhängigen Niederimpulsanteil der realistischen Wechselwirkung dar.

Obwohl der formale Hintergrund von $V_{\text{low-k}}$ und UCOM-Methoden verschieden ist, behandeln sie doch die gleiche Physik, nämlich kurzreichweitige Korrelationen. Dementsprechend sind die Impulsraummatrixelementen in den dominanten Partialwellen sehr ähnlich.

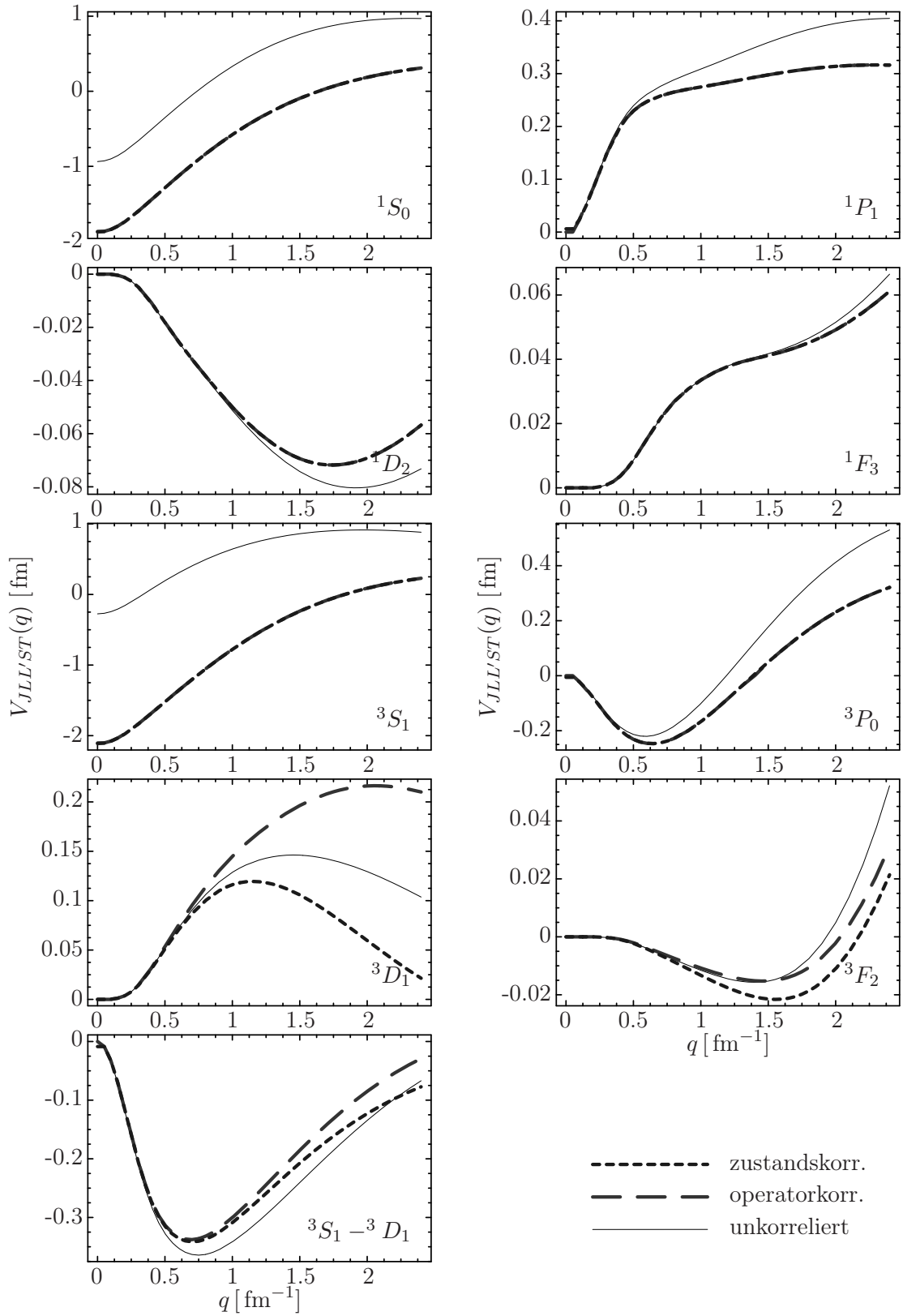


Abbildung 2.4: Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: unkorrelierte, operatorkorrelierte und zustandskorrelierte Matrixelemente im Vergleich. Es wurde der α -Korrelator verwendet.

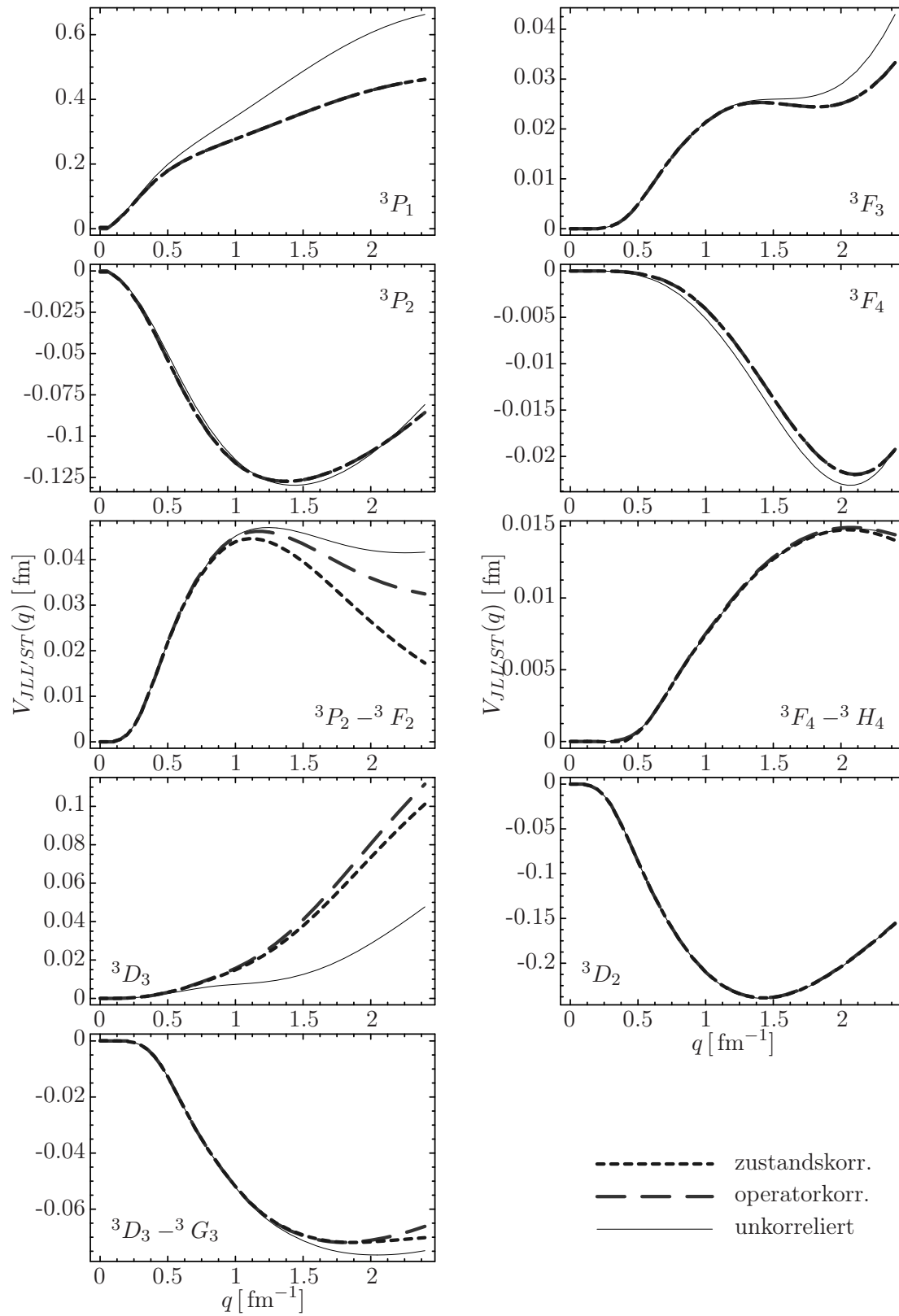


Abbildung 2.5: Ausgewählte Partialwellen: unkorrelierte, operatorkorrelierte und zustandskorrelierte Matrixelemente im Vergleich. Fortsetzung von Abbildung 2.4

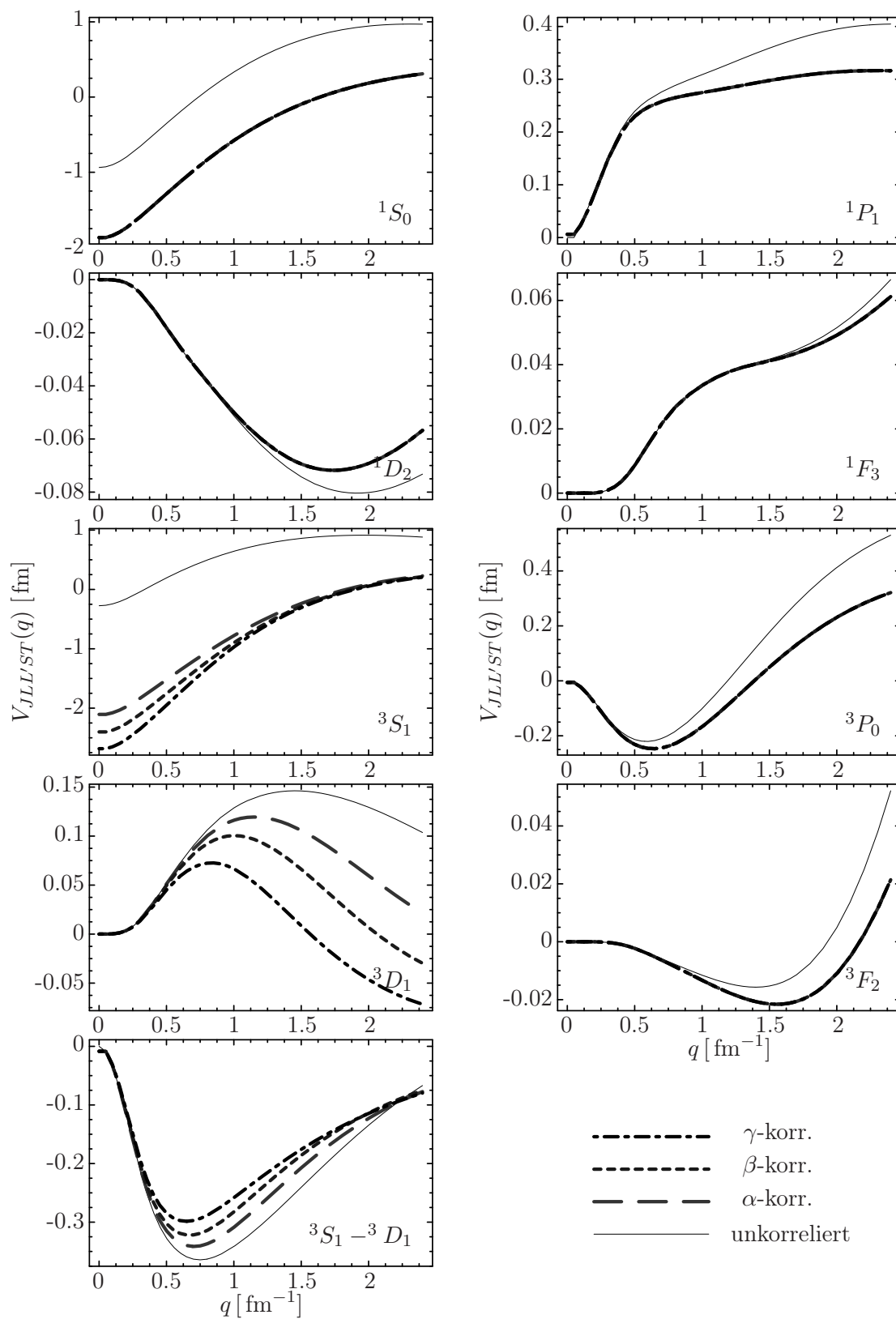


Abbildung 2.6: Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte Matrixelemente für α , β und γ -Korrelatoren.

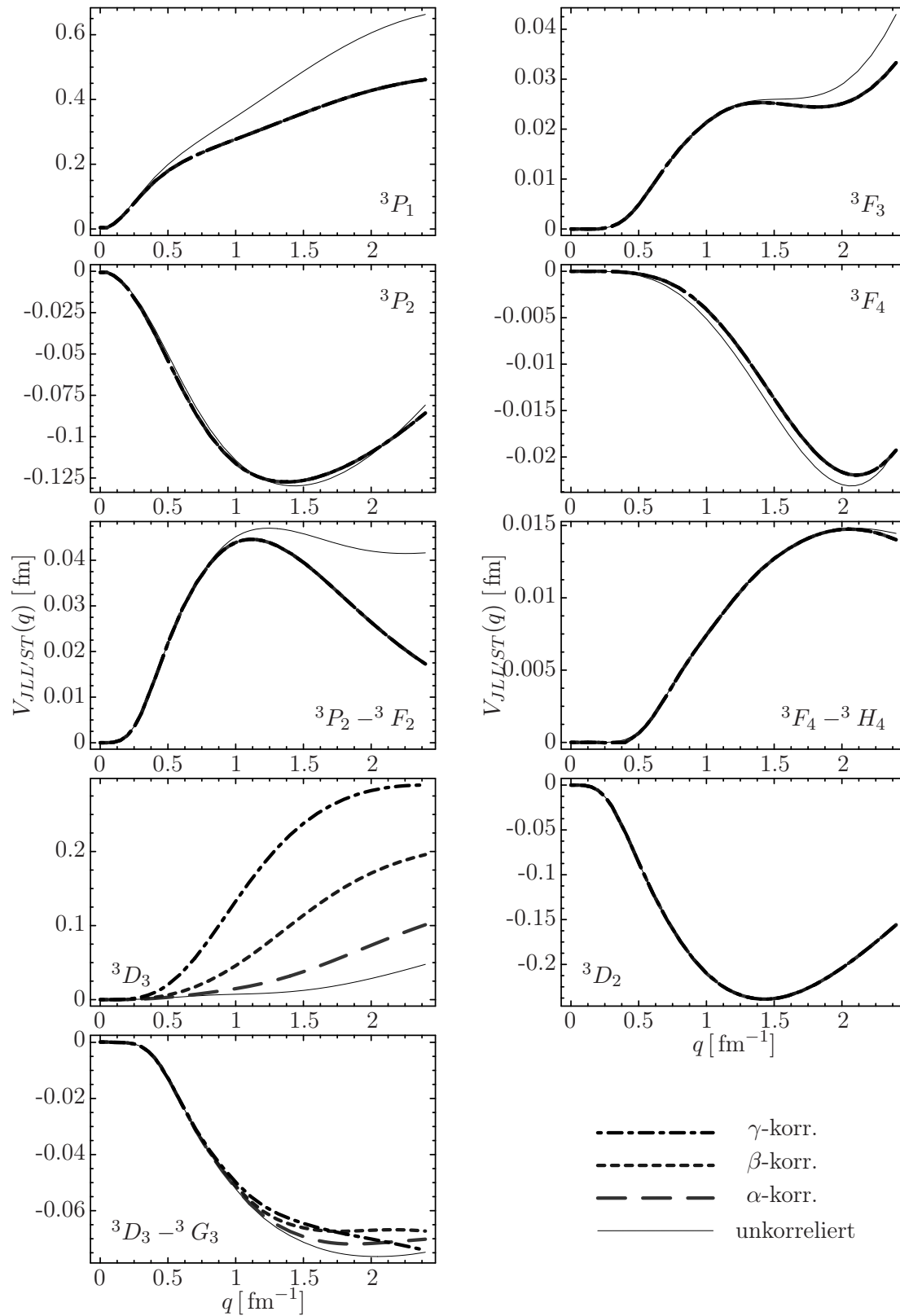


Abbildung 2.7: Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte Matrixelemente für α , β und γ -Korrelatoren. Fortsetzung von Abbildung 2.6

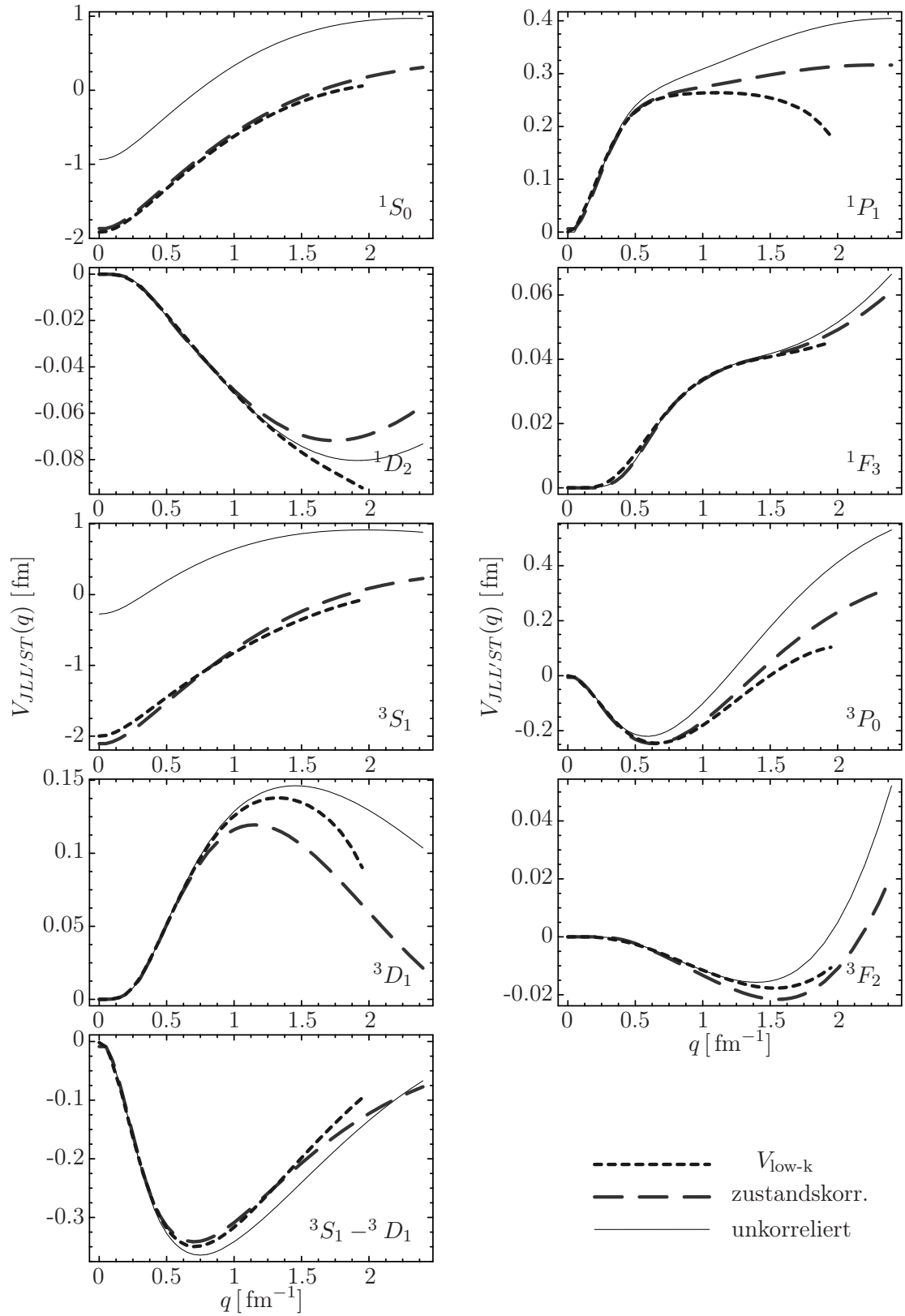


Abbildung 2.8: Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte (α -Korrelator) im Vergleich zu den $V_{\text{low-k}}$ Matrixelementen für $\Lambda = 2.1 \text{ fm}^{-1}$ [21].

