



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
DARMSTADT

Padé-Resummierte  
Vielteilchen-Störungstheorie hoher Ordnung  
für doppelmagische Kerne mit realistischen  
Potentialen

Bachelor-Thesis

Joachim Langhammer

September 2008



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Elemente der Vielteilchen-Quantenmechanik</b>	<b>3</b>
2.1	Vielteilchen-Hilbertraum identischer Teilchen . . . . .	3
2.2	Antisymmetrische Zustände und ihr Hilbertraum . . . . .	5
2.3	„Slater-Regeln“ – Matrixelemente von Zweiteilchen-Operatoren . .	6
2.3.1	Gleiche Zustände (Erwartungswert) . . . . .	7
2.3.2	Unterschied durch genau eine Quantenzahl . . . . .	8
2.3.3	Unterschied durch genau zwei Quantenzahlen . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Korrelierte realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale</b>	<b>11</b>
<b>4</b>	<b>Schrödingersche Vielteilchen-Störungstheorie</b>	<b>15</b>
4.1	Herleitung der Energie- und Zustandskorrekturen . . . . .	15
4.2	Anmerkungen zum Hamiltonian - Partitionierung . . . . .	18
4.3	Anwendung der Störungsrechnung für $^4\text{He}$ . . . . .	20
4.4	Anwendung der Störungsrechnung für $^{16}\text{O}$ . . . . .	21
<b>5</b>	<b>Padé-Approximation</b>	<b>25</b>
5.1	Idee und Definition der Padé-Approximation . . . . .	25
5.2	Konvergenzeigenschaften der Padé-Approximanten . . . . .	29
5.2.1	Stieltjes-Reihen und Padé-Approximation . . . . .	29
5.2.2	Padé-Annahme . . . . .	30
5.3	Anwendungsbeispiel für eine analytische Funktion . . . . .	31
5.4	Anwendungsbeispiel für $^4\text{He}$ . . . . .	32
5.5	Anwendungsbeispiel für $^{16}\text{O}$ . . . . .	35
<b>6</b>	<b>Anwendung auf doppelt-magische Kerne</b>	<b>39</b>
6.1	$^4\text{He}$ . . . . .	39
6.2	$^{16}\text{O}$ . . . . .	43
6.3	$^{40}\text{Ca}$ . . . . .	47
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>51</b>
<b>A</b>	<b>Mathematica-Code</b>	<b>53</b>



# 1 Einleitung

Die Hauptaufgabe der theoretischen Kernphysik besteht darin, die Eigenschaften eines Atomkerns, ausgehend von der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung, zu bestimmen. Dafür muss die zeitunabhängige Schrödingergleichung des Vielteilchen-Systems gelöst werden, was im Wesentlichen aus zwei Gründen alles andere als trivial ist.

Zunächst steht man vor dem Problem, den Hamiltonoperator des Kerns zu formulieren, der die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Nukleonen (korrekt) beschreibt, was bis heute Gegenstand intensiver Forschung ist. Auch aus der quantenfeldtheoretischen Beschreibung der starken Wechselwirkung, der Quantenchromodynamik, ist es bisher nicht möglich die Wechselwirkung herzuleiten. Allerdings kann aus grundlegenden Symmetrieforderungen und mit Hilfe der Mesonenaustauschtheorie auf die mögliche Operatorstruktur geschlossen werden. Aus Nukleon-Nukleon-Streuung wurden im letzten Jahrzehnt realistische NN-Potentiale, wie Argonne-V18 und CD-Bonn, konstruiert, welche die experimentellen NN-Streudaten mit hoher Präzision beschreiben. Nähere Erläuterungen zu dem für diese Arbeit verwendeten Hamiltonian finden sich in Abschnitt 3.

Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt auf dem zweiten Problem, der Lösung der Eigenwertgleichung. Da es sich um ein Vielteilchen-Problem handelt, das nicht mehr analytisch gelöst werden kann, müssen alternative Methoden zur näherungsweise Lösung gefunden werden. Dabei gibt es wiederum mehrere Möglichkeiten. Auf der einen Seite steht eine exakte Diagonalisierungsrechnung bei der zunächst eine Basis des Modellraums gewählt wird und die einzelnen Matrixelemente des Hamiltonoperators bezüglich dieser Basis berechnet werden. Von der so erhaltenen Hamiltonmatrix wird anschließend mit einem iterativen Verfahren das Eigenwertproblem gelöst. Andererseits kann versucht werden, durch störungstheoretische Rechnungen bis zu hohen Ordnungen Eigenzustände und Eigenenergien zu erhalten.

Letztere Methode wird in dieser Arbeit gewählt: Mit Hilfe der zeitunabhängigen Rayleigh-Schrödingerschen (RS) Vielteilchen-Störungstheorie sollen die Grundzustandsenergien verschiedener Kerne bestimmt werden. Dazu werden zunächst einige Grundlagen der Vielteilchen-Quantenmechanik benötigt, die in Abschnitt 2 vorgestellt werden. In Abschnitt 3 wird der verwendete Hamiltonian diskutiert und anschließend in Abschnitt 4 die RS-Vielteilchen-Störungstheorie entwickelt, die von der mathematischen Struktur sehr ähnlich zur RS-Einteilchen-Störungstheorie ist. Da die Konvergenz der Störungsreihen auch bei Entwicklung bis in hohe Ordnungen alles andere als garantiert ist (siehe 4.4), wird in Abschnitt 5 die Padé-Approximation vorgestellt. Dabei werden die einzelnen Korrekturen aus der Störungsrechnung nicht einfach aufsummiert, sondern zur Konstruktion einer gebrochenrationalen Funktion verwendet, die nach Auswertung an der physikalischen Stelle eine Näherung für die Grundzustandsenergie liefert. Diese wird dann mit der Grundzustandsenergie aus der exakten Diagonalisierungsrechnung verglichen, was die Grundlage der Diskussion der Leistungsfähigkeit und Stabilität der Padé-Approximation darstellt. Es besteht dabei die Hoffnung, dass der Rechenaufwand für die Störungsrechnung im Vergleich zur exakten Diagonalisierung geringer ist. Im An-

---

hang dieser Arbeit ist der Mathematica-Programmcode der Auswertung für Helium gezeigt. Allerdings sind Berechnungen mit Mathematica numerisch nicht sehr effizient, so dass für konkrete Anwendungen auf ein C-Programm zurückgegriffen wird.