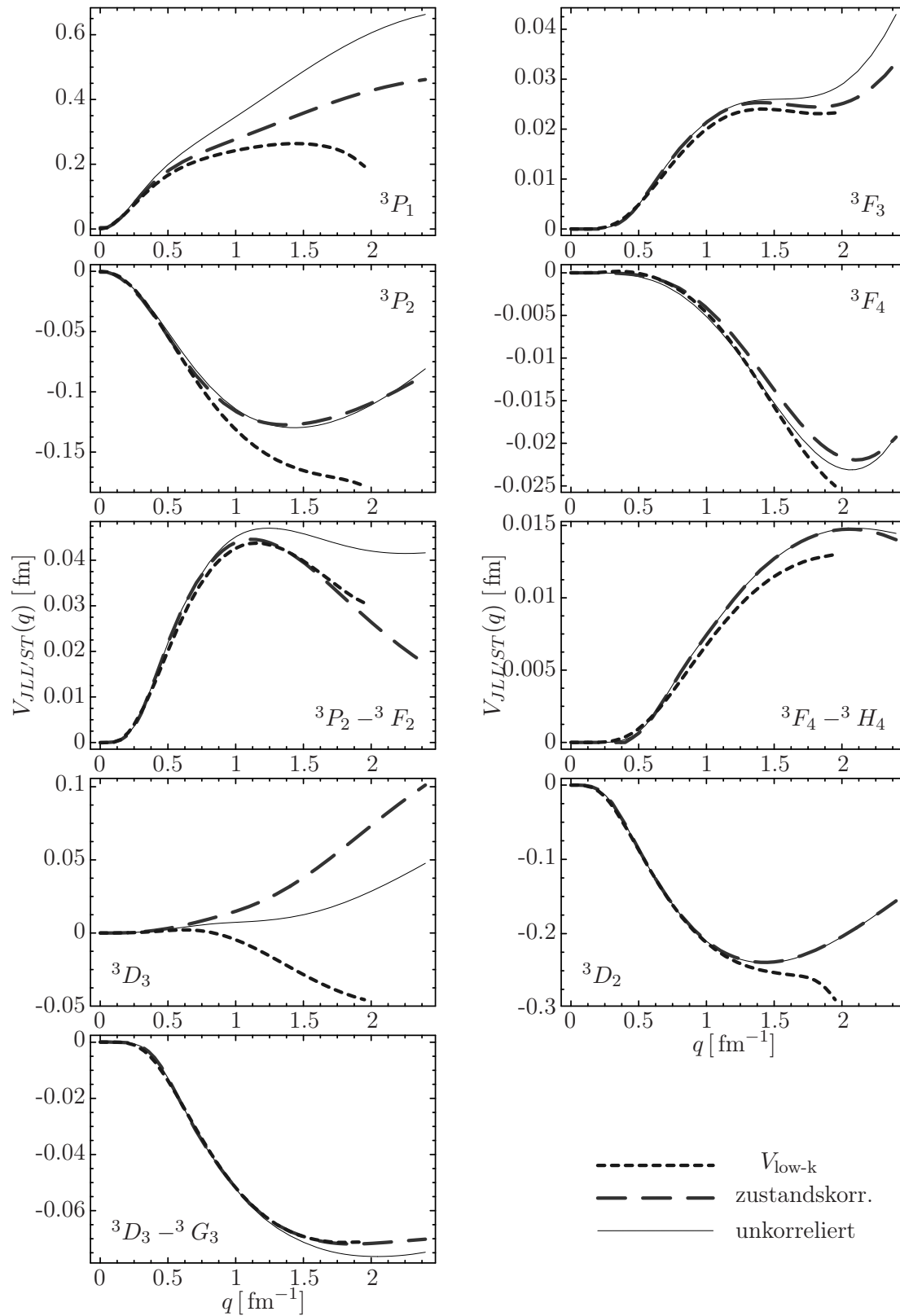


Abbildung 2.9: Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte (α -Korrektor) im Vergleich zu den $V_{\text{low-k}}$ Matrixelementen für $\Lambda = 2.1 \text{ fm}^{-1}$ [21]. Fortsetzung von Abbildung 2.8

Kapitel 3

Kernmaterie mit realistischen Potentialen

3.1 Einführung

3.1.1 Eigenschaften der Kernmaterie

Untersucht man die Ausdehnung von Atomkernen in Abhängigkeit von ihrer Massenzahl, so stellt man fest, dass das Volumen pro Nukleon beinahe konstant ist [22, 23].

Man kann daher versuchen, die Eigenschaften der Kerne aus einem hypothetischem Modell der ‘Kernmaterie’, das bei der Temperatur $T = 0$ K definiert ist, zu gewinnen.

Aus Streuexperimenten ergeben sich folgende Daten für den Kernradius [10]

$$R = r_0 A^{1/3} \quad \text{mit} \quad r_0 = 1.2 \text{ fm} . \quad (3.1)$$

Die aus verschiedenen Experimenten gewonnene Daten ergaben, dass die Dichte der Nukleonen im Inneren der Atomkerne als nahezu konstant angenommen werden kann und nicht wesentlich von der Nukleonenanzahl abhängig ist. Die Abweichungen von der $A^{1/3}$ Beziehung sind für statische Kerne nur etwa 1% und haben deren Ursprung in der Struktur der einzelnen Kerne [5].

Da die Bindungsenergie pro Nukleon über einen großen Bereich der Nuklidkarte nur wenig variiert, veranlasste Bethe und Weizsäcker die empirische Massenformel

$$B({}_Z^A X_N) = b_v A - b_o A^{2/3} - b_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - b_a \frac{(Z - N)^2}{A} \pm \frac{b_p}{A^{1/2}} \quad (3.2)$$

| Parameter | b_v | b_o | b_c | b_a | b_p |
|-----------|-----------------------|---------------------------|-----------------------|--------------------------|------------------------|
| | Volumen- parameter | Oberflächen- parameter | Coulomb- parameter | Asymmetrie- parameter | Paarungs- parameter |
| Wert | 15.8 MeV | 18.3 MeV | 0.7 MeV | 23.2 MeV | 11.5 MeV |

Tabelle 3.1: Werte der Parameter der Bethe–Weizsäcker Formel für einen Fit an experimentelle Daten. (Quelle: [24])

vorzuschlagen.

Die fünf Summanden stellen die Volumen-, Oberflächen-, Coulomb-, Asymmetrie- und Paarungsenergie in dieser Reihenfolge dar. Die Parameter b in (3.2) sind durch Anpassung an experimentelle Bindungsenergien bestimmt worden und in der Tabelle 3.1 aus [24] wiedergegeben.

Wollen wir die Formel (3.2) auf die Kernmaterie anwenden, so müssen wir deren unendliche Ausdehnung berücksichtigen. Daher wird zunächst der Oberflächenenergieterm vernachlässigt. Eine andere Vereinfachung liegt darin nur starke Wechselwirkungen zu betrachten und die Coulomb–Energie zu vernachlässigen. Somit erhält man für den Fall symmetrischer Kernmaterie in erster Näherung eine konstante Bindungsenergie pro Nukleon von $B/A = |E|/A = b_v = 15.8 \text{ MeV}$.

Die ersten beiden Kenngrößen, die eine quantenmechanische Beschreibung der Kernmaterie als wechselwirkendes Vielnukleonensystem liefern muss, sind die Dichte und die Bindungsenergie pro Nukleon am Sättigungspunkt [9]

$$\rho_0 \approx (0.16 \pm 0.01) \text{ fm}^{-3} \quad \text{und} \quad \frac{E_0}{A} \approx -(16 \pm 1) \text{ MeV} . \quad (3.3)$$

Eine weitere interessante Eigenschaft ist die Inkompressibilität K der Kernmaterie:

$$K = 9 \rho^2 \left. \frac{\partial^2(E/A)}{\partial \rho^2} \right|_{\rho=\rho_0} = k_F^2 \left[\left. \frac{\partial^2(E/A)}{\partial k_F^2} \right]_{\rho=\rho_0} . \quad (3.4)$$

Die Inkompressibilität ist ein Maß für die Energie, die notwendig ist, um die Dichte der Kernmaterie ausgehend von der Sättigungsdichte ρ_0 zu ändern. Experimentelle Abschätzungen für den Wert von K lassen sich aus Kompressionsschwingungen (z.B. Monopolanregungen) endlicher Kerne ableiten. Typische Werte der Inkompressibilität liegen bei $K \approx 230 \text{ MeV}$, sind aber mit großen Unsicherheiten behaftet [25, 26].

Fassen wir die wichtigsten Eigenschaften der Kernmaterie zusammen:

- Kernmaterie ist als unendlich ausgedehntes, homogenes isotropes Medium von Protonen und Neutronen.
- In Kernmaterie wird die Coulombabstoßung der Protonen durch eine negative Hintergrundladungsdichte kompensiert, sodass die Nukleonen nur über Kernkräfte wechselwirken.
- Man unterscheidet zwischen symmetrischer, die Dichte der Neutronen ist gleich der Dichte der Protonen, und asymmetrischer Kernmaterie, die beiden Dichten sind verschieden.
- Ein Grenzfall der asymmetrischen Kernmaterie ist die Neutronenmaterie, wie sie näherungsweise in Neutronensternen vorkommt.
- Man geht davon aus, dass die Kernmaterie β -stabil ist, asymmetrische Kernmaterie soll also nicht durch β -Zerfall in symmetrische Kernmaterie übergehen.

3.1.2 Hartree–Fock–Näherung

Unsere Aufgabe besteht nun darin, die Grundzustandseigenschaften (Temperatur $T = 0$) der Kernmaterie auf Basis realistischer Nukleon–Nukleon–Wechselwirkungen zu beschreiben. Wir beschränken uns dabei auf Zweiteilchenkräfte, so dass der Hamiltonoperator des Vielteilchensystems folgende Struktur aufweist:

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{k}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} V_{ij} . \quad (3.5)$$

Dreiteilchenkräfte werden an dieser Stelle nicht berücksichtigt. Zur Behandlung des quantenmechanischen Vielteilchenproblems wählen wir die Hartree–Fock–Näherung. In dieser Näherung wird der Vielteilchenzustand auf ein antisymmetrisiertes Produkt von Einteilchenzuständen eingeschränkt. Daraus leitet sich das einfache Hartree–Fock–Bild her, in dem sich die Nukleonen unabhängig voneinander in einem mittleren Einteilchenpotential bewegen, das den Nettoeffekt aller Zweiteilchenwechselwirkungen auf ein herausgegriffenes Nukleon beschreibt.

Wegen der Ununterscheidbarkeit der Nukleonen mit Spin $s = \frac{1}{2}$ muss der Vielteilchenzustand aufgrund des Spin–Statistik–Theorems [18] antisymmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung sein. Als Konsequenz der Antisymmetrie des Vielteilchenzustandes ergibt sich

das Pauli-Prinzip: Zwei Fermionen dürfen nie den selben Einteilchenzustand besetzen, da sich sonst kein antisymmetrischer Vielteilchenzustand bilden lässt.

Im Fall eines Systems aus zwei Fermionen, ist daher anstatt eines einfachen Produktzustandes der antisymmetrisierte Produktzustand $|\Phi\rangle$ der beiden Einteilchenzustände zu bilden

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\nu_1\rangle \otimes |\nu_2\rangle - |\nu_2\rangle \otimes |\nu_1\rangle \} . \quad (3.6)$$

Antisymmetrisierte Produktzustände der Form (3.6) werden als Slaterdeterminanten bezeichnet. Jede Slaterdeterminante enthält so genannte Austauschkorrelationen aufgrund des Pauli-Prinzips. Die Menge aller Slaterdeterminanten, die sich aus den Zuständen einer vollständigen Einteilchenbasis bilden lassen, stellt eine Basis des A -Fermionen-Hilbertraumes dar. Das heißt, dass jeder Zustand von A Fermionen in Slaterdeterminanten entwickelt werden kann. Die Verwendung eines Antisymmetrisierungsoperators \mathcal{A} zur Konstruktion der Slaterdeterminante ist eine besonders kompakte Methode. Der Antisymmetrisierungsoperator ist mit Hilfe des Permutationsoperators definiert:

$$\mathcal{A} = \frac{1}{A!} \sum_{\substack{\Pi \in \text{alle} \\ \text{Permutationen}}} \text{sign}(\Pi) \mathcal{P}_\Pi . \quad (3.7)$$

Dabei summiert man über alle Permutationen der Einteilchenzustände $|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle, \dots, |\nu_A\rangle$ gewichtet mit einem Faktor, der je nach gerader oder ungerader Anzahl von benötigten Transpositionen $+1$ oder -1 ist. Die Slaterdeterminante $|\Phi\rangle_a$ eines Systems von A Teilchen wird durch die Anwendung des Operators \mathcal{A} auf einen A -Teilchen-Produktzustand $|\Phi\rangle$ gebildet:

$$|\Phi\rangle_a = \sqrt{A!} \mathcal{A} |\Phi\rangle . \quad (3.8)$$

Der Index ‘a’ kennzeichnet die antisymmetrisierten Zustände.

Der A -Teilchen-Produktzustand $|\Phi\rangle$ ist das Tensorprodukt aus A orthonormierten Einteilchenzuständen $|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle, \dots, |\nu_A\rangle$:

$$|\Phi\rangle \equiv |\nu_1\rangle \otimes |\nu_2\rangle \otimes \dots \otimes |\nu_A\rangle = |\nu_1 \nu_2 \dots \nu_A\rangle . \quad (3.9)$$

Das Skalarprodukt zweier Einteilchenzustände ist

$$\langle \nu_i | \nu_j \rangle = \delta_{ij} , \quad (3.10)$$

womit die Normierungsbedingung

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = {}_a \langle \Phi | \Phi \rangle_a = 1 \quad (3.11)$$

automatisch erfüllt wird.

Die Beschränkung des Vielteilchenzustandes auf eine einzelne Slaterdeterminante hat schwerwiegende Konsequenzen. Wie in den ersten Kapiteln diskutiert, erzeugen realistische Wechselwirkungen starke Zentral- und Tensorkorrelationen. Diese können durch einfache Ansätze für den Vielteilchenzustand, wie die Slaterdeterminante im Rahmen des Hartree–Fock–Näherung nicht beschrieben werden.

Diese Problematik werden wir mit Hilfe der Methode der unitären Korrelationen, die ausführlich in Kapitel 1 beschrieben wurde, angehen. Statt der ‘nackten’ realistischen Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung wird die ‘gezähmte’ korrelierte Wechselwirkung im Hamiltonoperator (3.5) verwendet. Sie ist den einfachen Slaterdeterminanten besser angepasst. Im weiteren werden wir untersuchen, wie gut eine Beschreibung der Kernmaterie in diesem einfachen Rahmen funktioniert.

Das es sich bei Kernmaterie per Konstruktion um ein homogenes und isotropes, d.h. translations- und rotationsinvariantes, System handelt, muss auch das im Rahmen des Hartree–Fock–Verfahrens definierte mittlere Einteilchenpotential homogen sein. Die Einteilchenzustände können daher durch ebene Wellen

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} . \quad (3.12)$$

beschrieben werden. Zusammen mit den Spin- und Isospinfreiheitsgraden ergeben sich folgende Einteilchenzustände

$$|\nu\rangle = |\mathbf{k}\rangle \otimes |s m_s\rangle \otimes |t m_t\rangle = |\mathbf{k}\rangle \otimes \left|\frac{1}{2} m_s\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2} m_t\right\rangle . \quad (3.13)$$

Der Vorfaktor $1/\sqrt{V}$ resultiert aus der Normierung der Einteilchenzustände [27]. Um die Normierung zu erklären, gehen wir von einem kubischen Volumen $V = L^3$ mit der Kantenlänge L aus. Aufgrund der geforderten Translationsinvarianz wählen wir periodische Randbedingungen für die Einteilchenwellenfunktionen:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle &= \langle \mathbf{x} + L \mathbf{e}_x | \mathbf{k} \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} + L \mathbf{e}_y | \mathbf{k} \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} + L \mathbf{e}_z | \mathbf{k} \rangle . \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dies führt zur Quantisierung des Impulses \mathbf{k} . Es sind nur solche \mathbf{k} erlaubt, die sich durch

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} \mathbf{n}_x \\ \mathbf{n}_y \\ \mathbf{n}_z \end{pmatrix} , \quad \text{mit } \mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z \in \mathbb{Z} , \quad (3.15)$$

darstellen lassen.

Die Annahme eines endlichen Volumens dient nur der Vereinfachung der Rechnung. Zum Abschluss der Berechnung führt man den so genannten thermodynamischen Limes aus, d.h. Volumen V und Teilchenzahl A wachsen bis zu unendlich großen Werten, wobei ihr Verhältnis V/A konstant bleibt. Dabei gehen die diskreten Impulsquantenzahlen (3.15) in ein kontinuierliches Spektrum über.

Zur Illustration des Kontinuumsübergangs betrachten wir ein spingesättigtes symmetrisches System von Z Protonen und N Neutronen in einem Volumen V . Der Grundzustand des Systems in Hartree–Fock–Näherung ist eine Slaterdeterminante aus $A = N + Z$ Einteilchenzuständen (3.13) mit den niedrigsten verfügbaren Impulsen \mathbf{k} . Der maximale Impuls der besetzten Einteilchenzustände definiert den Fermiimpuls k_F . Im Allgemeinen ist der Fermiimpuls k_F für Protonen k_{Fp} und Neutronen k_{Fn} verschieden (asymmetrische Kernmaterie). Für diesen Vielteilchenzustand gilt folgende Identität:

$$Z = \sum_{m_s} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fp}} 1 = 2 \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fp}} 1, \quad N = \sum_{m_s} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fn}} 1 = 2 \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fn}} 1. \quad (3.16)$$

Die Summation über die diskreten Impulse \mathbf{k} innerhalb der so genannten Fermikugel $|\mathbf{k}| \leq k_F$ ist für ein endlichen Volumen V aufwändig und lässt sich nicht leicht auswerten. Für die folgenden Berechnungen hilft uns ein Rechentrick, den wir hier im Vorgriff auf den thermodynamischen Limes ausnutzen, um die Summe über die diskrete \mathbf{k} durch eine Integration zu ersetzen:

$$\sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \dots \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3k \dots \quad (3.17)$$

Der Abstand zwischen erlaubten Impulsquantenzahlen \mathbf{k} in einem endlichen Volumen wird durch den Vorfaktor $(L/2\pi)^3$ berücksichtigt (was als Folge der Gleichung (3.15) betrachtet werden kann).

Damit lassen sich die Gleichungen (3.16) umschreiben auf

$$\begin{aligned} Z &= 2 \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fp}} 1 = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fp}} d^3k = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi}{3} k_{Fp}^3 \\ N &= 2 \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fn}} 1 = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{|\mathbf{k}| \leq k_{Fn}} d^3k = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi}{3} k_{Fn}^3. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Division der gesamten Gleichung durch das Volume $V = L^3$ führt unmittelbar auf eine Beziehung zwischen Dichte und Fermiimpuls

$$\rho_p = \frac{Z}{V} = \frac{1}{3\pi^2} k_{Fp}^3, \quad \rho_n = \frac{N}{V} = \frac{1}{3\pi^2} k_{Fn}^3. \quad (3.19)$$

3.2 Symmetrische Kernmaterie

In diesem Abschnitt wird eine Formel für den Energieerwartungswert pro Teilchen in Abhängigkeit von Fermiimpuls hergeleitet, die die Grundlage für die folgenden numerischen Rechnungen bildet. Mit Hilfe dieser Formel werden die Berechnungen des Energieerwartungswertes numerisch durchgeführt und im Abschnitt 3.4 diskutiert. Für symmetrische Kernmaterie ist

$$k_{Fp} = k_{Fn} \quad \text{und} \quad \rho = \rho_p + \rho_n = \frac{A}{V} = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3. \quad (3.20)$$

3.2.1 Erwartungswert der kinetischen Energie

Als erste Größe berechnen wir den Erwartungswert der kinetischen Energie für eine Slaterdeterminante aus Einteilchenzuständen (3.12). Der Operator der kinetischen Energie ist ein Einteilchenoperator, wodurch sich folgende Beziehung ergibt:

$$\langle T \rangle = \langle \Phi | T | \Phi \rangle = {}_a \langle \nu_1 \nu_2 \dots \nu_A | \sum_{i=1}^A t_i | \nu_1 \nu_2 \dots \nu_A \rangle_a = \sum_{i=1}^A \langle \nu_i | t | \nu_i \rangle. \quad (3.21)$$

Da der Operator der kinetische Energie nicht von Spin und Isospin abhängt, können wir diese von dem Impulsanteil des Zustandes aus Gl. (3.12) separieren:

$$\langle T \rangle = \sum_{i=1}^A \langle \mathbf{k}_i | t | \mathbf{k}_i \rangle \langle \frac{1}{2} m_{si} \frac{1}{2} m_{ti} | \frac{1}{2} m_{si} \frac{1}{2} m_{ti} \rangle. \quad (3.22)$$

Anstatt die Summe über den Index der Teilchen auszuführen, summieren wir über Impuls, Spin und Isospin. Dabei wird über alle Spin und Isospinquantenzahlen und über Impulse innerhalb der Fermikugel summiert:

$$\sum_{i=1}^A \dots \equiv \sum_{\mathbf{k}}^{|\mathbf{k}| \leq k_F} \sum_{m_s = -1/2}^{+1/2} \sum_{m_t = -1/2}^{+1/2} \dots \quad (3.23)$$

Wir ersetzen nun die Summe in Gl. (3.22) gemäß Gl. (3.23), und schreiben den Operator der kinetischen Energie aus:

$$\langle T \rangle = \sum_{\mathbf{k}}^{|\mathbf{k}| \leq k_F} \langle \mathbf{k} | \frac{\mathbf{k}^2}{2m} | \mathbf{k} \rangle \sum_{m_s = -s}^{+1/2} \langle \frac{1}{2} m_s | \frac{1}{2} m_s \rangle \sum_{m_t = -1/2}^{+1/2} \langle \frac{1}{2} m_t | \frac{1}{2} m_t \rangle . \quad (3.24)$$

Die Summen über m_s und m_t ergeben jeweils einen Faktor 2. Weiterhin gilt $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}^2 | \mathbf{k} \rangle = \mathbf{k}^2 \langle \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle$, wobei $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle = 1$. Die Summe über \mathbf{k} wird mit Hilfe des Kontinuumsübergangs

$$\sum_{\mathbf{k}}^{|\mathbf{k}| \leq k_F} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int^{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3 k \dots \quad (3.25)$$

in ein Integral über die Fermi-Kugel umgeschrieben:

$$\langle T \rangle = \frac{4}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \int^{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3 k \mathbf{k}^2 . \quad (3.26)$$

Mit Hilfe des Integrals

$$\int^{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3 k \mathbf{k}^2 = \frac{4\pi}{5} k_F^5 \quad (3.27)$$

ergibt sich der folgende einfache Ausdruck für den Erwartungswert der kinetischen Energie:

$$\langle T \rangle = \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^5}{5m} . \quad (3.28)$$

3.2.2 Erwartungswert der potentiellen Energie

Für den Erwartungswert der potentiellen Energie ist eine kompliziertere Rechnung nötig. Deswegen ist diese in mehrere Schritte aufgeteilt. Zuerst werden die Spins und Isospins der einzelnen Nukleonen zum Gesamtspin und Gesamtisospin im Zweiteilchensystem gekoppelt. Danach wird eine Koordinatentransformation ins Schwerpunktsystem durchgeführt. Schließlich wird eine Partialwellenentwicklung durchgeführt und der resultierende Bahndrehimpuls mit dem Spin zum Gesamtdrehimpuls gekoppelt.

Der Operator der potentiellen Energie ist ein Zweiteilchenoperator. Die Berechnung des Erwartungswertes eines Zweiteilchenoperators führt als Konsequenz der Antisymmetri-

sierung auf einen ‘direkten’ – und einen ‘Austauschterm’:

$$\begin{aligned}
\langle V \rangle &= \langle \Phi | V | \Phi \rangle = {}_a \langle \nu_1 \nu_2 \dots \nu_A | \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A v_{ij} | \nu_1 \nu_2 \dots \nu_A \rangle_a \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A {}_a \langle \nu_i \nu_j | v | \nu_i \nu_j \rangle_a \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \{ \langle \nu_i \nu_j | v | \nu_i \nu_j \rangle - \langle \nu_i \nu_j | v | \nu_j \nu_i \rangle \} = \langle V \rangle_{\text{di}} - \langle V \rangle_{\text{xc}} .
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Kopplung von Spins bzw. Isospins

An Stelle von $|\nu_i\rangle$ und $|\nu_j\rangle$ setzen wir wieder die Produktzustände aus (3.13) ein und schreiben die Summe mit Hilfe von Gl. (3.23) um.

Da die damit gewonnenen Ausdrücke sehr umfangreich werden, trennen wir die beiden Anteile aus (3.29) und behandeln sie getrennt. Für den direkten Term $\langle V \rangle_{\text{di}}$ erhalten wir

$$\langle V \rangle_{\text{di}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ |\mathbf{k}'| \leq k_F}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \sum_{m_s m'_s m_t m'_t} \langle \mathbf{k} \frac{1}{2} m_s \frac{1}{2} m_t; \mathbf{k}' \frac{1}{2} m'_s \frac{1}{2} m'_t | v | \mathbf{k} \frac{1}{2} m_s \frac{1}{2} m_t; \mathbf{k}' \frac{1}{2} m'_s \frac{1}{2} m'_t \rangle . \tag{3.30}$$

Die Einteilchenspins $s = \frac{1}{2}$ und -isospins $t = \frac{1}{2}$ werden mit Hilfe von reellen Clebsch–Gordan–Koeffizienten zum Gesamtspin S und Gesamtisospin T gekoppelt, wodurch wir für (3.30) folgenden Ausdruck erhalten

$$\begin{aligned}
\langle V \rangle_{\text{di}} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ |\mathbf{k}'| \leq k_F}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \sum_{m_s m'_s m_t m'_t} \sum_{M_S} \sum_{M'_S} \sum_{M_T} \sum_{M'_T} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_s & m'_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_t & m'_t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ M_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S' \\ M'_S \end{pmatrix} \\
&\quad \times \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_t & m'_t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_t & m'_t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ M_T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T' \\ M'_T \end{pmatrix} \langle \mathbf{k} \mathbf{k}' S M_S T M_T | v | \mathbf{k} \mathbf{k}' S' M'_S T' M'_T \rangle .
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Wobei $\sum_{S M_S}$ eine Kurzform für $\sum_{S=0,1} \sum_{M_S=-S}^S$ ist und $\sum_{T M_T}$ analog für $\sum_{T=0,1} \sum_{M_T=-T}^T$ ist. Nutzt man die Orthogonalitätsrelation der Clebsch–Gordan–Koeffizienten

$$\sum_{m_s m'_s} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_s & m'_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ M_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_s & m'_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S' \\ M'_S \end{pmatrix} = \delta_{M_S M'_S} \delta_{S S'} , \tag{3.32}$$

und analog für Isospin

$$\sum_{m_t m'_t} \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \\ m_t & m'_t & M_T \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T' \\ m_t & m'_t & M'_T \end{array} \right) = \delta_{M_T M'_T} \delta_{T T'} , \quad (3.33)$$

erhält man für den direkten Term die folgende überschaubare Formel:

$$\langle V \rangle_{\text{di}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ |\mathbf{k}'| \leq k_F}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \sum_{S M_S T M_T} \langle \mathbf{k} \mathbf{k}' S M_S T M_T | v | \mathbf{k} \mathbf{k}' S M_S T M_T \rangle . \quad (3.34)$$

Für den Austauschterm folgen wir dem gleichen Rechenweg. Wir erhalten für $\langle V \rangle_{\text{xc}}$ nach dem Einsetzen von (3.13) in den zweiten Summanden von (3.29) und Umschreiben der Summe folgenden Ausdruck:

$$\langle V \rangle_{\text{xc}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ |\mathbf{k}'| \leq k_F}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \sum_{m_s m'_s m_t m'_t} \langle \mathbf{k} \frac{1}{2} m_s \frac{1}{2} m_t; \mathbf{k}' \frac{1}{2} m'_s \frac{1}{2} m'_t | v | \mathbf{k}' \frac{1}{2} m'_s \frac{1}{2} m'_t; \mathbf{k} \frac{1}{2} m_s \frac{1}{2} m_t \rangle . \quad (3.35)$$

Die Kopplung von Spin- und Isospinquantenzahlen liefert

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\text{xc}} = & \frac{1}{2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ |\mathbf{k}'| \leq k_F}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \sum_{m_s m'_s m_t m'_t} \sum_{S M_S S' M'_S} \sum_{T M_T T' M'_T} \sum_{M'_S} \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ m'_s & m_s & M_S \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S' \\ m_s & m'_s & M'_S \end{array} \right) \times \\ & \times \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \\ m'_t & m_t & M_T \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T' \\ m_t & m'_t & M'_T \end{array} \right) \langle \mathbf{k} \mathbf{k}' S M_S T M_T | v | \mathbf{k}' \mathbf{k} S' M'_S T' M'_T \rangle . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Zur Vereinfachung benutzen wir die Symmetrieeigenschaft der Clebsch–Gordan–Koeffizienten [28]

$$\left(\begin{array}{cc|c} s & l & j \\ m_s & m_l & m \end{array} \right) = (-1)^{s+l-j} \left(\begin{array}{cc|c} l & s & j \\ m_l & m_s & m \end{array} \right) , \quad (3.37)$$

wodurch sich folgende Beziehungen ergeben:

$$\left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ m'_s & m_s & M_S \end{array} \right) = (-1)^{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} - S} \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ m_s & m'_s & M_S \end{array} \right) , \quad (3.38)$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \\ m'_t & m_t & M_T \end{array} \right) = (-1)^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}-T} \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \\ m_t & m'_t & M_T \end{array} \right). \quad (3.39)$$

Damit lässt sich (3.36) unter Auswertung der Orthogonalitätsrelation umformen, und der Austauschterm nimmt folgende Gestalt an:

$$\langle V \rangle_{\text{xc}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ |\mathbf{k}'| \leq k_F}} \sum_{S M_S} \sum_{T M_T} (-1)^{S+T} \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' S M_S T M_T | v | \mathbf{k}'\mathbf{k} S M_S T M_T \rangle. \quad (3.40)$$

Beide Terme zusammengefasst liefern den Erwartungswert der potentiellen Energie

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{S M_S} \sum_{T M_T} \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' S M_S T M_T | v | \mathbf{k}\mathbf{k}' S M_S T M_T \rangle \\ - (-1)^{S+T} \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' S M_S T M_T | v | \mathbf{k}'\mathbf{k} S M_S T M_T \rangle, \end{aligned} \quad (3.41)$$

wobei die Summe über \mathbf{k} und \mathbf{k}' über alle vorhandene Impulse innerhalb der Fermikugel verläuft. Diese Schreibweise ist nur der Übersichtlichkeit wegen eingeführt und wird fortan benutzt.

An dieser Stelle erkennt man, dass für spingesättigte Zustände Wechselwirkungsterme der Form $\mathbf{a}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$ und $3(\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}_1)(\mathbf{b}\boldsymbol{\sigma}_1) - (\mathbf{a}\mathbf{b})(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)$ keinen Beitrag zur Energie liefern, da

$$\sum_{S M_S} \langle S M_S | \mathbf{a}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) | S M_S \rangle = \sum_{M_S=-1}^1 \langle 1 M_S | \mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}_1 | 1 M_S \rangle = 0 \quad (3.42)$$

und

$$\begin{aligned} \sum_{S M_S} \langle S M_S | 3(\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}_1)(\mathbf{b}\boldsymbol{\sigma}_1) - (\mathbf{a}\mathbf{b})(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) | S M_S \rangle \\ = \sum_{M_S=-1}^1 \langle 1 M_S | 3(\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}_1)(\mathbf{b}\boldsymbol{\sigma}_1) - (\mathbf{a}\mathbf{b})(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) | 1 M_S \rangle = 0, \end{aligned} \quad (3.43)$$

wobei \mathbf{a} und \mathbf{b} beliebige Operatoren im Orts–Isospin–Raum sind. Das heißt, für spingesättigte Systeme liefern alle Spin–Bahn– und Tensorwechselwirkungen keinen Beitrag zur Hartree–Fock–Energie.