## 2 Elemente der Vielteilchen-Quantenmechanik

In dieser Arbeit werden verschiedene Atomkerne mit Hilfe der zugrunde liegenden Theorie der Quantenmechanik beschrieben. Da ein Atomkern aus mehreren Teilchen, den Nukleonen, besteht, muss die Vielteilchen-Quantenmechanik benutzt werden.

Daher sollen im Folgenden die wichtigsten Erweiterungen zur Einteilchen-Quantenmechanik beschrieben werden. Dabei wird die Diskussion gleich auf die später relevanten Fälle eingeschränkt. In Abschnitt 2.1 soll auf die Beschreibung identischer, also ununterscheidbarer Teilchen eingegangen werden und in Abschnitt 2.2 wird weiter auf antisymmetrische Zustände spezialisiert, wie man sie für ein fermionisches Vielteilchensystem benötigt.

### 2.1 Vielteilchen-Hilbertraum identischer Teilchen

Wenn man einen Atomkern durch die enthaltenen Nukleonen beschreiben will, muss man zunächst einen Hilbertraum definieren, der diese Beschreibung erlaubt. Das heißt, man muss einen Vielteilchen-Hilbertraum spezifizieren, in dem die einzelnen möglichen Zustände des Vielteilchensystems definiert sind.

Man kann sich nun vorstellen, dass jeder Freiheitsgrad jedes einzelnen Nukleons in seinem zugehörigen Einteilchen-Hilbertraum zu der Zahl der Freiheitsgrade der  $A$  Nukleonen im Vielteilchen-Hilbertraum beiträgt. Deshalb wird der Vielteilchen-Hilbertraum durch ein Kroneckerprodukt der Einteilchen-Hilberträume beschrieben [2]:

$$\mathcal{H}_A = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1. \quad (1)$$

Da es sich bei den Nukleonen um identische Teilchen handelt, sind die Einteilchen-Hilberträume aller Nukleonen gleich.

Es liegt nun nahe, Vielteilchen-Zustände im Produktraum  $\mathcal{H}_A$  als Produktzustände aus Einteilchen-Zuständen  $\{|\alpha_i\rangle\}$  zu definieren:

$$|\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_A\rangle \equiv |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes |\alpha_3\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_A\rangle. \quad (2)$$

Berücksichtigt man alle möglichen Kombinationen der Einteilchen-Zustände, kann man zeigen, dass diese Produktzustände eine Basis von  $\mathcal{H}_A$  bilden, wenn die Zustände  $\{|\alpha_i\rangle\}$  eine Basis des Einteilchen-Hilbertraumes bilden. Dabei soll  $\alpha$  als zusammenfassende Quantenzahl für alle Quantenzahlen eines Teilchens verstanden werden.

Allerdings gibt es mit den so definierten Produktzuständen ein Problem: Es soll ein Atomkern beschrieben werden, also ein System aus  $A$  *ununterscheidbaren* Teilchen. Der Produktzustand in Gleichung (2) macht eine Zuordnung zwischen Einteilchen-Raum und Einteilchen-Zustand, die physikalisch keinen Sinn macht. Es ist nicht möglich zu entscheiden welches Teilchen in welchem Zustand ist, da jede physikalische Observable unabhängig von der Reihenfolge der Einteilchen-Zustände im Produktzustand sein muss. Dies kann auch

mathematisch durch die Tatsache ausgedrückt werden, dass jeder sinnvolle Vielteilchen-Zustand ununterscheidbarer Teilchen ein Eigenzustand zum Transpositionsoperator  $\mathbf{T}(ij)$  mit Eigenwert  $\pm 1$  sein muss:

$$\mathbf{T}(ij) |\phi\rangle = \pm |\phi\rangle \quad \forall i, j. \quad (3)$$

$\mathbf{T}(ij)$  vertauscht hier die Einteilchenräume  $i$  und  $j$  miteinander. Zustände mit Eigenwert  $+1$  bezeichnet man als symmetrisch und solche mit Eigenwert  $-1$  als antisymmetrisch.

Betrachtet man nun außerdem den Erwartungswert eines beliebigen Operators  $\mathbf{O}$  in einem allgemeinen Vielteilchenzustand ununterscheidbarer Teilchen  $|\phi\rangle$ , findet man:

$$\begin{aligned} & \langle \phi | \mathbf{O} | \phi \rangle \\ \stackrel{!}{=} & \langle \phi | \mathbf{T}^\dagger(ij) \mathbf{O} \mathbf{T}(ij) | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Damit folgt, dass jeder Operator invariant unter Transpositionen sein muss:

$$\mathbf{T}^\dagger(ij) \mathbf{O} \mathbf{T}(ij) \stackrel{!}{=} \mathbf{O} \iff [\mathbf{T}(ij), \mathbf{O}] \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall i, j. \quad (5)$$

Es muss also jeder Operator auf alle Einteilchen-Hilberträume die gleiche Auswirkung haben, da sonst wieder ein Teilchen ausgezeichnet wäre.