Transformation in das Schwerpunktskoordinatensystem

Weil die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen nur von deren Relativkoordinaten abhängt wechseln wir in das Schwerpunktskoordinatensystem:

$$\text{Schwerpunktimpuls: } \mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{k}' \quad (3.44)$$

und

$$\text{Relativimpuls: } \mathbf{q} = \frac{1}{2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}') . \quad (3.45)$$

Für den Erwartungswert $\langle V \rangle$ bekommen wir im Schwerpunkt–Relativ–System

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} \sum_{S M_S T M_T} \langle \mathbf{K} \mathbf{q} S M_S T M_T | v | \mathbf{K} \mathbf{q} S M_S T M_T \rangle \\ - (-1)^{S+T} \langle \mathbf{K} \mathbf{q} S M_S T M_T | v | \mathbf{K} (-\mathbf{q}) S M_S T M_T \rangle . \end{aligned} \quad (3.46)$$

Um die Notation übersichtlich zu halten, schreiben wir die Doppelsumme über die Fermi-kugel weiterhin bezüglich der Einteilchenimpulse \mathbf{k} und \mathbf{k}' . Relativ- und Schwerpunktimpuls sind als Funktion der Einteilchenimpulse zu verstehen.

Partialwellenzerlegung

Das Argonne–V18–Potential, das wir in diesem Kapitel für die Berechnungen der Eigenschaften der Kernmaterie benutzen, ist rotationssymmetrisch [14]. Der Gesamtdrehimpuls ist somit eine Erhaltungsgröße und es ist vorteilhaft, den Gesamtdrehimpuls zur Charakterisierung der Zweiteilchenzustände zu verwenden. Als ersten Schritt führen wir daher eine Partialwellenentwicklung durch, d.h. wir stellen den Relativimpuls durch seinen Betrag q sowie den Bahndrehimpuls L und dessen Projektion M_L dar. Mit den Beziehungen:

$$| \mathbf{q} \rangle = \sum_{L M_L} | q L M_L \rangle Y_{L M_L}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (3.47)$$

und

$$| -\mathbf{q} \rangle = \sum_{L M_L} | q L M_L \rangle Y_{L M_L}^*(-\hat{\mathbf{q}}) = \sum_{L M_L} | q L M_L \rangle (-1)^L Y_{L M_L}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (3.48)$$

führen wir den Basiswechsel aus. $\hat{\mathbf{q}}$ und $-\hat{\mathbf{q}}$ sind Einheitsvektoren in Richtung von \mathbf{q} bzw. $-\mathbf{q}$. In der letzten Zeile von (3.48) wurde folgende Eigenschaft der Kugelflächenfunktionen benutzt

$$Y_{LM_L}^*(-\hat{\mathbf{q}}) = Y_{LM_L}^*(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^L Y_{LM_L}^*(\theta, \phi) = (-1)^L Y_{LM_L}^*(\hat{\mathbf{q}}). \quad (3.49)$$

Für den direkten Anteil des Erwartungswertes der potentiellen Energie finden wir nach Einsetzen der Relation (3.47) in (3.34) den Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\text{di}} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} \sum_{SM_S TM_T} \sum_{L' M'_L} \sum_{LM_L} Y_{L' M'_L}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{LM_L}^*(\hat{\mathbf{q}}) \times \\ & \times \langle \mathbf{K} q L' M'_L SM_S TM_T | v | \mathbf{K} q LM_L SM_S TM_T \rangle. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Für den transformierten Austauschanteil der potentiellen Energie ergibt sich analog

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\text{xc}} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} \sum_{SM_S TM_T} \sum_{L' M'_L} \sum_{LM_L} Y_{L' M'_L}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{LM_L}^*(\hat{\mathbf{q}}) (-1)^{L+S+T} \times \\ & \times \langle \mathbf{K} q L' M'_L SM_S TM_T | v | \mathbf{K} q LM_L SM_S TM_T \rangle. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Zusammengefasst erhält man aus den Gleichungen (3.50) und (3.51) den vollständigen Erwartungswert der potentiellen Energie:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} \sum_{SM_S TM_T} \sum_{L' M'_L} \sum_{LM_L} Y_{L' M'_L}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{LM_L}^*(\hat{\mathbf{q}}) \{1 - (-1)^{L+S+T}\} \times \\ & \times \langle \mathbf{K} q L' M'_L SM_S TM_T | v | \mathbf{K} q LM_L SM_S TM_T \rangle. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Da nur der Tensoranteil nicht verschwindende Matrixelement

$$\langle \mathbf{K} q L' M'_L SM_S TM_T | v | \mathbf{K} q LM_L SM_S TM_T \rangle \quad (3.53)$$

für $L \neq L'$ besitzt, dieser aber wegen Spinsättigung kein Beitrag liefern können wir im folgenden die Summe über L' weglassen und $L = L'$ setzen.

Kopplung zum Gesamtdrehimpuls

Jetzt nutzen wir die nach Partialwellen entwickelte Basis und koppeln Bahndrehimpuls und Spin zum Gesamtdrehimpuls. Die Kopplung erfolgt mit Hilfe der Clebsch–Gordan–Koeffizienten und verläuft analog zur Spinkopplung in 3.2.2, die nach der Antisymmetrisierung durchgeführt wurde. Die ungekoppelten Zustände lassen sich wie folgt durch die

gekoppelten Zweiteilchenzustände $|\mathbf{K}q(LS)JM TM_T\rangle$ darstellen:

$$|\mathbf{K}qLM_L SM_S TM_T\rangle = \sum_{JM} \begin{pmatrix} L & S \\ M_L & M_S \end{pmatrix} \begin{matrix} J \\ M \end{matrix} |\mathbf{K}q(LS)JM TM_T\rangle, \quad (3.54)$$

wobei J der Gesamtdrehimpuls und M dessen Projektion auf die z -Achse ist. Der Kopplungsfaktor für den 'bra'-Vektor unterscheidet sich von dem in (3.54) nur im Bahndrehimpulsanteil $L \leftrightarrow L'$ und dessen Projektion $M_L \leftrightarrow M'_L$, J und M sind gleich wegen der Drehinvarianz der Wechselwirkung.

Die Clebsch-Gordan Koeffizienten verschwinden falls die Summe der Projektionsquantenzahlen vor der Kopplung ungleich der Projektionsquantenzahl nach der Kopplung ist. Das bedeutet, dass wir nur Beiträge zu (3.52) erhalten, wenn

$$M_{L'} + M_S = M \quad \text{und} \quad M_L + M_S = M \quad (3.55)$$

gleichzeitig erfüllt sind was nur für $M_{L'} = M_L$ möglich ist. Damit reduziert sich die Summation über M_L und $M_{L'}$ auf eine einfache Summe. Dieselbe Eigenschaft der Clebsch-Gordan-Koeffizienten erlaubt es uns, die verbleibende Summe über M_L formal zu eliminieren. Dazu drücken wir M_L durch die beiden anderen Projektionsquantenzahlen M_S und M aus:

$$M_L = M - M_S. \quad (3.56)$$

Damit sind die Summationen über M und M_S eingeschränkt, und wir können den kompletten Erwartungswert der potentiellen Energie wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & \frac{1}{2} \sum_L \sum_{S M_S} \sum_{J M} \sum_{T M_T} \begin{pmatrix} L & S \\ M - M_S & M_S \end{pmatrix} \begin{matrix} J \\ M \end{matrix} \begin{pmatrix} L & S \\ M - M_S & M_S \end{pmatrix} \begin{matrix} J \\ M \end{matrix} \times \\ & \times \{1 - (-1)^{L+S+T}\} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} Y_{L M - M_S}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{L M - M_S}^*(\hat{\mathbf{q}}) \\ & \times \langle \mathbf{K}q(LS)JM TM_T | v | \mathbf{K}q(LS)JM TM_T \rangle. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Die Rechnung kann weiter vereinfacht werden, indem wir einige Eigenschaften der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung ausnutzen. Aufgrund der Translationsinvarianz wirkt der Operator v nicht auf den Schwerpunktsanteil des Zweiteilchenzustandes, weshalb dieser ab-

separiert werden kann:

$$\begin{aligned}
& \langle \mathbf{K} q(LS)JM T M_T | v | \mathbf{K} q(LS)JM T M_T \rangle \\
&= \langle \mathbf{K} | \mathbf{K} \rangle \langle q(LS)JM T M_T | v | q(LS)JM T M_T \rangle \\
&= \langle q(LS)JM T M_T | v | q(LS)JM T M_T \rangle,
\end{aligned} \tag{3.58}$$

wobei $\langle \mathbf{K} | \mathbf{K} \rangle = 1$

Desweiteren nehmen wir an, dass die Wechselwirkung ladungsunabhängig ist. Die ladungsabhängigen Terme des Argonne-V18-Potential sind ausgesprochen klein ([14]) und werden in dieser Arbeit vernachlässigt. Daher kann die Summation über M_T in (3.57) direkt ausgeführt werden. Sie liefert einen Faktor $(2T + 1)$:

$$\sum_{T M_T} \dots \rightarrow \sum_T (2T + 1) \dots \tag{3.59}$$

Das Ergebnis für den Erwartungswert vereinfacht sich damit zu

$$\begin{aligned}
\langle V \rangle &= \frac{1}{2} \sum_L \sum_{S M_S} \sum_{J M} \sum_T (2T + 1) \begin{pmatrix} L & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \times \\
&\quad \times \{1 - (-1)^{L+S+T}\} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} |Y_{L M - M_S}(\hat{\mathbf{q}})|^2 \\
&\quad \times \langle q(LS)JM T | v | q(LS)JM T \rangle.
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Den von den Spin-, Isospin- und Drehimpulsquantenzahlen abhängigen Vorfaktor in (3.60) kürzen wir im Folgenden mit

$$C_{JLLST}^{MM_S} \equiv \frac{2T + 1}{2} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \{1 - (-1)^{L+S+T}\} \tag{3.61}$$

ab. Für das Wechselwirkungsmatrixelement setzen wir das Ergebnis aus Kapitel 2 ein und schreiben

$$\langle q(LS)JM T | v | q(L'S)JM T \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} V_{JLL'ST}(q). \tag{3.62}$$

Der Vorfaktor $\frac{(2\pi)^3}{V}$ trägt der unterschiedlichen Normierung der ebenen Wellen bei der Berechnung der Matrixelemente (Streu-Einheiten) und bei der Berechnung des Erwartungswertes (endliches Volumen) Rechnung.

Somit erhalten wir

$$\langle V \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_L \sum_{S M_S} \sum_{J M} \sum_T C_{JLLST}^{MM_S} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} |Y_{L M - M_S}(\hat{\mathbf{q}})|^2 V_{JLLST}(q). \tag{3.63}$$

Kontinuumsübergang

Als letzten Schritt führen wir den Kontinuumsübergang aus, d.h. wir ersetzen die Summationen über diskrete Impulszustände durch Integrale über kontinuierliche Impulsvariablen

$$\sum_{\mathbf{k}}^{\dots} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3k \dots \quad (3.64)$$

Der Erwartungswert des Potentials lautet damit

$$\langle V \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_L \sum_{M_S} \sum_{J_M} \sum_T C_{JLLST}^{MM_S} \int_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} d^3k' \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3k |Y_{LM-M_S}(\hat{\mathbf{q}})|^2 V_{JLLST}(q), \quad (3.65)$$

wobei q lediglich der Betrag des Relativimpulses ist: $q = |\mathbf{q}| = \frac{1}{2}|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$.

Um die Integration über die Impulse auszuführen, benutzen wir eine Variablentransformation. Dazu betrachten wir die Lage der beiden Impulse \mathbf{k} und \mathbf{k}' zueinander in einem Koordinatensystem im Impulsraum (Abbildung 3.1).

Die dreidimensionalen Integrale in (3.63) können weiter vereinfacht werden. Dazu schreiben wir die Integrationen aus (3.63) aus

$$\int_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} d^3k' \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3k \dots = \int_0^{k_F} dk' k'^2 \int_0^\pi d\vartheta' \sin \vartheta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{k_F} dk k^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \dots \quad (3.66)$$

Die z -Achse definieren wir antiparallel zum Vektor \mathbf{k}' . Der Vektor \mathbf{k} hat eine beliebige Richtung, bleibt aber betragsmäßig kleiner als k_F , also innerhalb der Fermikugel. Die Differenz von \mathbf{k} und \mathbf{k}' stellt einen neuen Vektor \mathbf{Q} dar, der aufgrund seiner Definition mit $2\mathbf{q}$ identifiziert werden kann. Die drei Vektoren bilden das Dreieck OAB mit dem Winkeln α , zwischen \mathbf{k}' und \mathbf{Q} , und dem Außenwinkel ϑ .

Die Matrixelemente hängen nur vom relativen Impuls der Nukleonen ab, die Integration wird aber über unabhängige Einteilchenimpulse ausgeführt. Damit wir die Integration in (3.66) ausführen können, substituieren wir die Integrationsvariablen (k, ϑ, φ) gegen $(Q, \alpha, \beta = \varphi)$. Anhand der Abb. 3.1 erkennt man leicht folgende Zusammenhänge

$$Q \cos \alpha = k' + k \cos \vartheta \quad (3.67)$$

$$Q \sin \alpha = k \sin \vartheta \quad (3.68)$$

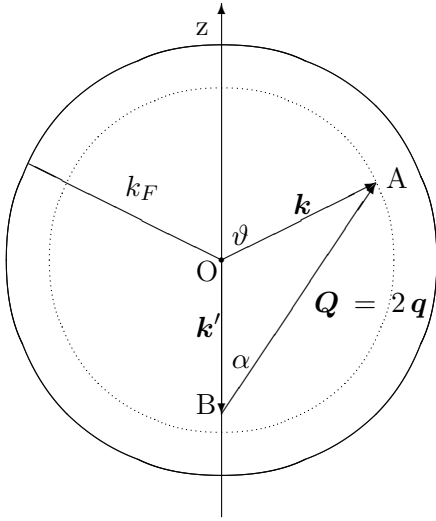


Abbildung 3.1: Zur Integrationsgrenzen und Variablentransformation bei dem Kontinuumsübergang.

Die Jacobi-Determinante

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial k}{\partial Q} & \frac{\partial k}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial \vartheta}{\partial Q} & \frac{\partial \vartheta}{\partial \alpha} \end{vmatrix} = \frac{Q}{k} \quad (3.69)$$

woraus folgt

$$dk d\vartheta = \frac{Q}{k} dQ d\alpha \quad (3.70)$$

oder mit 3.68

$$k^2 dk \sin \vartheta d\vartheta = Q^2 dQ \sin \alpha d\alpha . \quad (3.71)$$

Die Integrationsgrenzen für Q und α ergeben sich aus Abb. 3.1. Man betrachtet B als Koordinatenursprung für Q und α und erkennt:

$$0 \leq Q \leq Q_F(k_F, k', \alpha) , \quad (3.72)$$

wobei aus Abbildung 3.1 ersichtlich ist, dass für $|\mathbf{k}| = k_F$

$$Q_F(k_F, k', \alpha) = k' \cos \alpha + \sqrt{k_F^2 - k'^2 \sin^2 \alpha} \quad (3.73)$$

und

$$0 \leq \alpha \leq \pi \quad (3.74)$$

Die Integrationen über φ' und ϑ' ergibt den Faktor 4π , da der Integrand nicht mehr davon abhängt. Die Integration über β lässt sich auch ausführen, da die M -Quantenzahlen der beiden Kugelfunktionen gleich sind und ihre β -Phasen sich wegheben.

Somit können wir den Ausdruck (3.63) nochmals vereinfachen, und bekommen schließlich

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & \frac{V}{\pi} \sum_L \sum_{SM_S} \sum_{JM} \sum_T C_{JLLST}^{MM_S} \int_0^{k_F} dk' k'^2 \times \\ & \times \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha |Y_{LM-M_S}(\alpha, 0)|^2 \int_0^{Q_F(k_F, k', \alpha)} dQ Q^2 V_{JLLST}(Q/2) . \end{aligned} \quad (3.75)$$

Die drei verbleibenden Integrationen müssen numerisch ausgewertet werden, da die Wechselwirkungsmatrixelemente $V_{JLLST}(Q/2)$ nur numerisch gegeben sind. Diese Aufgabe wird mit dem Computeralgebrasystem ‘Mathematica’ [29] gelöst, wobei eine optimale Kombination der internen Integrationsroutinen mit einfachen Integrationen mittels der Trapezregel verwendet wird. In allen Fällen wurde explizit überprüft, dass die Zahl der verwendeten Stützstellen ausreichend hoch ist.

3.2.3 Zustandsgleichung

Die Summe der Erwartungswerte der kinetischen Energie und der Zweiteilchenwechselwirkung liefern den Erwartungswert der Gesamtenergie für den Grundzustand der Kernmaterie. Im Folgenden betrachten wir den Erwartungswert dividiert durch die Teilchenzahl A , die eine Funktion der Dichte bzw. des Fermiimpulses der Kernmaterie darstellt. Einsetzen der zuvor abgeleiteten Ausdrücke für die Erwartungswerte der kinetischen Energie (3.28) und des Potentials (3.75) liefert

$$\begin{aligned} \varepsilon(k_F) &= \frac{V}{A} \frac{k_F^5}{5 \pi^2 m} \\ &+ \frac{V}{A} \frac{1}{\pi} \sum_L \sum_{S M_S} \sum_{J M} \sum_T C_{JLLST}^{M M_S} \int_0^{k_F} dk' k'^2 \times \\ &\times \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha |Y_{L M - M_S}(\alpha, 0)|^2 \int_0^{Q_F(k_F, k', \alpha)} dQ Q^2 V_{JLLST}(Q/2) . \end{aligned} \quad (3.76)$$

Mit der aus (3.19) kann man (3.76) zu einer nur vom Fermiimpuls abhängigen Funktion umschreiben:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k_F) &= \frac{3}{10} \frac{k_F^2}{m} \\ &+ \frac{3 \pi}{2 k_F^3} \sum_L \sum_{S M_S} \sum_{J M} \sum_T C_{JLLST}^{M M_S} \int_0^{k_F} dk' k'^2 \times \\ &\times \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha |Y_{L M - M_S}(\alpha, 0)|^2 \int_0^{Q_F(k_F, k', \alpha)} dQ Q^2 V_{JLLST}(Q/2) . \end{aligned} \quad (3.77)$$

Dies ist die Zustandsgleichung für spingesättigte symmetrische Kernmaterie bei Temperatur $T = 0$ K.