Aus den Gleichungen (3) und (5) ergeben sich folgende Eigenschaften [1]:

- Gleichung (5) muss für den Hamiltonoperator und, wegen  $\mathbf{U} = \exp(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}t)$  (vorausgesetzt  $\mathbf{H}$  hängt nicht explizit von der Zeit ab; die Aussage ist dennoch allgemeingültig), auch für den Zeitentwicklungsoperator  $\mathbf{U}$  gelten. Daraus folgt, dass die Symmetrie eines Zustandes eine Erhaltungsgröße ist.
- Symmetrische Zustände  $|\phi\rangle_s$  und antisymmetrische Zustände  $|\phi\rangle_a$  sind orthogonal:

$${}_s\langle \phi | \phi \rangle_a = {}_s\langle \phi | \mathbf{T}^\dagger(ij) \mathbf{T}(ij) | \phi \rangle_a = -{}_s\langle \phi | \phi \rangle_a = 0. \quad (6)$$

- Es gibt keinen Operator der aus symmetrischen Zuständen antisymmetrische macht:

$${}_s\langle \phi | \mathbf{O} | \phi \rangle_a = {}_s\langle \phi | \mathbf{T}^\dagger(ij) \mathbf{O} \mathbf{T}(ij) | \phi \rangle_a = -{}_s\langle \phi | \mathbf{O} | \phi \rangle_a = 0. \quad (7)$$

- Alle möglichen Zustände eines Systems identischer Teilchen sind entweder Elemente von  $\mathcal{H}_A^{sym.}$  oder  $\mathcal{H}_A^{antisym.}$ . Könnte das System auch in Zuständen verschiedener Symmetrie sein, wären auch Superpositionen aus diesen mögliche Zustände, die dann keine definierte Symmetrie hätten.

Auf Grund dieser Eigenschaften macht es Sinn die Zustände und den Hilbertraum wie folgt zu klassifizieren [1, 2]:

Art des Zustands	Art des Hilbertraumes
symmetrischer Zustand $\mathbf{T}(ij) \phi\rangle = + \phi\rangle$	„symmetrisch“ $\mathcal{H}_A^{sym.}$
antisymmetrischer Zustand $\mathbf{T}(ij) \phi\rangle = - \phi\rangle$	„antisymmetrisch“ $\mathcal{H}_A^{antisym.}$
indefiniter Zustand $\mathbf{T}(ij) \phi\rangle =  \psi\rangle$ (kein Eigenzustand)	„indefinit“ $\mathcal{H}_A^{indef.}$

Bei der Beschreibung eines physikalischen Systems ist es wichtig zu wissen, welche Art von Zuständen verwendet werden müssen. Bosonische Systeme werden durch symmetrische Zustände und fermionische Systeme durch antisymmetrische Zustände beschrieben. Das Kriterium zur Einteilung von Elementarteilchen in die Klassen Bosonen und Fermionen liefert das Spin-Statistik-Theorem [6]. Es besagt, dass Bosonen ganzzahligen Spin und Fermionen halbzahligen Spin tragen. Zustände ohne definierte Transpositionssymmetrie beschreiben keine physikalischen Systeme.

Der gesamte Vielteilchen-Hilbertraum ergibt sich dann durch die direkte Summe der drei Teilräume:

$$\mathcal{H}_A = \mathcal{H}_A^{sym.} \oplus \mathcal{H}_A^{antisym.} \oplus \mathcal{H}_A^{indef.} . \quad (8)$$

## 2.2 Antisymmetrische Zustände und ihr Hilbertraum

Da im Folgenden ein Atomkern beschrieben werden soll, der mit Protonen und Neutronen aus Fermionen besteht, müssen nach oben erwähntem Spin-Statistik-Theorem antisymmetrische Zustände benutzt werden. Da die in Gleichung (2) definierten Produktzustände eine Basis des Produktraumes  $\mathcal{H}_A$  bilden und darin der Raum der antisymmetrischen Zustände als Teilraum  $\mathcal{H}_A^{antisym.}$  enthalten ist, kann man die antisymmetrischen Zustände aus dem  $\mathcal{H}_A$  heraus projizieren.

Dazu definiert man den Antisymmetrisierungsoperator  $\mathcal{A}$ :

$$\mathcal{A} = \frac{1}{A!} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^p \mathcal{P} . \quad (9)$$

Dabei steht  $\mathcal{P}$  für den Permutationsoperator, der alle möglichen Permutationen der Einteilchen-Zustände generiert. Die Summe geht über alle Permutationen und  $p$  steht für die Anzahl der Transposition die nötig sind um die Permutation darzustellen. Das heißt  $(-1)^p$  entspricht der Signatur der Permutation. Wendet man den Antisymmetrisierungsoperator auf einen Produktzustand an, resultiert eine Superposition der permutierten Produktzustände, die jeweils durch die Signatur bereits das benötigte Vorzeichen haben. Dies kann man zeigen, in dem man den Transpositionsoperator auf einen antisymmetri-

sierten Zustand anwendet:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{T}(\mathbf{j})|\phi\rangle &= \mathbf{T}(\mathbf{j})\frac{1}{A!}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^p\mathcal{P}|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle \\
 &= \frac{1}{A!}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^p\mathbf{T}(\mathbf{j})\mathcal{P}|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle \\
 &= \frac{1}{A!}\sum_{\mathcal{P}'}(-1)^p\mathcal{P}'|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle \\
 &= \frac{1}{A!}\sum_{\mathcal{P}'}(-1)^{p'\mp 1}\mathcal{P}'|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle \\
 &= (-1)\cdot\frac{1}{A!}\sum_{\mathcal{P}'}(-1)^{p'}\mathcal{P}'|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle \\
 &= (-1)\cdot|\phi\rangle.
 \end{aligned} \tag{10}$$

Man kann außerdem zeigen, dass  $\mathcal{A}$  idempotent und hermitesch und somit tatsächlich ein Projektor ist.

Die antisymmetrischen Zustände sind durch

$$|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle_a = \sqrt{A!}\mathcal{A}|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^p\mathcal{P}|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle \tag{11}$$

definiert. Der zusätzliche Vorfaktor sorgt für die korrekte Normierung. Diese Definition entspricht der von Determinanten, so dass sich die antisymmetrisierten Produktzustände in Ortsdarstellung schreiben lassen als

$$\langle\vec{x}_1,\vec{x}_2,\dots,\vec{x}_A|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}}\begin{vmatrix} \alpha_1(\vec{x}_1) & \alpha_1(\vec{x}_2) & \dots & \alpha_1(\vec{x}_A) \\ \alpha_2(\vec{x}_1) & \alpha_2(\vec{x}_2) & \dots & \alpha_2(\vec{x}_A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_A(\vec{x}_1) & \alpha_A(\vec{x}_2) & \dots & \alpha_A(\vec{x}_A) \end{vmatrix} \quad \text{mit } \alpha_i(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\alpha_i\rangle. \tag{12}$$

Schließlich bleibt anzumerken, dass die antisymmetrischen Zustände ortho-normiert sind, sofern dies die Einteilchen-Zustände sind. Außerdem ist bei antisymmetrisierten Produktzuständen die Reihenfolge der Einteilchen-Zustände unwesentlich, da eine Änderung der Reihenfolge lediglich auf einen linear abhängigen Zustand zum Anfangszustand führt. Letzteres bewirkt den zusätzlichen Faktor  $\frac{1}{A!}$  in der Vollständigkeitsrelation:

$$\mathbf{1} = \frac{1}{A!}\sum_{\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A}|\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A\rangle_a\langle\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_A|. \tag{13}$$

## 2.3 „Slater-Regeln“ – Matrixelemente von Zweiteilchen-Operatoren

Nun sollen Regeln zur Berechnung von Matrixelementen von Zweiteilchen-Operatoren in antisymmetrisierten Vielteilchen-Zuständen abgeleitet werden. Es geht also um Ausdrücke der Form  ${}_a\langle\psi_1|\mathbf{V}_2|\psi_2\rangle_a$  mit dem Zweiteilchen-Operator  $\mathbf{V}_2 = \sum_{i<j}^A\mathbf{V}_{ij}$ . Dabei müssen verschiedene Fälle betrachtet werden, je

nachdem durch wie viele Quantenzahlen sich die Zustände  $|\psi_1\rangle$  und  $|\psi_2\rangle$  unterscheiden:

In Abschnitt 2.3.1 wird der Fall gleicher Zustände betrachtet, in 2.3.2 sollen sich die beiden Zustände durch genau eine Quantenzahl und in 2.3.3 durch genau zwei Quantenzahlen unterscheiden. Weitere Fälle brauchen nicht betrachtet werden, da ein Zweiteilchen-Operator nur Zustände verbinden kann, die sich durch nicht mehr als zwei Quantenzahlen unterscheiden. Dies liegt an der Orthonormalität der Einteilchen-Zustände. Allgemein kann man daher sagen, dass ein  $n$ -Teilchen-Operator nur Zustände verbinden kann, die sich um nicht mehr als  $n$  Quantenzahlen unterscheiden.

Um die folgenden Regeln anwenden zu können, muss darauf geachtet werden, dass die Zustände  $|\psi_1\rangle$  und  $|\psi_2\rangle$  so gut wie möglich übereinstimmen. Damit ist gemeint, dass die übereinstimmenden Quantenzahlen in Bra und Ket jeweils an der gleichen Stelle stehen müssen. Dies muss auch bei der Programmierung in Mathematica beachtet werden (siehe Anhang A).

### 2.3.1 Gleiche Zustände (Erwartungswert)

Der antisymmetrisierte Zustand ist gegeben durch:

$$|\psi\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^p \mathcal{P} \{|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_A\rangle\} . \quad (14)$$

Damit folgt:

$${}_a\langle\psi| \sum_{i<j} \mathbf{V}_{ij} |\psi\rangle_a = \frac{A(A-1)}{2} \cdot {}_a\langle\psi| \mathbf{V}_{12} |\psi\rangle_a . \quad (15)$$

Dabei wurde bereits genutzt, dass ein System von ununterscheidbaren Teilchen betrachtet wird.  $\mathbf{V}_{12}$  ist immernoch ein Operator, der in allen  $A$  Einteilchen-Hilberträumen wirkt. Die Notation  $\mathbf{V}_{12}$  bedeutet, dass der Operator in allen Einteilchen-Räumen außer 1 und 2 wie der Eins-Operator wirkt. Der Faktor  $\frac{A \cdot (A-1)}{2}$  berücksichtigt dann, dass sich für jeden Summand derselbe Beitrag ergibt und wegen  $i < j$  keine Wechselwirkungen doppelt gezählt werden dürfen. Nun folgt durch Einsetzen des Zustands:

$$\begin{aligned} & \frac{A(A-1)}{2} \frac{1}{A!} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^p \mathcal{P} \{ \langle\alpha_1| \otimes \langle\alpha_2| \otimes \dots \otimes \langle\alpha_A| \} \mathbf{V}_{12} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^p \mathcal{P} \{ |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_A\rangle \} \\ &= \frac{1}{2 \cdot (A-2)!} \sum_{i<j} (\langle\alpha_i\alpha_j| - \langle\alpha_j\alpha_i|) \mathbf{V} (|\alpha_i\alpha_j\rangle - |\alpha_j\alpha_i\rangle) \cdot (A-2)! . \end{aligned} \quad (16)$$

Im Schritt von der vorletzten zur letzten Zeile ist zu beachten, dass die beiden Permutationen die die Teilchen 3 bis  $A$  betreffen in Bra und Ket gleich sein müssen, da auf Grund der Orthogonalität der Zustände sonst Null resultieren würde. Es gibt also für diese Teilchen  $(A-2)!$  Möglichkeiten der Anordnung mit gleichen Resultaten. Außerdem können die ersten beiden Teilchen noch beliebig permutiert werden. Hier ist die Orthogonalität kein Problem, da noch

der Zweiteilchen-Operator  $\mathbf{V}$  wirkt. Die Summation läuft hier nur über  $i < j$ , um Doppelzählungen zu vermeiden. Somit lässt sich weiter umformen:

$$\begin{aligned}
 {}_a\langle\psi|\sum_{i<j}\mathbf{V}_{ij}|\psi\rangle_a &= \frac{1}{2}\sum_{i<j}(\langle\alpha_i\alpha_j|-\langle\alpha_j\alpha_i|)\mathbf{V}(|\alpha_i\alpha_j\rangle-|\alpha_j\alpha_i\rangle) \\
 &= \frac{\sqrt{2}\cdot\sqrt{2}}{2}\sum_{i<j}{}_a\langle\alpha_i\alpha_j|\mathbf{V}|\alpha_i\alpha_j\rangle_a \\
 &= \frac{1}{2}\sum_{i,j}{}_a\langle\alpha_i\alpha_j|\mathbf{V}|\alpha_i\alpha_j\rangle_a. \tag{17}
 \end{aligned}$$

Hier wurden wieder die antisymmetrischen Zweiteilchen-Zustände eingeführt, wobei jeweils über alle Einteilchenindizes summiert wird. Der Faktor  $\frac{1}{2}$  ergibt sich aus der unabhängigen Summation über  $i$  und  $j$  im letzten Schritt.