Im Folgenden wird $\varepsilon(k_F)$ für das korrelierte Argonne–V18–Potential numerisch ausgewertet. Es ist zu beachten, dass der Ausdruck nur noch vom Fermiimpuls k_F und nicht mehr explizit von V , A oder anderen Größen abhängt. Der thermodynamische Limes erübrigt sich damit, da er schon im Vorfeld, bei der Berechnung der einzelnen Anteile der Energie – kinetischer und potentieller – benutzt wurde.

3.2.4 Das Einteilchenpotential

Das Einteilchenpotential [30] ist durch

$$U_{m_s, m_t}(k_F, k) = \sum_{\mathbf{k}'}^{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \sum_{m'_s} \sum_{m'_t} \left\{ \langle \mathbf{k} m_s m_t; \mathbf{k}' m'_s m'_t | V | \mathbf{k} m_s m_t; \mathbf{k}' m'_s m'_t \rangle - \langle \mathbf{k} m_s m_t; \mathbf{k}' m'_s m'_t | V | \mathbf{k}' m'_s m'_t; \mathbf{k} m_s m_t \rangle \right\} , \quad (3.78)$$

definiert, wobei die Summe über alle Spins, Isospins und Impulse innerhalb der Fermikugel ausgeführt wird [31, 32, 33]. Für Spingesättigte symmetrische Kernmaterie ist $U_{m_s, m_t}(k_F, k) = U(k_F, k)$ unabhängig von Spin und Isospin. Dies wird in der folgenden Rechnung ausgenutzt. Der Ausdruck (3.78) wird auf die gleiche Weise vereinfacht, die wir es schon oben in 3.2.2 angewandt haben:

- wir benutzen ebene Wellen als Basis,
- koppeln die Einteilchenspins und Einteilchenisospins zum Gesamtspin und zum Gesamtisospin des Systems,
- gehen in Schwerpunktskoordinaten über,
- benutzen die Partialwellenzerlegung für den relativen Impuls,
- führen den Gesamtdrehimpuls ein und
- führen die diskreten Impulse mit Hilfe des thermodynamischen Limes ins kontinuierliche Spektrum über.

Nach der Vereinfachung und Anwendung von (3.19) erhalten wir eine der Gleichung (3.75) ähnliche Formel für das Einteilchenpotential in Abhängigkeit vom Fermiimpuls k_F und

dem Impuls \mathbf{k} des betrachteten Teilchens:

$$U(k_F, k) = \frac{3\pi}{2k_F^3} \sum_L \sum_{SM_S} \sum_{JM} \sum_T C_{JLLST}^{MM_S} \times \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha |Y_{LM-M_S}(\alpha, 0)|^2 \int_0^{Q_F(k_F, k, \alpha)} dQ Q^2 V_{JLLST}(\frac{Q}{2}). \quad (3.79)$$

Die kinetische Energie ist für einen Einteilchenzustand durch

$$T(k) = \frac{1}{2m} k^2 \quad (3.80)$$

gegeben, was wir benutzen, um eine Einteilchenenergie $W(k_F, k)$ zu definieren:

$$W(k_F, k) = T(k) + U(k_F, k). \quad (3.81)$$

Ausgehend von der Definition (3.81) können wir jetzt die Einteilchenenergie an der Fermioberfläche folgendermaßen schreiben:

$$W(k_F) \equiv W(k_F, k_F) = T(k_F) + U(k_F, k_F). \quad (3.82)$$

Schließlich schreiben wir die Einteilchenenergie an der Fermioberfläche mit Hilfe von (3.80) und (3.79) aus und erhalten

$$W(k_F) = \frac{1}{2m} k_F^2 + \frac{3\pi}{2k_F^3} \sum_L \sum_{SM_S} \sum_{JM} \sum_T C_{JLLST}^{MM_S} \times \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha |Y_{LM-M_S}(\alpha, 0)|^2 \int_0^{Q_F(k_F, k, \alpha)} dQ Q^2 V_{JLLST}(\frac{Q}{2}). \quad (3.83)$$

Die Einteilchenenergie an der Fermioberfläche, also $W(k_F)$, soll uns den Erwartungswert von -16 MeV (siehe auch (3.3)) liefern, was wir mit unserer Rechnung für das korrelierte Argonne-V18-Potential prüfen werden.

3.2.5 Effektive Masse

Ausgehend von dem berechneten Einteilchenpotential, lässt sich die so genannte effektive Masse bestimmen. Diese ist folgendermaßen definiert [30]:

$$\frac{m^*}{m} = \frac{T(k_F)}{T(k_F) + U(k_F, k_F) - U(k_F, k=0)}. \quad (3.84)$$

Dabei ist $T(k)$ die kinetische Energie eines Nukleons mit Impuls k .

Die effektive Masse ist ein weiterer Parameter zur Überprüfung der UCOM-Theorie und Untersuchung der Wirkung von im Abschnitt 3.5 definierten Korrekturen zum Standardverfahren.

3.2.6 Hugenholtz–van Hove Theorem

Zur Überprüfung der durchgeführten numerischen Berechnungen können wir ebenfalls das Hugenholtz–van Hove Theorem [34] heranziehen. Es besagt, dass die Einteilchenenergie an der Fermikante $W(k_F)$ (3.83) der mittleren Energie pro Teilchen am Sättigungspunkt, d.h. im Minimum der Zustandsgleichung $\varepsilon(k_F)$, entsprechen muss.

Dieses Theorem [35, 36] gilt für alle wechselwirkenden Fermisysteme bei der Temperatur $T = 0$ K, sofern keine Inkonsistenzen bei der Beschreibung der Zustandsgleichung bzw. der Einteilchenenergie auftreten.

Auf formaler Ebene ist das Theorem für die korrelierten Wechselwirkungen erfüllt. Die Allgemeingültigkeit des Hugenholtz–van Hove Theorem ist die grundlegende Motivation, das Theorem für den UCOM-Formalismus auch numerisch zu überprüfen.

Um die Aussage treffen zu können, ob unsere Ergebnisse für die korrelierte Wechselwirkung in der Tat mit dem Hugenholtz–van Hove Theorem konsistent sind, tragen wir die Zustandsgleichung (3.77) als Funktion des Impuls k_F auf und suchen das Minimum, woraus sich der Wert des Fermiimpuls k_F und die Größe der mittleren Energie pro Teilchen ergibt.

3.3 Neutronenmaterie

In diesem Abschnitt wird eine Formel für den Energieerwartungswert pro Teilchen in Abhängigkeit von Fermiimpuls für reine Neutronenmaterie konstruiert. Da die Herleitung für die Neutronenmaterie fast identisch zu der von symmetrischer Kernmaterie verläuft, verzichten wir hier auf die ausführliche Diskussion aller Zwischenschritte. Der Hauptunterschied zwischen Neutronenmaterie und symmetrischer Kernmaterie liegt in den für erstere fixierten Isospinquantenzahlen $T = 1$ und $M_T = -1$.

3.3.1 Erwartungswert für die kinetische Energie

Für die kinetische Energie erhalten wir den einfachen Ausdruck

$$\langle T \rangle = \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^5}{10 m}, \quad (3.85)$$

der aufgrund des festgelegten Isospins $m_t = -\frac{1}{2}$ gerade der Hälfte des Erwartungswertes in symmetrischer Kernmaterie (3.29) entspricht.

3.3.2 Erwartungswert für die potentielle Energie

Ausgehend davon, dass $T = 1$ und $M_T = -1$ ist, können wir den Rechenweg analog zu Abschnitt 3.2.2 gestalten und den Ausdruck für den Erwartungswert der potentieller Energie in einzelnen Schritten herleiten. Somit bekommen wir das zu Gl. (3.60) analoge Ergebnis

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & \frac{1}{2} \sum_{L L'} \sum_{S M_S} \sum_{J M} \begin{pmatrix} L' & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \times \\ & \times \{1 - (-1)^{L+S+1}\} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} Y_{L' M - M_S}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{L M - M_S}^*(\hat{\mathbf{q}}) \\ & \times \langle q(L'S)JM 1 | v | q(LS)JM 1 \rangle . \end{aligned} \quad (3.86)$$

Wir führen erneut eine Abkürzung für die Clebsch–Gordan–Koeffizienten sowie die wiederkehrenden Faktoren ein:

$$\bar{C}_{JLL'S}^{MM_S} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} L' & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M - M_S & M_S & M \end{pmatrix} \{1 - (-1)^{L+S+1}\} . \quad (3.87)$$

Da die Wechselwirkungsmatrixelemente bereits allgemein berechnet sind (Kapitel 2), setzen wir $T = 1$ ein, und erhalten $V_{JLL'S1}$, was wir mit (3.87) und der Umnormierung der Matrixelemente (3.62) in die Gleichung (3.86) einsetzen. Damit gilt für die potentielle Energie:

$$\langle V \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{L L'} \sum_{S M_S} \sum_{J M} \bar{C}_{JLL'S}^{MM_S} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{k_F} Y_{L' M - M_S}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{L M - M_S}^*(\hat{\mathbf{q}}) V_{JLL'S1}(q) . \quad (3.88)$$

Zum Schluss machen wir den Übergang vom diskreten zum kontinuierlichen Spektrum für die Impulse (siehe auch (3.17) oder (3.64)) und vereinfachen die Integrale mit der

Argumentation aus Abschnitt 3.2.2. Damit erhalten wir die zu (3.75) analoge Gleichung für den Erwartungswert der potentiellen Energie für reine Neutronenmaterie:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & \frac{V}{\pi} \sum_L \sum_{S M_S} \sum_{J M} \bar{C}_{JLLS}^{M M_S} \int_0^{k_F} dk' k'^2 \times \\ & \times \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha |Y_{L M - M_S}(\alpha, 0)|^2 \int_0^{Q_F(k_F, k', \alpha)} dQ Q^2 V_{JLLS1}(Q/2) . \end{aligned} \quad (3.89)$$

Für die spätere numerische Berechnung werden wir uns erneut auf ‘Mathematica’ und die im Abschnitt 3.2.2 beschriebene Methoden stützen.

3.3.3 Zustandsgleichung

Aus dem Erwartungswert der kinetischen (3.85) und der potentiellen Energie (3.89) erhalten wir nach Division durch die Zahl der Neutronen N die Zustandsgleichung für die Neutronenmaterie

$$\begin{aligned} \varepsilon(k_F) = & \frac{3}{10m} k_F^2 \\ & + \frac{3\pi}{2k_F^3} \sum_L \sum_{S M_S} \sum_{J M} \bar{C}_{JLLS}^{M M_S} \int_0^{k_F} dk' k'^2 \times \\ & \times \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha |Y_{L M - M_S}(\alpha, 0)|^2 \int_0^{Q_F(k_F, k', \alpha)} dQ Q^2 V_{JLLS1}(Q/2) . \end{aligned} \quad (3.90)$$

Dabei wurde die Relation

$$\rho_n = \frac{1}{3\pi^2} k_F^3 \quad (3.91)$$

zwischen der Dichte der Neutronenmaterie und dem Fermiimpuls verwendet.

3.4 Ergebnisse

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Ergebnisse für die nackte und die korrelierte Argonne V18 Wechselwirkung. Wir untersuchen, welche Wirkung die Korrelationen auf die Zustandsgleichung der Kernmaterie zeigen und welchen Einfluss die Reichweite des Tensorkorrelators (siehe Abschnitt 2.1.3) hat.

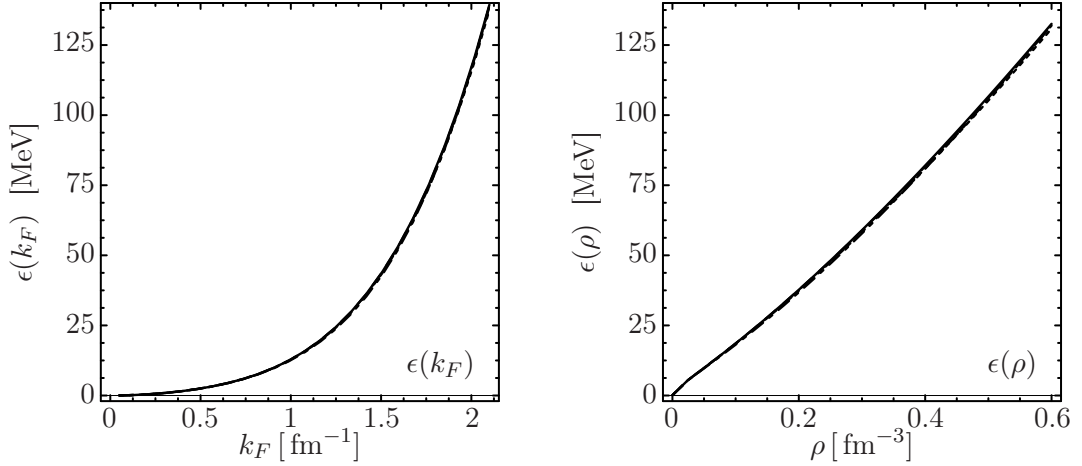


Abbildung 3.2: Partialwellenkonvergenz der Zustandsgleichung für symmetrische Kernmaterie, berechnet mit dem unkorrelierten Argonne-V18-Potential. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für verschiedene Bahndrehimpulse dar: $L_{\max} = 2$ (.....), $L_{\max} = 4$ (.....), $L_{\max} = 6$ (---) und $L_{\max} = 8$ (—). Ein Unterschied zwischen den einzelnen Linien ist kaum wahrnehmbar. Es existiert kein Minimum (also kein Sättigungsverhalten für die Zustandsgleichung).

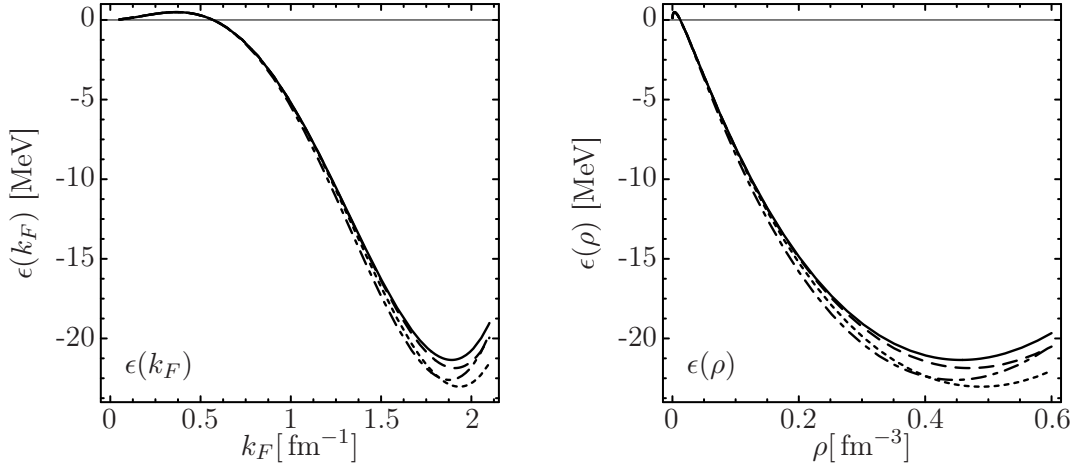


Abbildung 3.3: Partialwellenkonvergenz der Zustandsgleichung für symmetrische Kernmaterie, berechnet mit zustandskorrelierten Matrixelementen des Argonne-V18-Potentials. Im $ST = 10$ -Kanal wird der α -Korrelator verwendet. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für folgende Bahndrehimpulse dar: $L_{\max} = 2$ (.....), $L = 4$ (.....), $L_{\max} = 6$ (---) und $L_{\max} = 8$ (—).

3.4.1 Symmetrische Kernmaterie

Wir beginnen mit den Ergebnissen für das unkorrelierte Argonne-V18-Potential. Abbildung 3.2 zeigt die Energie pro Teilchen als Funktion des Fermiimpulses bzw. der Dichte.

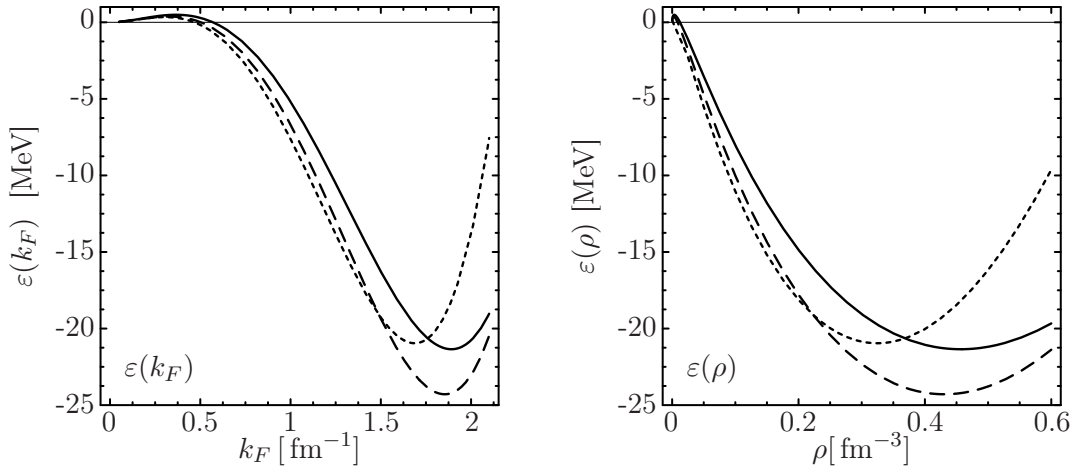


Abbildung 3.4: Vergleich der Zustandsgleichung für verschiedene Korrelatoren. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für das AV18-Potential, berechnet mit α (—), β (---) und γ -Korrelator (.....) dar. Alle Zustände sind bis einschließlich $L_{\max} = 8$ aufsummiert worden.