### 2.3.2 Unterschied durch genau eine Quantenzahl

Die beiden Zustände lauten hier:

$$\begin{aligned}
 |\psi_1\rangle_a &= \frac{1}{\sqrt{A!}}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^p\mathcal{P}\{|\alpha_1\rangle\otimes|\alpha_2\rangle\otimes\dots\otimes|\alpha_A\rangle\}, \\
 |\psi_2\rangle_a &= \frac{1}{\sqrt{A!}}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^p\mathcal{P}\{|\alpha'_1\rangle\otimes|\alpha_2\rangle\otimes\dots\otimes|\alpha_A\rangle\}.
 \end{aligned}$$

Damit folgt nun:

$$\begin{aligned}
 &{}_a\langle\psi_1|\sum_{i<j}\mathbf{V}_{ij}|\psi_2\rangle_a \\
 &= \frac{A(A-1)}{2\cdot A!}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^p\mathcal{P}\{\langle\alpha_1|\otimes\langle\alpha_2|\otimes\dots\otimes\langle\alpha_A|\}\mathbf{V}_{12}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^p\mathcal{P}\{|\alpha'_1\rangle\otimes|\alpha_2\rangle\otimes\dots\otimes|\alpha_A\rangle\}\} \\
 &= \frac{1}{2\cdot(A-2)!}\sum_{i=2}^A(\langle\alpha_1\alpha_i|-\langle\alpha_i\alpha_1|)\mathbf{V}(|\alpha'_1\alpha_i\rangle-|\alpha_i\alpha'_1\rangle)\cdot(A-2)! \\
 &= \frac{1}{2}\sum_{i=2}^A(\langle\alpha_1\alpha_i|-\langle\alpha_i\alpha_1|)\mathbf{V}(|\alpha'_1\alpha_i\rangle-|\alpha_i\alpha'_1\rangle).
 \end{aligned}$$

Zu bemerken ist hier, dass über  $\alpha_1$  nicht summiert wird, da  $\alpha_1$  genau die Quantenzahl ist, die ersetzt wurde. Die zweite Quantenzahl dagegen kann noch alle Werte  $\alpha_2\dots\alpha_A$  annehmen. Führt man nun wieder antisymmetrisierte Zustände ein findet man:

$${}_a\langle\psi_1|\sum_{i<j}\mathbf{V}_{ij}|\psi_2\rangle_a = \sum_{i=2}^A{}_a\langle\alpha_1\alpha_i|\mathbf{V}|\alpha'_1\alpha_i\rangle_a. \tag{18}$$

**2.3.3 Unterschied durch genau zwei Quantenzahlen**

Durch analoges Vorgehen wie in 2.3.2 findet man:

$${}_a\langle\psi_1|\sum_{i<j}\mathbf{V}_{ij}|\psi_2\rangle_a = {}_a\langle\alpha_1\alpha_2|\mathbf{V}|\alpha'_1\alpha'_2\rangle_a, \quad (19)$$

wobei

$$|\psi_1\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^p \mathcal{P} \{|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_A\rangle\},$$

$$|\psi_2\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^p \mathcal{P} \{|\alpha'_1\rangle \otimes |\alpha'_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_A\rangle\}.$$



### 3 Korrelierte realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale

Unter realistischen NN-Potentialen versteht man Potentiale, die experimentelle Nukleon-Nukleon-Streuphasen im Energiebereich bis  $E \lesssim 300$  MeV sowie die Eigenschaften des Deuterons sehr gut wiedergeben. Die Operatorstruktur dieser Potentiale kann durch elementare Symmetrieüberlegungen (Translations-symmetrie, Rotations-symmetrie etc.) bzw. im Rahmen der Mesonenaustauschtheorie hergeleitet werden (siehe [2]). Dennoch gibt es mehrere Potentiale mit verschiedener Struktur, die die experimentellen Streuphasen reproduzieren. Im Folgenden soll das Argonne-V18-Potential diskutiert werden. Die Operatorstruktur dieses Potentials lautet in Projektordarstellung:

$$\begin{aligned}
 V_{Argonne} = & \sum_{S,T} \left\{ V_{ST}^{(Z)}(\vec{r}) + V_{ST}^{(L2)}(\vec{r}) \vec{L}^2 \right\} \Pi_{ST} \\
 & + \sum_T \left\{ V_{1T}^T(\vec{r}) \mathbf{S}_{12} + V_{1T}^{(LS)}(\vec{r}) \vec{L} \cdot \vec{S} + V_{1T}^{(LS^2)}(\vec{r}) (\vec{L} \cdot \vec{S})^2 \right\} \Pi_{1T}. \quad (20)
 \end{aligned}$$

Die Terme entsprechen der Reihe nach dem Zentralteil, dem quadratischen Bahndrehimpulsteil, dem Tensorteil, dem Spin-Bahn-Teil und dem quadratischen Spin-Bahn-Teil. Die Operatoren  $\Pi_{ST}$  sind Projektionsoperatoren auf die jeweiligen Spin- bzw. Isospin-Räume. Diese haben beispielsweise für  $S = 0$  die Form  $\Pi_{S=0} = \frac{1}{4} [1 - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2]$ . Außerdem ist der Tensoroperator  $\mathbf{S}_{12}$  gegeben durch  $\mathbf{S}_{12} = \frac{3}{r^2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$  und  $\vec{\sigma}_i$  beschreibt den Spin des  $i$ -ten Teilchens.

Zusätzlich zu den gezeigten Termen enthält das AV-18-Potential 4 weitere Terme, die die Ladungsunabhängigkeit und Ladungssymmetrie brechen. Dadurch wird die Vereinbarkeit mit den Streuphasen verbessert, da die Unterschiede zwischen np-, pp- und nn-Streuung beschrieben werden können.

Mit diesem Potential können, zum Beispiel im Rahmen des No-Core-Schalenmodells [7], Kernstrukturrechnungen durchgeführt werden. Problematisch ist allerdings der durch die großen Hilberträume erzeugte, enorm hohe Rechenaufwand für schwere Kerne. Eine alternative Methode für schwere Kerne ist eine Hartree-Fock-Rechnung, wobei per definitionem der Grundzustand durch eine einzelne Slaterdeterminante dargestellt wird. Diese kann die starken kurzreichweitigen Korrelationen, die durch das realistische NN-Potential bewirkt werden, nicht beschreiben, da die den antisymmetrisierten Zuständen zugrundeliegenden Produktzustände nur bei wechselwirkungsfreien Teilchen eine exakte Beschreibung eines Zustands darstellen. Der Grundzustand lässt sich zwar nach Slaterdeterminanten entwickeln, kann aber nicht durch eine einzelne dargestellt werden. Auch eine Superposition aus einer überschaubaren Anzahl von Slaterdeterminanten kann den Zustand nicht reproduzieren. Dieses Problem wird durch die Methode der unitären Korrelatoren (Unitary Correlation Operator Method, UCOM) gelöst [9, 10]. Dabei werden die kurzreichweitigen Korrelationen explizit durch eine zustandsunabhängige, unitäre Transformation  $C$  berücksichtigt:

$$|\tilde{\psi}\rangle = C|\psi\rangle. \quad (21)$$

Dabei ist  $|\tilde{\psi}\rangle$  der korrelierte Zustand, der nicht mehr durch eine Slaterdeterminante darstellbar ist. Offensichtlich ist dann die Berechnung von Matrixele-

menten eines Operators  $O$  mit korrelierten Zuständen äquivalent zur Berechnung von Matrixelementen eines korrelierten Operators  $\tilde{O}$  mit unkorrelierten Zuständen:

$$\langle \tilde{\psi} | O | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | C^\dagger O C | \psi \rangle = \langle \psi | \tilde{O} | \psi \rangle. \quad (22)$$

Ob korrelierte Zustände oder korrelierte Operatoren verwendet werden, kann demnach je nach Anwendung entschieden werden.

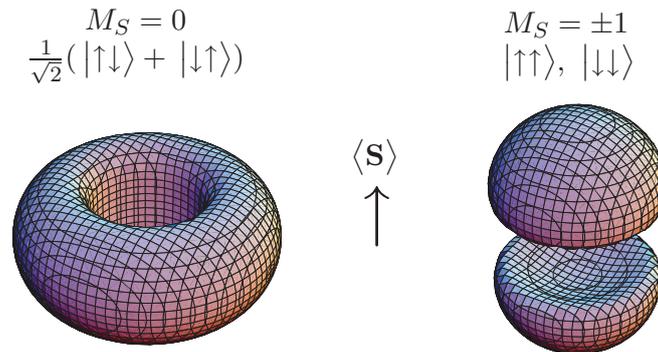


Abbildung 1: Zweiteilchendichteverteilung des Deuterons für antiparallele (links) und parallele (rechts) Spins. Die Oberfläche zeigt eine Dichte von  $0,005 \text{ fm}^{-3}$  (aus [8]).

Die angesprochen kurzreichweitigen Korrelationen sind zweierlei Art:

- **Zentralkorrelationen**

Die starke Abstoßung des Zentralteils der NN-Wechselwirkung sorgt dafür, dass der Abstand zweier Nukleonen nicht zu klein wird. Dadurch entsteht das Loch in der Zweiteilchendichteverteilung bei kleinen Abständen (siehe Abbildung 1). Diese Abstoßung wird den Ausgangszuständen durch den Zentralkorrelator  $c_r = \exp(-ig_r)$  aufgeprägt, mit  $g_r = \frac{1}{2}(s(r)\vec{q}_r + \vec{q}_r s(r))$ . Dabei ist der Generator der Transformation der Radialteil des Relativimpulses

$$\vec{q}_r = \frac{1}{2} \left( \vec{q} \cdot \frac{\vec{r}}{r} + \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{q} \right), \quad (23)$$

wobei  $\vec{q} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$  und  $\vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ .  $s(r)$  ist ein abstandsabhängiges Maß der Stärke der Verschiebung [9].

- **Tensorkorrelationen**

Die starke Korrelation zwischen der Ausrichtung der Spins zweier Nukleonen und ihrer relativen räumlichen Orientierung wird durch die Tensorkraft der NN-Wechselwirkung bewirkt. Antiparallel zueinander ausgerichtete Spins bevorzugen eine Ausrichtung senkrecht zu ihrer Verbindungsachse, was zu dem in Abbildung 1 links gezeigten Torus führt. Antiparallele Spins richten sich entlang ihrer Verbindungsachse aus, was zu der rechten Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Abbildung 1 führt. Um die

Tensorkorrelationen zu generieren, werden senkrechte Verschiebungen zum Radialteil des Relativimpulses benötigt:

$$\vec{q}_\Omega = \vec{q} - \frac{\vec{r}}{r} \vec{q}_r = \frac{1}{2r^2} (\vec{L} \times \vec{r} - \vec{r} \times \vec{L}), \quad (24)$$

mit  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{q}$ . Der Generator ist dann gegeben durch

$$\mathbf{g}_\Omega = \frac{3}{2} \vartheta(r) [(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{q}_\Omega)(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}) + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{q}_\Omega)] \quad (25)$$

und  $c_\Omega = \exp(-ig_\Omega)$  [10].