Die verschiedenen Kurven entsprechen verschiedenen Werten des maximalen Bahndrehimpulses L_{\max} , die in Gleichung (3.77) berücksichtigt wurde. Unabhängig von der Dichte ist die Energie immer positiv und es existiert kein Sättigungsminimum. Offensichtlich ist die Beschreibung im Rahmen der einfachen Hartree-Fock-Näherung mit unkorreliertem Argonne-V18-Potential nicht realistisch.

Nun untersuchen wir, wie sich die Zustandsgleichung für ein korreliertes Potential ändert. Wir verwenden den α -Korrelator und berechnen die zustandskorrelierten Matrixelemente für jeden Bahndrehimpuls bis einschließlich $L_{\max} = 8$.

Wie im Falle der unkorrelierten Wechselwirkung berechnen wir den Erwartungswert der mittleren Energie pro Teilchen für verschiedene Werte des maximalen Drehimpulses ($L_{\max} = 2, 4, 6$ und 8), um zu beurteilen, wann eine Konvergenz eintritt. Die Abbildung 3.3 zeigt, dass die Zustandsgleichung eine moderate Abhängigkeit von L_{\max} aufweist. Für $L_{\max} = 8$ ist die Kurve in guter Näherung konvergiert und wir werden diesen Wert für den Bahndrehimpuls für die folgenden Rechnungen verwenden. Die Einbeziehung höherer Bahndrehimpulse ist prinzipiell möglich, führt aber auf numerische Schwierigkeiten bei der Auswertung der Matrixelemente.

Der Vergleich der Abbildungen 3.2 und 3.3 zeigt eindrucksvoll, welchen Einfluss die Korrelationen haben: sie bringen die Zustandsgleichung von großen positiven Energien auf

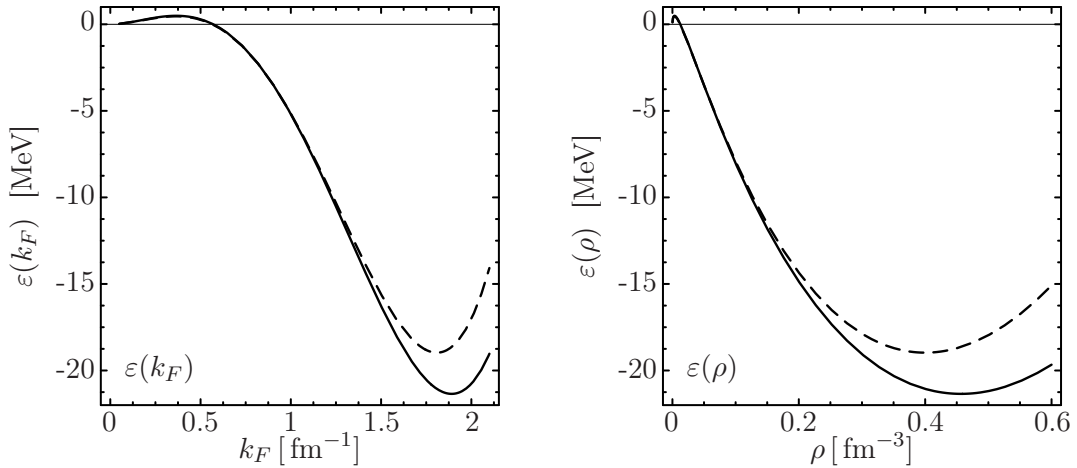


Abbildung 3.5: Auswirkung der Transformationsart auf die Zustandsgleichung für die symmetrische Kernmaterie ($L_{\max} = 8$, α -Korrelator, Argonne-V18-Potential). Dargestellt wird die mittlere Energie pro Teilchen, berechnet mit zustandskorrelierten (—) bzw. operatorkorrelierten (---) Matrixelementen.

negative Energien und erzeugen das erwartete Minimum in $\varepsilon(k_F)$, das den so genannten Sättigungspunkt definiert.

Nach empirischen Vorhersagen sollte der Sättigungspunkt bei $k_{F0} \approx 1.36 \text{ fm}^{-1}$ und $\varepsilon_0 \approx -16 \text{ MeV}$ liegen. Das Minimum für das α -korrelierte Argonne-V18-Potential liegt bei deutlich höheren Fermiimpulsen $k_F \approx 1.8 \text{ fm}^{-1}$ und negativen Energie $\varepsilon \approx -21 \text{ MeV}$. Zu diesen Ergebnissen sind mehrere Punkte anzumerken: Die hier verwendete Zweiteilchennäherung ist für Dichten weit jenseits der nuklearen Sättigungsdichte $\rho_0 \approx 0.16 \text{ fm}^{-3}$ keine gute Näherung mehr. Abstoßende Beiträge der dritten Ordnung der Clusterentwicklung (1.3.3) werden in diesem Dichteregime relevant. Sie würden das Minimum zu niedrigeren Fermiimpulsen und zu höheren Energien verschieben.

Bei der empirischen Sättigungsdichte $\rho_0 \approx 0.16 \text{ fm}^{-3}$ liegt die berechnete Energie mit $\varepsilon(\rho_0) \approx -13 \text{ MeV}$ oberhalb des empirischen Wertes von -16 MeV . Diese Differenz ist auf fehlende langreichweitige Korrelationen zurückzuführen, die weder von den unitären Korrelationsoperatoren noch den verwendeten Hartree-Fock-Zuständen akkurat beschrieben werden. Hier bietet sich Ansatzpunkte für zukünftige Arbeiten.

In Abbildung 3.4 vergleichen wir die Zustandsgleichungen, die für die verschiedenen Sätze von Korrelationsfunktionen (α , β und γ), die im Abschnitt 2.1.3 beschrieben wurden, resultieren.

Wenn wir ausgehend vom α -Korrelator die Reichweite der Tensorkorrelationsfunktion

| | k_{F0} | ε_0 | ρ_0 | K | $\frac{m^*}{m}$ | $W(k_{F0})$ |
|----------|------------------|-----------------|------------------|--------|-----------------|-------------|
| | fm ⁻¹ | MeV | fm ⁻³ | MeV | | MeV |
| α | 1.80 | -18.97 | 0.40 | 301.92 | 0.44 | -18.93 |
| α | 1.89 | -21.34 | 0.46 | 326.18 | 0.40 | -21.57 |
| β | 1.85 | -24.29 | 0.43 | 361.92 | 0.41 | -24.20 |
| γ | 1.68 | -20.96 | 0.32 | 321.40 | 0.45 | -20.96 |

Tabelle 3.2: Zusammengefasste Ergebnisse der Kernmaterierechnung für korreliertes AV18-Potential. Dargestellt sind die Werte für $L_{\max} = 8$. Die erste, durch eine dünne Linie abgetrennte, Zeile gibt die Werte mit operatorkorrelierten Matrixelementen, die restlichen (α , β und γ) basieren auf zustandskorrelierten Matrixelementen.

verlängern, d.h. zum β -Korrelator übergehen, beobachten wir, dass sich die Energie pro Nukleon weiter verringert. Einerseits werden dabei die langreichweitige Korrelationen durch den β -Korrelator besser beschrieben, andererseits vergrößern sich aber die Beiträge der nicht berücksichtigten höheren Ordnungen der Clusterentwicklung.

Der γ -Korrelator ist so langreichweitig, dass durch die erzeugten Impulsabhängigkeiten ein Anwachsen der Energie bei größeren Dichten zu beobachten ist. Im Bereich der empirischen Sättigungsdichte setzt sich der vorher beschriebene Trend fort und wir beobachten ein weiteres Absinken der mittleren Energie.

Im Hinblick auf die Gültigkeit der Zweiteilchennäherung beschränken wir uns im Folgenden auf den α -Korrelator.

Abschließend vergleichen wir in Abbildung 3.5 die zwei möglichen Wege, die korrelierten Matrixelemente zu berechnen:

- (a) die Verwendung der Operatorform der korrelierten Wechselwirkung, die auf der Auswertung der Baker-Campbell-Hausdorff Formel basiert, zu Berechnung der Matrixelemente (operatorkorrelierte Matrixelemente, Abschnitt 2.2), und
- (b) die Anwendung der Tensorkorrelatoren auf die Zustände, die eine exakte Auswertung der korrelierten Matrixelementen ermöglichen (zustandskorrelierte Matrixelemente, Abschnitt 2.3).

Die Abbildung 3.5 zeigt einen deutlichen Unterschied zwischen den resultierenden Zustandsgleichungen. Offenbar tragen die in der Operatorform der korrelierten Wechselwirkung vernachlässigten Terme zumindest bei höheren Dichten merklich bei. Wir werden daher im Folgenden mit der diesbezüglich exakten Form der zustandskorrelierten Matrixelemente arbeiten.

In der Tabelle 3.2 haben wir die berechneten Kenngrößen der symmetrischen Kernmaterie zusammengefasst. Die letzte Spalte, mit der Einteilchenenergie, kann in gewissen Rahmen als Güte der Rechnung angesehen werden, und sollte nach 3.2.6 (Hugenholtz-van Hove Theorem) der Energie im Sättigungspunkt (zweite Spalte) gleich sein.

3.4.2 Neutronenmaterie

Wir können die oben beschriebenen Vergleiche ebenso für die Zustandsgleichungen reiner Neutronenmaterie durchführen. In Abbildung 3.6 wird die Konvergenz der Zustandsgleichung für die Rechnung mit zustandskorrelierten Matrixelementen und dem α -Korrelator gezeigt. Da nur $T = 1$ Matrixelemente beitragen und der durch den Tensorkorrelator stark attraktive Kanal $ST = 10$ ausgeschlossen ist, konvergiert die Energie pro Teilchen

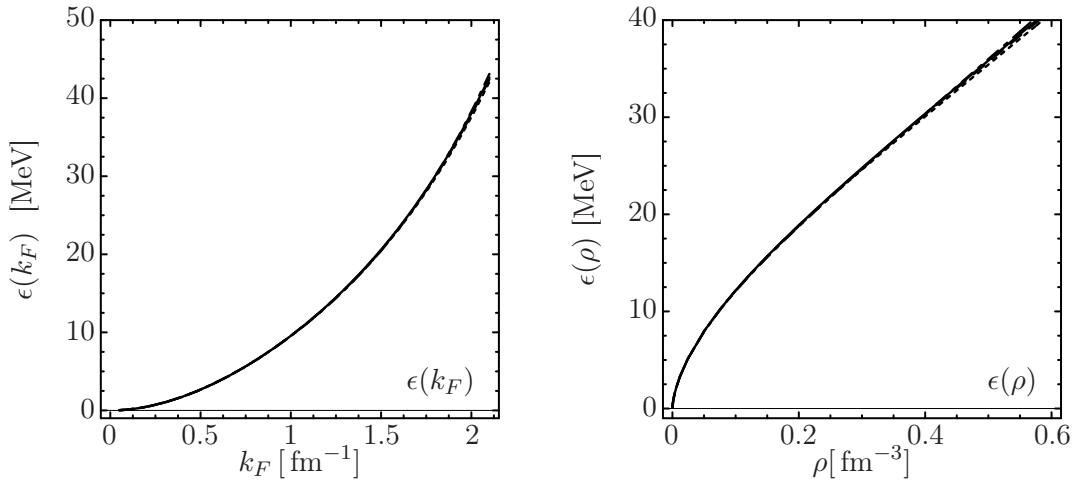


Abbildung 3.6: Partialwellenkonvergenz für die Zustandsgleichung der Neutronenmaterie, berechnet mit zustandskorrelierten Matrixelementen (α -Korrelator, Argonne-V18-Potential). Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für folgende Bahndrehimpulse dar: $L_{\max} = 2$ (---), $L_{\max} = 4$ (.....), $L_{\max} = 6$ (- - -) und $L_{\max} = 8$ (—). Die relativen Änderungen mit der Zunahme von höheren Bahndrehimpulsen ist sehr klein, womit wir $L_{\max} = 8$ als gute Näherung betrachten können.

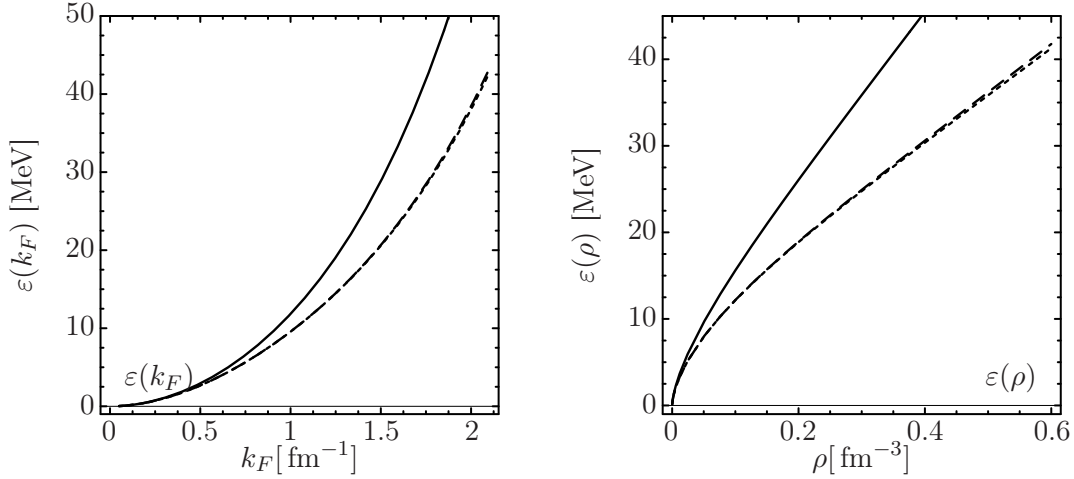


Abbildung 3.7: Vergleich der Zustandsgleichungen der Neutronenmaterie für unkorrelierte (—) zustandskorrelierte (---) und operatorkorrelierte Matrixelemente (.....). Verwendet wurden $L_{\max} = 8$ und α -Korrelator für des Argonne-V18-Potentials.

als Funktion von L_{\max} sehr viel schneller.

Die Abwesenheit des $ST = 10$ -Kanals zeigt sich auch in anderen Hinsicht. So sind z.B. die Zustandsgleichungen für den α , β und γ -Korrelator identisch, da diese Parametersätze sich nur im $ST = 10$ -Kanal unterscheiden, was wir auch schon bei den Matrixelementen im Abschnitt 2.4 gesehen haben. Außerdem zeigt sich kein merklicher Unterschied zwischen den Rechnungen mit operatorkorrelierten und mit zustandskorrelierten Matrixelementen (Abbildung 3.7). Der Abbruch der Baker-Campbell-Hausdorff-Reihe macht sich hier nicht bemerkbar, weil der dominante $T = 0$ Wechselwirkungsanteil nicht beiträgt.

3.5 Phänomenologische Korrektur

3.5.1 Motivation der Korrektur

In den letzten Abschnitten haben wir die Zustandsgleichungen von Kernmaterie mit korrelierten Wechselwirkungen verglichen. Die Berücksichtigung kurzreichweitiger Korrelationen mit der Methode der unitären Korrelatoren führt auf eine Zustandsgleichung, die den Sättigungscharakter der Kernmaterie qualitativ beschreibt. Wir haben bereits verschiedene Gründe für die quantitative Abweichung vom empirischen Sättigungspunkt diskutiert. Erstens stützen sich alle Rechnungen auf die Zweiteilchennäherung, bei der die

| Konstante | γ^c | κ^c | γ^{p^2} | κ^{p^2} | γ^{ls} | κ^{ls} |
|-----------|------------|-----------------|---------------------|-----------------|---------------|-----------------|
| Einheit | MeV | fm ² | MeV fm ² | fm ² | MeV | fm ² |
| Wert | -7.261 | 2.750 | 14.050 | 2.500 | -2.700 | 3.000 |

Tabelle 3.3: Parameter der phänomenologischen Korrektur zum AV18-Potential.

Beiträge der Clusterentwicklung jenseits der Zweiteilchenordnung vernachlässigt werden. Zweitens können langreichweitige Korrelationen, die nicht explizit mit den Korrelationsoperatoren behandelt werden, in der einfachen Hartree-Fock-Näherung nicht beschrieben werden. Schließlich sind echte Dreiteilchenwechselwirkungen, die bei endlichen Kernen zum Erreichen einer Übereinstimmung mit dem Experiment notwendig sind, nicht berücksichtigt.

Um alle diese Beiträge in einer effektiven Weise zu beschreiben, wurde in den Arbeiten [15], [4] vorgeschlagen, eine phänomenologische Korrektur zur korrelierten Wechselwirkung einzuführen. Sie sollte so einfach wie möglich sein und nur eine minimale Zahl phänomenologischer Parameter enthalten.

An dieser Stelle sei an die Arbeit [15] verwiesen, wo Sinn und Zweck der einzelnen Korrekturen ausführlich diskutiert wurde. Hier wird nur eine Zusammenfassung geboten, die einen für die Betrachtung und Analyse der späteren Ergebnisse notwendigen Überblick verschafft.

Die phänomenologische Korrektur wird in einer Operatorform angesetzt, wobei ein spin- und isospinunabhängiger Zentral- und Impulsanteil sowie ein Spin-Bahn-Teil einbezogen werden. Die Radialabhängigkeit für die drei Operatorkanäle wird durch jeweils eine Gaußfunktion parametrisiert. Für die modifizierten Radialabhängigkeiten des Zentralteils des korrelierten Potentials gilt:

$$\tilde{v}_{\text{mod},ST}^c(r) = \tilde{v}_{ST}^c(r) + \gamma^c e^{-\frac{r^2}{2\kappa^c}}, \quad (3.92)$$

$$\tilde{v}_{\text{mod},ST}^{p^2}(r) = \tilde{v}_{ST}^{p^2}(r) + \gamma^{p^2} e^{-\frac{r^2}{2\kappa^{p^2}}}, \quad (3.93)$$

$$\tilde{v}_{\text{mod},ST}^{ls}(r) = \tilde{v}_{ST}^{ls}(r) + \gamma^{ls} e^{-\frac{r^2}{2\kappa^{ls}}}. \quad (3.94)$$

Die Konstanten $\{\gamma^c, \kappa^c\}$, $\{\gamma^{p^2}, \kappa^{p^2}\}$ und $\{\gamma^{ls}, \kappa^{ls}\}$ wurden aus Fits an die Bindungsenergien und Ladungsradien von ⁴He, ¹⁶O, ⁴⁰Ca und ⁴⁸Ca, sowie ²⁴O bestimmt.

Wir benutzen die Werte aus der Tabelle 3.3, welche für das mit dem α -Korrelator korrelierte Argonne-V18-Potential bestimmt wurden.

3.5.2 Ergebnisse für symmetrische Kernmaterie

In diesem Abschnitt untersuchen wir die Auswirkung der phänomenologischen Korrektur auf die Zustandsgleichung symmetrischer Kernmaterie. Es ist zu bemerken, dass die Parameter der Korrektur für kleine Kerne mit $A < 50$ angepasst wurden. Die Anwendung auf die Zustandsgleichung der Kernmaterie bedeutet also eine substantielle Extrapolation über den Fitbereich hinaus.

Ähnlich zu den Abschnitt 3.4 diskutierten Ergebnissen der korrelierter Wechselwirkung, untersuchen wir zuerst die Partialwellenkonvergenz der Energie pro Teilchen $\varepsilon(k_F)$ bzw. $\varepsilon(\rho)$. Die Änderung zwischen den Kurven für $L_{\max} = 6$ und $L_{\max} = 8$ in Abbildung 3.8 ist kaum wahrnehmbar, so dass für $L_{\max} = 8$ von vollständiger Konvergenz ausgegangen werden kann.

Die Auswirkung der phänomenologischen Korrektur wird in Abbildung 3.9 deutlich, wo wir die mit korrelierten Matrixelementen berechnete mittlere Energie pro Teilchen mit und ohne Korrektur aufgetragen haben. Der Vergleich zeigt deutlich, dass obwohl die Parameter der Korrektur nicht auf die Kernmaterie abgestimmt sind, die korrigierten Wechselwirkungsmatrixelementen einen Sättigungspunkt in deutlich besserer Übereinstimmung mit dem empirischen Erwartungswert liefern, als die reinen korrelierten Matrixelemente. Wir erhalten

$$k_{F_0} = 1.27 \text{ fm}^{-1} \quad \text{und} \quad \varepsilon_0 = -15.94 \text{ MeV} . \quad (3.95)$$

Abbildung 3.10 zeigt die Umgebung des Sättigungspunktes und den Vergleich mit der empirischen Region im Detail.

Mit Hilfe der Gleichung (3.4) erhalten wir für die Inkompressibilität:

$$K = 290 \text{ MeV} , \quad (3.96)$$

was ebenfalls im Rahmen der empirischen Werte liegt.

Zusätzlich zur Zustandsgleichung, d.h. der Gesamtenergie pro Teilchen, können wir eine Reihe von Einteilchengrößen bestimmen. Dazu zählt insbesondere das in Abschnitt

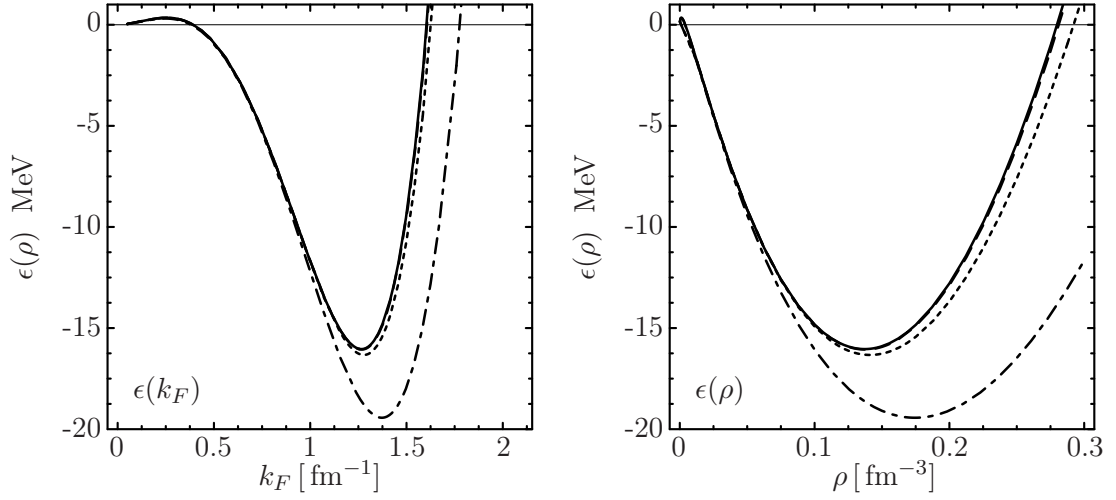


Abbildung 3.8: Partialwellenkonvergenz für symmetrische Kernmaterie berechnet mit korrelierten Zuständen (α -Korrelator) und phänomenologischer Korrektur. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für $L_{\max} = 2$ (dash-dot), $L_{\max} = 4$ (dotted), $L_{\max} = 6$ (dashed) und $L_{\max} = 8$ (solid) dar. Die Parameter für die Korrektur entsprechen denen aus der Tabelle 3.3.

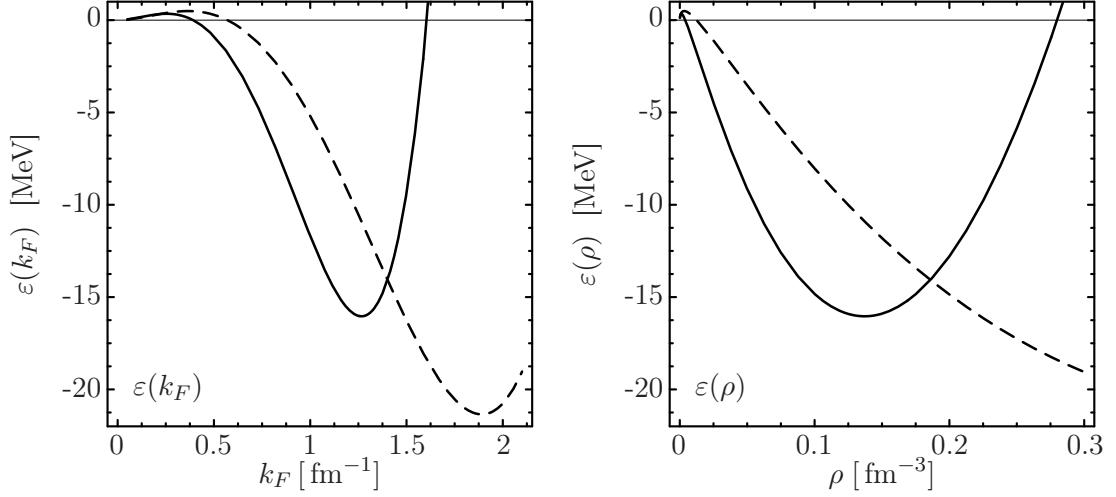


Abbildung 3.9: Wirkung der phänomenologischen Korrektur. Vergleich der Zustandsgleichungen für symmetrische Kernmaterie mit (solid), und ohne Korrektur (dashed) (α -Korrelator, $L_{\max} = 8$). Die Parameter für die Korrektur sind in der Tabelle 3.3 notiert.

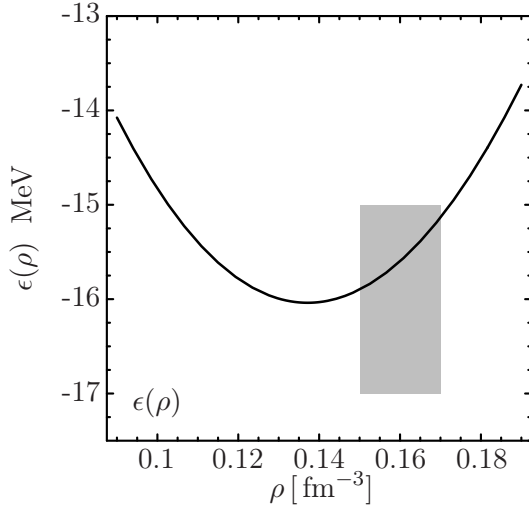


Abbildung 3.10: Sättigungspunkt der mittleren Energie pro Teilchen, berechnet für symmetrische Kernmaterie mit zustandskorrelierten Matrixelementen (α -Korrelator) und mit phänomenologischer Korrektur. Das Bild ist eine vergrößerte Darstellung der Abbildung 3.8 (rechts) für $L_{\max} = 8$.

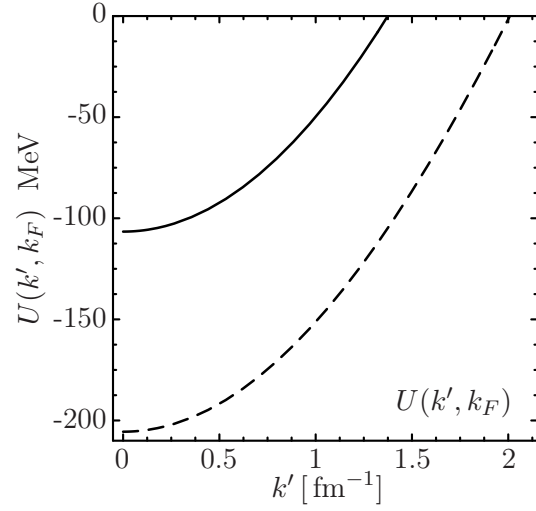


Abbildung 3.11: Einteilchenpotential $U(k_F, k)$. Die gestrichelte Linie (---) zeigt das Ergebnis für die korrelierte Wechselwirkung, die durchgezogene Linie (—) für die korrelierte Wechselwirkung mit zusätzlicher phänomenologischer Korrektur. Beide nutzen den α -Korrelator und sind für $L_{\max} = 8$ gerechnet.

3.2.4 definierte Einteilchenpotential $U(k_F, k)$, woraus wir die Einteilchenenergie definiert haben.

Abbildung 3.11 zeigt die durch (3.83) definierte Einteilchenenergie, berechnet mit und ohne die phänomenologische Korrektur, ausgewertet für den Fermimpuls am jeweiligen Sättigungspunkt. Die Auswertung des Einteilchenenergie an der Fermikante liefert

$$W(k_{F_0}) = -15.94 \text{ MeV} , \quad (3.97)$$

in Übereinstimmung mit der Energie am Sättigungspunkt $\varepsilon(k_{F_0})$. Damit ist das Hugenholtz–van Hove Theorem aus dem Abschnitt 3.2.6 numerisch erfüllt.

Aus dem Einteilchenpotential lässt sich desweiteren die effektive Masse nach Gleichung (3.84) extrahieren. Für die korrelierte Wechselwirkung mit phänomenologischer Korrektur ergibt sich der Wert

$$\frac{m^*}{m} = 0.37 . \quad (3.98)$$

Ohne Korrektur ergibt sich

$$\frac{m^*}{m} = 0.40 . \quad (3.99)$$

| L | ε MeV | ρ_F fm^{-3} | K MeV |
|-----|----------------------|------------------------------|------------|
| 2 | -19.4342 | 0.174441 | 305.724 |
| 3 | -16.0510 | 0.140767 | 275.757 |
| 4 | -16.3283 | 0.141126 | 287.437 |
| 5 | -15.9646 | 0.136730 | 287.634 |
| 6 | -16.0601 | 0.137536 | 289.808 |
| 7 | -16.0268 | 0.136986 | 290.577 |
| 8 | -16.0384 | 0.137159 | 290.455 |

Beide sind deutlich kleiner als typische Werte [30, 31, 37, 38, 25]. Bedenklich ist insbesondere, dass die phänomenologische Korrektur die effektive Masse noch weiter absenkt. Dies scheint durch die spezielle Struktur der Impulsabhängigkeit der Korrektur verursacht zu werden. Hier ergeben sich Ansatzpunkte für künftige Studien mit dem Ziel, die phänomenologische Korrektur auch diesbezüglich zu optimieren.

Tabelle 3.4: Die Ergebnisse für das Argonne-V18-Potential (α -Korrelator + Korrektur).

Kapitel 4

Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir die Methode der unitären Korrelatoren auf die Berechnung der Zustandsgleichung von Kernmaterie, ausgehend von realistischen Nukleon–Nukleon–Wechselwirkungen angewendet. Das Vielteilchenproblem wird dabei im Rahmen einer einfachen Hartree–Fock–Näherung behandelt. Der Vielteilchenzustand der Hartree–Fock–Näherung, eine einzelne Slaterdeterminante, ist nicht in der Lage, die dominanten kurzreichweitigen Zentral- und Tensorkorrelationen zu beschreiben, die von realistischen Nukleonen–Nukleonen–Wechselwirkungen erzeugt werden. Die explizite Beschreibung dieser Korrelationen mittels Korrelationsoperatoren ist daher wesentlich.

Nach einer kurzen Diskussion des Formalismus der Methode der unitären Korrelatoren, haben wir uns in Kapitel 2 der Berechnung korrelierter Matrixelemente zugewendet. Es gibt zwei mögliche Wege, diese Matrixelemente zu bestimmen: Einerseits kann man die Operatorform der korrelierten Wechselwirkung V_{ucom} direkt einsetzen, um die gewünschten Matrixelemente auszuwerten (operatorkorrelierte Matrixelemente). Andererseits kann man die Korrelationsoperatoren auf Zweiteilchen–Zustände anwenden und mit diesen korrelierten Zuständen die Matrixelemente der unkorrelierten Wechselwirkung bestimmen (zustandskorrelierte Matrixelemente). Obwohl der erste Weg formal einfacher ist, birgt er eine zusätzliche Näherung in sich, nämlich den Abbruch der Baker–Campbell–Hausdorff–Entwicklung zur Konstruktion des tensorkorrelierten Wechselwirkungsoperators. Der Vergleich der korrelierten Impulsraum–Matrixelemente für das Argonne–V18–Potential zeigt dementsprechend auch deutliche Unterschiede in den tensordominierten $S = 1, T = 0$ Kanälen. Darüber hinaus vergleichen wir die zustandskorrelierten Matrixelemente für verschiedene Reichweiten der Tensorkorrelator im $S = 1, T = 0$ Ka-

nal. Abschließend stellen wir die unitär korrelierten Matrixelemente denen des $V_{\text{low-k}}$ -Renormierungsgruppenverfahrens gegenüber. Obwohl beide Zugänge formal verschieden sind, verhalten sich die resultierenden Matrixelemente sehr ähnlich.

Aufbauend auf den korrelierten Impulsraum-Matrixelementen haben wir einen Ausdruck für die Energie pro Teilchen in Kern- und Neutronenmaterie bei Temperatur Null abgeleitet. Das Vielteilchenproblem wird dabei im Rahmen einer Hartree-Fock-Näherung behandelt. Die numerische Rechnung mit den Matrixelementen der realistischen Argonne-V18-Wechselwirkung führt auf keine physikalisch sinnvolle Zustandsgleichung. Erst die Einbeziehung von Korrelationen, d.h. die Verwendung korrelierter Matrixelemente, führt auf ein gebundenes System mit einem wohldefinierten Sättigungsverhalten. Der Vergleich mit dem empirischen Sättigungspunkt zeigt jedoch, dass das berechnete Minimum bei zu großen Dichten und zu großen Bindungsenergien liegt. Dies ist vorrangig auf die Vernachlässigung der Dreiteilchenbeiträge zum korrelierten Potential zurückzuführen. Ferner spielen langreichweitige Korrelationen, die weder durch die unitären Korrelatoren noch durch die Hartree-Fock-Zustände beschrieben werden können, eine Rolle. Hier bieten sich klare Ansatzpunkte für zukünftige Arbeiten.

Aus pragmatischer Sicht können diese fehlenden Beiträge durch eine einfache phänomenologische Korrektur zum korrelierten Potential simuliert werden. Eine derartige Korrektur wurde zuvor für die Beschreibung von Kernen im Massenbereich $4 \leq A \leq 50$ konstruiert. Die mit dieser Korrektur berechnete Zustandsgleichung liefert eine überraschend gute Beschreibung des globalen Sättigungsverhaltens der Kernmaterie. Gewisse Diskrepanzen ergeben sich jedoch für Einteilchengrößen wie z.B. die effektive Masse. Hier ergibt sich ein weiteres Arbeitsfeld für zukünftige Untersuchungen.