Die gesamte Transformation ergibt sich somit durch

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_\Omega \mathbf{C}_r, \quad (26)$$

wobei  $\mathbf{C}_\Omega = e^{-i \sum_{i < j} g_{\Omega_{ij}}}$  und  $\mathbf{C}_r = e^{-i \sum_{i < j} g_{r_{ij}}}$   $A$ -Teilchenoperatoren sind. Im Rahmen dieser Arbeit wird für alle Berechnungen der *korrelierte* Hamiltonoperator für den Atomkern verwendet, dieser muss noch aus  $\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V}_{\text{AV18}}$  bestimmt werden. Da der korrelierte Hamiltonoperator ebenfalls ein  $A$ -Teilchenoperator ist, wird formal zunächst eine Clusterentwicklung durchgeführt [9]. Das heißt der korrelierte wird Operator wird als

$$\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C} = \tilde{\mathbf{O}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{O}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{O}}^{[3]} + \dots \quad (27)$$

geschrieben. Dabei ist  $\tilde{\mathbf{O}}^{[i]}$  ein  $i$ -Teilchen-Operator. Diese Summe wird nach den Zweiteilchen Operatoren abgebrochen [11]:

$$\tilde{\mathbf{H}} = \tilde{\mathbf{T}} + \tilde{\mathbf{V}} = \tilde{\mathbf{T}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{T}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{V}}^{[2]}. \quad (28)$$

Anschließend werden die erhaltenen Terme explizit bestimmt. Man findet dabei, dass  $\tilde{\mathbf{T}}^{[1]}$  gleich der unkorrelierten kinetischen Energie  $\mathbf{T}$  ist. Die korrelierte kinetische Energie  $\tilde{\mathbf{T}}^{[2]}$  und Wechselwirkung  $\tilde{\mathbf{V}}^{[2]}$ , die aus dem korrelierten AV-18-Potential sowie elektromagnetischen Wechselwirkungen besteht, bilden zusammen die korrelierte Wechselwirkung  $\mathbf{V}_{\text{UCOM}}$ . Letztere wird die Grundlage aller Berechnungen im Rahmen dieser Arbeit bilden, so dass der Hamiltonian folgende Gestalt annimmt:

$$\tilde{\mathbf{H}} = (\mathbf{T} - \mathbf{T}_{\text{CM}}) + \mathbf{V}_{\text{UCOM}}. \quad (29)$$

Im Folgenden soll die Grundzustandsenergie eines Atomkerns bestimmt werden. Diese wird von der Bewegung des Schwerpunkts nicht beeinflusst, da es sich um eine intrinsische Eigenschaft handelt. Daher wird die kinetische Energie des Schwerpunkts  $\mathbf{T}_{\text{CM}}$  in dem für die Berechnungen verwendeten Hamiltonian  $\tilde{\mathbf{H}}$  abgezogen.



## 4 Schrödingersche Vielteilchen-Störungstheorie

In diesem Abschnitt soll die zeitunabhängige sogenannte Rayleigh-Schrödingersche Vielteilchenstörungstheorie vorgestellt werden. Da später immer Atomkerne betrachtet werden, sind ab jetzt alle auftretenden Zustände antisymmetrisiert und der Index „a“ wird zur Vereinfachung im Folgenden unterdrückt:  $|\psi\rangle \equiv |\psi\rangle_a$ .

Störungstheoretische Ansätze verwendet man immer dann, wenn eine exakte Lösung eines Problems nicht mehr möglich ist. In diesem Fall handelt es sich um die Lösung des Eigenwertproblems eines Hamiltonoperators:

$$\bar{\mathbf{H}}|\bar{E}_n\rangle = \bar{E}_n|\bar{E}_n\rangle.$$

### 4.1 Herleitung der Energie- und Zustandskorrekturen

Voraussetzung für die Anwendung der Rayleigh-Schrödingerschen (RS) Störungstheorie ist die Aufteilung des Hamiltonoperators in einen exakt lösbaren Teil  $\mathbf{H}_0$  und eine Störung  $\mathbf{H}_1$ :

$$\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1. \quad (30)$$

Die grundlegende Idee der RS-Störungstheorie ist die Einführung eines Parameters  $\lambda$ , der es ermöglicht die Störung langsam „einzuschalten“. Das heißt man schreibt den Hamiltonoperator als

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{H}_1. \quad (31)$$

Später wird immer der Fall  $\lambda = 1$  betrachtet, so dass dann  $\mathbf{H} = \bar{\mathbf{H}}$ ,  $E_n = \bar{E}_n$  und  $|E_n\rangle = |\bar{E}_n\rangle$  gilt.

Die Zustände  $|E_n^{(0)}\rangle$  und Energien  $E_n^{(0)}$ , die das Eigenwertproblem

$$\mathbf{H}_0|E_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|E_n^{(0)}\rangle$$

lösen, seien bekannt. Insbesondere bilden die Eigenzustände  $|E_n^{(0)}\rangle$  eine vollständige Basis im Vielteilchenraum  $\mathcal{H}_A^{antisym.}$  und sind orthonormiert.

Die gesuchten Eigenzustände  $|E_n\rangle$  des gesamten Hamiltonoperators  $\mathbf{H}$  sind nur bis auf konstante Faktoren festgelegt, so dass folgende Zwischennormierung gewählt werden kann:

$$\langle E_n^{(0)}|E_n\rangle = 1. \quad (32)$$

Am Ende werden die Zustände  $|E_n\rangle$  zur Wahrscheinlichkeitsinterpretation explizit nachnormiert.