Anhang A

Notation and Konventionen

A.1 Einheiten und Konstanten

In dieser Arbeit benutzen wir

$$\hbar = c = 1 . \tag{A.1}$$

Der Umrechnungsfaktor hat folgenden Wert

$$\hbar c = 197.327053 \text{ MeV fm} . \tag{A.2}$$

| Nucleon Properties | | | |
|---------------------------|-----------|-------------------------|------|
| m_p [MeV] | 938.27231 | Masse des Proton | [6] |
| m_n [MeV] | 939.56563 | Masse des Neutron | [6] |
| m_N [MeV] | 938.91897 | Mittlere Nukleonenmasse | [6] |
| r_p [fm] | 0.862 | Proton Ladungsradius | [39] |

A.2 Gewöhnliche Funktionen

| | |
|------------------|-----------------------------|
| $j_l(kr)$ | sphärische Besselfunktionen |
| $Y_{lm}(\Omega)$ | Kugelflächenfunktionen |

A.3 Operatoren und Vektoren

Vektoren sind durch die fetten Symbole dargestellt, z.B. \mathbf{x} . Für Operatoren nutzen wir die gerade Schreibweise mit dem Schrift der Roman family: o. Vektoroperatoren sind demzufolge als mit Roman Schrift fett gedruckte Symbole zu sehen: \mathbf{L} . Einige allgemeine Vektoren sind in der Tabelle unten aufgelistet.

| Symbolkonventionen | | |
|--|----------------|---|
| Vektor | Operator | |
| $\hat{\mathbf{a}}$ | | allgemeine Einheitsvektor |
| \mathbf{x}_i | \mathbf{x}_i | Einteilchen Ortsvektor |
| \mathbf{k} | \mathbf{k} | Einteilchen Impulsvektor |
| $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ | \mathbf{r} | relative Abstandsvektor von zwei Teilchen |
| $\mathbf{q} = \frac{1}{2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ | \mathbf{q} | relative Impuls von zwei Teilchen |
| \mathbf{K} | \mathbf{K} | center-of-mass Impulsvektor |

| Operatorkonventionen | |
|-----------------------------|--|
| o | k -Teilchen Operator in k -Teilchenraum |
| O | Operator in Vielteilchenraum |
| $O^{[k]}$ | irreduzible k -Teilchen Teil der Operator in Vielkörperraum |
| $o_{i_1 \dots i_k}$ | k -Körper Operator in Vielteilchenraum mit Definition auf dem Subraum der Teilchen i_1, \dots, i_k |
| C | Korrelationsoperator in Vielteilchenraum |
| $c = C_2$ | Korrelationsoperator in Zweiteilcherraum |
| $\tilde{O} = C^\dagger O C$ | korrelierte Operator in Vielteilchenraum |
| \tilde{O}^{C_2} | korrelierte Operator in Zweiteilchennäherung |
| $t_q^{(k)}$ | irreduzible sphärische Tensoroperator der Rang k |

A.4 Pauli-Matrizen

Die Paulimatrizen bezeichnet mit σ in Spin- und τ in Isospinraum, wahren

$$\sigma_1 = \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Projektionsoperatoren auf Spin-Singulett und Spin-Triplett sind

$$\Pi_0 = \frac{1}{4}(1 - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \quad \text{and} \quad \Pi_1 = \frac{3}{4}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2).$$

Die Isospinprojektoren sind durch die gleichen Relationen mit $\boldsymbol{\sigma}$ ausgetauscht gegen $\boldsymbol{\tau}$ gegeben.

A.5 Clebsch-Gordan Koeffizienten

Die Bezeichnung

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{array} \right)$$

ist fur die *Clebsch-Gordan-Koeffizienten* benutzt, um die Unitaritat der Transformationen zwischen verschiedenen Basen zu unterstreichen.

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | (a) Zentralteil des Argonne–V18–Potentials im $(S, T) = (0, 1)$ Kanal. (b) Zweiteilchendichte $\rho_{S=0, T=1}^{(2)}(\mathbf{r})$ für ^4He , berechnet mit einer Slaterdeterminante von Gauß’schen Einteilchenzuständen (---), im Vergleich zur zentralkorrelierten Zweiteilchendichte (—) [4]. | 4 |
| 1.2 | Klassische Analogie für die Tensorkraft zwischen parallel (linkes Bild) und antiparallel (rechtes Bild) orientierten Spins. Gezeigt sind die Werte der klassischen tensoriellen Struktur, die dem s_{12} –Operator entspricht. σ_i ist als klassischer Vektor zu verstehen, z.B. als magnetisches Dipolmoment [3, 4]. | 7 |
| 1.3 | Konstruktion von Deuteron Wellenfunktion für Argonne–V18–Potential. Wir starten bei der unkorrelierter Wellenfunktion auf der Abbildung (a). Anwendung des Zentralkorrelators mit der Korrelationsfunktion $R_+(r)$, die in (d) abgebildet ist, führt zur zentralkorrelierten Wellenfunktion im Bild (b). Durch Anwendung des Tensorkorrelators mit der im Bild (e) gezeigten Korrelationsfunktion erhält man die vollständig korrelierte Wellenfunktion in Abbildung (c). Diese Wellenfunktion enthält eine $L = 2$ (D –Welle) Beimischung und stellt somit eine realistische Deuteron–Wellenfunktion dar. | 12 |
| 2.1 | Radiale Abhängigkeiten $v_{ST}^c(r)$ der Zentralterme des Argonne–V18–Potentials. Die Plots sind der Arbeit [15] entnommen. | 20 |
| 2.2 | Radiale Abhängigkeiten der nichtzentralen Terme des Argonne–V18–Potentials. Die Plots stammen aus [15]. | 21 |

- 2.3 Optimale zentrale (a) und tensorielle (b) Korrelationsfunktionen für das Argonne-V18-Potential. Die unterschiedlichen Linien zeigen einzelne (S, T) -Kanäle: $(0, 1) - (\text{---})$, $(1, 0) - (\text{—})$, $(0, 0) - (\text{.....})$, $(1, 1) - (\text{---})$ 27
- 2.4 Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: unkorrelierte, operatorkorrelierte und zustandskorrelierte Matrixelemente im Vergleich. Es wurde der α -Korrelator verwendet. 38
- 2.5 Ausgewählte Partialwellen: unkorrelierte, operatorkorrelierte und zustandskorrelierte Matrixelemente im Vergleich. Fortsetzung von Abbildung 2.4 . 39
- 2.6 Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte Matrixelemente für α , β und γ -Korrelatoren. 40
- 2.7 Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte Matrixelemente für α , β und γ -Korrelatoren. Fortsetzung von Abbildung 2.6 . . 41
- 2.8 Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte (α -Korrelator) im Vergleich zu den $V_{\text{low-k}}$ Matrixelementen für $\Lambda = 2.1 \text{ fm}^{-1}$ [21]. . . . 42
- 2.9 Matrixelemente für ausgewählte Partialwellen: zustandskorrelierte (α -Korrelator) im Vergleich zu den $V_{\text{low-k}}$ Matrixelementen für $\Lambda = 2.1 \text{ fm}^{-1}$ [21]. Fortsetzung von Abbildung 2.8 43
- 3.1 Zur Integrationsgrenzen und Variablentransformation bei dem Kontinuumsübergang. 61
- 3.2 Partialwellenkonvergenz der Zustandsgleichung für symmetrische Kernmaterie, berechnet mit dem unkorrelierten Argonne-V18-Potential. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für verschiedene Bahndrehimpulse dar: $L_{\text{max}} = 2 (\text{---})$, $L_{\text{max}} = 4 (\text{.....})$, $L_{\text{max}} = 6 (\text{---})$ und $L_{\text{max}} = 8 (\text{—})$. Ein Unterschied zwischen den einzelnen Linien ist kaum wahrnehmbar. Es existiert kein Minimum (also kein Sättigungsverhalten für die Zustandsgleichung). 68
- 3.3 Partialwellenkonvergenz der Zustandsgleichung für symmetrische Kernmaterie, berechnet mit zustandskorrelierten Matrixelementen des Argonne-V18-Potentials. Im $ST = 10$ -Kanal wird der α -Korrelator verwendet. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für folgende Bahndrehimpulse dar: $L_{\text{max}} = 2 (\text{---})$, $L = 4 (\text{.....})$, $L_{\text{max}} = 6 (\text{---})$ und $L_{\text{max}} = 8 (\text{—})$. . . 68

3.4 Vergleich der Zustandsgleichung für verschiedene Korrelatoren. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für das AV18-Potential, berechnet mit α (—), β (---) und γ -Korrelator (.....) dar. Alle Zustände sind bis einschließlich $L_{\max} = 8$ aufsummiert worden. 69

3.5 Auswirkung der Transformationsart auf die Zustandsgleichung für die symmetrische Kernmaterie ($L_{\max} = 8$, α -Korrelator, Argonne-V18-Potential). Dargestellt wird die mittlere Energie pro Teilchen, berechnet mit zustandskorrelierten (—) bzw. operatorkorrelierten (---) Matrixelementen. . . 70

3.6 Partialwellenkonvergenz für die Zustandsgleichung der Neutronenmaterie, berechnet mit zustandskorrelierten Matrixelementen (α -Korrelator, Argonne-V18-Potential). Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für folgende Bahndrehimpulse dar: $L_{\max} = 2$ (.....), $L_{\max} = 4$ (.....), $L_{\max} = 6$ (---) und $L_{\max} = 8$ (—). Die relativen Änderungen mit der Zunahme von höheren Bahndrehimpulsen ist sehr klein, womit wir $L_{\max} = 8$ als gute Näherung betrachten können. 72

3.7 Vergleich der Zustandsgleichungen der Neutronenmaterie für unkorrelierte (—) zustandskorrelierte (---) und operatorkorrelierte Matrixelemente (.....). Verwendet wurden $L_{\max} = 8$ und α -Korrelator für des Argonne-V18-Potentials. 73

3.8 Partialwellenkonvergenz für symmetrische Kernmaterie berechnet mit korrelierten Zuständen (α -Korrelator) und phänomenologischer Korrektur. Die einzelnen Kurven stellen die Ergebnisse für $L_{\max} = 2$ (.....), $L_{\max} = 4$ (.....), $L_{\max} = 6$ (---) und $L_{\max} = 8$ (—) dar. Die Parameter für die Korrektur entsprechen denen aus der Tabelle 3.3. 76

3.9 Wirkung der phänomenologischer Korrektur. Vergleich der Zustandsgleichungen für symmetrische Kernmaterie mit (—), und ohne Korrektur (---) (α -Korrelator, $L_{\max} = 8$). Die Parameter für die Korrektur sind in der Tabelle 3.3 notiert. 76

3.10 Sättigungspunkt der mittlerer Energie pro Teilchen, berechnet für symmetrische Kernmaterie mit zustandskorrelierten Matrixelementen (α -Korrelator) und mit phänomenologischer Korrektur. Das Bild ist eine vergrößerte Darstellung der Abbildung 3.8 (rechts) für $L_{\max} = 8$ 77

- 3.11 Einteilchenpotential $U(k_F, k)$. Die gestrichene Linie (---) zeigt das Ergebnis für die korrelierte Wechselwirkung, die durchgezogene Linie (—) für die korrelierte Wechselwirkung mit zusätzlicher phänomenologischer Korrektur. Beide nutzen den α -Korrelator und sind für $L_{\max} = 8$ gerechnet. 77

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|--|----|
| 3.1 | Werte der Parameter der Bethe–Weizsäcker Formel für einen Fit an experimentelle Daten. (Quelle: [24]) | 46 |
| 3.2 | Zusammengefasste Ergebnisse der Kernmaterierechnung für korreliertes AV18–Potential. Dargestellt sind die Werte für $L_{\max} = 8$. Die erste, durch eine dünne Linie abgetrennte, Zeile gibt die Werte mit operatorkorrelierten Matrixelementen, die restlichen (α , β und γ) basieren auf zustandskorrelierten Matrixelementen. | 71 |
| 3.3 | Parameter der phänomenologischen Korrektur zum AV18–Potential. . . . | 74 |
| 3.4 | Die Ergebnisse für das Argonne–V18–Potential (α –Korrelator + Korrektur). | 78 |

Literaturverzeichnis

- [1] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, and J. Schnack, Nucl. Phys. A **632**, 61 (1998).
- [2] R. Roth, *Effektive Wechselwirkungen für Quantenflüssigkeiten und Quantengase: Kernmaterie, Flüssiges Helium und ultrakalte atomare Fermigase*, PhD Thesis, TU Darmstadt, 2000.
- [3] T. Neff, *Short-Ranged Central and Tensor Correlations in Nuclear Many-Body Systems*, PhD Thesis, TU Darmstadt, 2002.
- [4] R. Roth, T. Neff, H. Hergert, and H. Feldmeier, Nucl. Phys. A **745**, 3 (2004).
- [5] H. Bucka, *Atomkerne und Elementarteilchen*, deGruyter, 1973.
- [6] K. Hagiwara et al., Phys. Rev. D **66**, 010001 (2002).
- [7] V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen, and J. J. de Swart, Phys. Rev. C **49**, 2950 (1994).
- [8] R. Machleidt and I. Slaus, J. Phys. G **27**, R69 (2001).
- [9] R. Brockmann and R. Machleidt, Phys. Rev. C **42**, 1965 (1990).
- [10] J. Bienlein and R. Wiesendanger, *Einführung in die Struktur der Materie*, Teubner, 2003.
- [11] E. Fick, *Quantenmechanik*, Oldenbourg Verlag München Wien, 2000.
- [12] J. Wess, *Quantenmechanik II*, Sektion Physik der Ludwig-Maximilians-Universität, Manuscript, 1998, www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess/qm2.ps.
- [13] R. Roth, Die Methode der unitären Korrelatoren, Diploma Thesis, TU Darmstadt, 1997.

- [14] R. B. Wiringa, V. Stoks, and R. Schiavilla, *Phys. Rev. C* **51**, 38 (1995).
- [15] H. Hergert, *Correlated NN-Interactions and Phenomenological Corrections for Nuclear Structure Calculations*, Diploma Thesis, TU Darmstadt, 2004.
- [16] R. Machleidt, *Adv. Nucl. Phys.* **19**, 189 (1989).
- [17] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1st edition, 1985.
- [18] E. Rebban, *Theoretische Physik II*, Spektrum, 2005.
- [19] V. F. Müller, *Quantenmechanik*, Oldenbourg Verlag München Wien, 2000.
- [20] S. K. Bogner, T. T. S. Kuo, A. Schwenk, and G. E. Brown, nucl-th/0111042 v1, 17 March 2004.
- [21] S. K. Bogner, T. T. S. Kuo, and A. Schwenk, *Phys. Rep.* **386**, 1 (2003).
- [22] H. Otter, *Atome-Moleküle-Kerne, Band II*, B. G. Teubner Stuttgart, 1996.
- [23] E. M. Henley and H. Frauenfelder, *Teilchen und Kerne*, R. Oldenbourg Verlag München Wien, 1999.
- [24] H. Stöcker, *Taschenbuch der Physik*, Harri Deutsch, 1998.
- [25] S. Fritsch, N. Kaiser, and W. Weise, *Nucl. Phys. A* **750**, 259 (2005).
- [26] H. Huber, F. Weber, and M. K. Weigel, *Phys. Rev. C* **51**, 1790 (1995).
- [27] W. Greiner, *Quantenmechanik, Teil 1 - Einführung*, Verlag Harri Deutsch, 1989.
- [28] A. E. Edmonds, *Drehimpulse in der Quantenmechanik*, Hochschultaschenbücher-verlag, 1964.
- [29] M. Kofler and H.-G. Gräbe, *Mathematica*, Addison-Wesley, 2002.
- [30] K. A. Brueckner, *Phys. Rev.* **110**, 597 (1958).
- [31] B. Behera and R. K. Satpathy, *J. Phys. G* **5**, 85 (1979).
- [32] R. B. Wiringa, *Phys. Rev. C* **38**, 2967 (1988).
- [33] S. Fritsch and N. Kaiser, *Eur. Phys. J. A* **17**, 11 (2003).
- [34] N. M. Hugenholtz and L. van Hove, *Physica* **24**, 363 (1958).

- [35] L. Satpathy and R. Nayak, Phys. Rev. Lett. **51**, 1243 (1983).
- [36] P. Czerski, Phys. Rev. C **65**, 044317 (2002).
- [37] N. Kaiser, S. Fritsch, and W. Weise, Nucl. Phys. A **697**, 255 (2002).
- [38] S. Goriely, M. Samyn, M. Bender, and J. M. Pearson, Phys. Rev. C **68**, 054325 (2003).
- [39] G. G. Simon, C. Schmitt, F. Borkowski, and V. H. Walther, Nucl. Phys. A **333**, 381 (1980).

Danksagung

Das Entstehen dieser Arbeit wäre ohne die Hilfe und Unterstützung meiner Freunde, Mitarbeiter und Verwandten nicht möglich gewesen. Dafür bedanke ich mich bei allen.

Insbesondere möchte ich Prof. Dr. Robert Roth für die Gelegenheit danken, diese Arbeit zu verfassen. Seine intensive Betreuung in allen fachlichen und auch persönlichen Fragen hat maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Ein besonderer Dank geht auch an Heiko Hergert, der nicht nur stets bereit war mich während der Arbeit mit seinem großen fachlichen Wissen zu unterstützen, sondern auch als ausschlaggebende Instanz für die Korrekturen und Verbesserungsvorschläge beigetragen hat.

Prof. Dr. T.T.S. Kuo, University of New York, Stone Brook (USA), sei gedankt für die Übermittlung des Computer-Codes mit Impulsraummatrixelementen der $V_{\text{low-k}}$ -Gruppe.