Außerdem soll für  $\lambda \rightarrow 0$  gelten

$$\begin{aligned} E_n &\rightarrow E_n^{(0)}, \\ |E_n\rangle &\rightarrow |E_n^{(0)}\rangle. \end{aligned}$$

Die Idee ist nun, die gesuchten Größen als Potenzreihe im Parameter  $\lambda$  anzusetzen:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots, \quad (33)$$

$$|E_n\rangle = |E_n^{(0)}\rangle + \lambda |E_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |E_n^{(2)}\rangle + \dots. \quad (34)$$

Dabei sind  $E_n^{(i)}$  bzw.  $|E_n^{(i)}\rangle$  die  $i$ -ten Energie- bzw. Zustandskorrekturen. Dies erfüllt offensichtlich die obigen Bedingungen für  $\lambda \rightarrow 0$ . Unklar ist die Konvergenz der Potenzreihe für verschiedene Werte von  $\lambda$ . Es interessiert im Endeffekt der physikalische Punkt, also  $\lambda = 1$ . Allerdings ist es unmöglich unendlich viele Korrekturterme zu berechnen und die Konvergenz der Potenzreihen nach endlich vielen Ordnungen ist nicht garantiert, was später noch wichtig werden wird.

Als nächstes müssen Bestimmungsgleichungen für die Energie- und Zustandskorrekturen abgeleitet werden. Zunächst multipliziert man Gleichung (34) von links mit  $\langle E_n^{(0)}|$ :

$$\underbrace{\langle E_n^{(0)}|E_n\rangle}_1 = \underbrace{\langle E_n^{(0)}|E_n^{(0)}\rangle}_1 + \lambda \langle E_n^{(0)}|E_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \langle E_n^{(0)}|E_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (35)$$

$$\Rightarrow 0 = \lambda \langle E_n^{(0)}|E_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \langle E_n^{(0)}|E_n^{(2)}\rangle + \dots$$

Da diese Gleichung nun für beliebige  $\lambda$  gelten muss, folgt durch Koeffizientenvergleich folgende Hilfsrelation:

$$\langle E_n^{(0)}|E_n^{(j)}\rangle = \delta_{0j}. \quad (36)$$

Um nun zur Lösung der Gleichung

$$\mathbf{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \quad (37)$$

zu kommen, setzt man die Ansätze (33) und (34) ein:

$$(\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{H}_1) \cdot (|E_n^{(0)}\rangle + \lambda |E_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |E_n^{(2)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \cdot (|E_n^{(0)}\rangle + \lambda |E_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |E_n^{(2)}\rangle + \dots).$$

Ausmultiplizieren liefert:

$$\mathbf{H}_0|E_n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p (\mathbf{H}_1|E_n^{(p-1)}\rangle + \mathbf{H}_0|E_n^{(p)}\rangle) = E_n^{(0)}|E_n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \left( \sum_{j=0}^p E_n^{(j)}|E_n^{(p-j)}\rangle \right) \quad (38)$$

Diese Gleichung bildet den Ausgangspunkt zur Ableitung der Energie- und Zustandskorrekturen:

- Herleitung eines allgemeinen Ausdrucks für die Energiekorrekturen:

Multipliziert man Gleichung (38) mit  $\langle E_n^{(0)}|$  von links ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \langle E_n^{(0)}|\mathbf{H}_0|E_n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p (\langle E_n^{(0)}|\mathbf{H}_1|E_n^{(p-1)}\rangle + \langle E_n^{(0)}|\mathbf{H}_0|E_n^{(p)}\rangle) \\ &= E_n^{(0)} + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \left( \sum_{j=0}^p E_n^{(j)} \langle E_n^{(0)}|E_n^{(p-j)}\rangle \right). \end{aligned} \quad (39)$$

Unter Verwendung des bekannten Eigenwertproblems des ungestörten Hamiltonians und der oben abgeleiteten Gleichung (36) folgt somit durch Koeffizientenvergleich

$$\langle E_n^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_n^{(p-1)} \rangle = E_n^{(p)}. \quad (40)$$

Zur Berechnung der Energiekorrekturen höherer Ordnungen werden jeweils die zugehörigen Zustandskorrekturen der vorherigen Ordnungen benötigt.

- Herleitung eines allgemeinen Ausdrucks für die Zustandskorrekturen: Hierfür nutzt man aus, dass auf Grund der Vollständigkeit der ungestörten Basis gilt:

$$|E_n^{(p)}\rangle = \sum_m |E_m^{(0)}\rangle \langle E_m^{(0)} | E_n^{(p)} \rangle. \quad (41)$$

Um die Zustandskorrekturen anzugeben reicht es aus, die Koeffizienten bezüglich der Entwicklung in der ungestörten Basis zu kennen. Multipliziert man Gleichung (38) von links mit  $\langle E_m^{(0)} |$  mit  $m \neq n$  und nutzt gleich die Orthogonalität der ungestörten Basis folgt:

$$\sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p (\langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_n^{(p-1)} \rangle + \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_0 | E_n^{(p)} \rangle) = \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \left( \sum_{j=0}^p E_n^{(j)} \langle E_m^{(0)} | E_n^{(p-j)} \rangle \right)$$

Wiederum muss diese Gleichung für beliebige  $\lambda$  gelten, so dass ein Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_n^{(p-1)} \rangle + \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_0 | E_n^{(p)} \rangle &= \sum_{j=0}^p E_n^{(j)} \langle E_m^{(0)} | E_n^{(p-j)} \rangle \\ &= E_n^{(0)} \langle E_m^{(0)} | E_n^{(p)} \rangle + \sum_{j=1}^p E_n^{(j)} \langle E_m^{(0)} | E_n^{(p-j)} \rangle \end{aligned}$$

ergibt. Dies kann nun nach den gesuchten Koeffizienten  $\langle E_m^{(0)} | E_n^{(p)} \rangle$  umgestellt werden:

$$\langle E_m^{(0)} | E_n^{(p)} \rangle = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \left[ \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_n^{(p-1)} \rangle - \sum_{j=1}^p E_n^{(j)} \langle E_m^{(0)} | E_n^{(p-j)} \rangle \right]. \quad (42)$$

Damit sind die gesuchten Koeffizienten durch die bekannten Energien des ungestörten Systems und die Zustandskorrekturen der niedrigeren Ordnungen ausgedrückt, und es ergibt sich folgender rekursiver Ausdruck für die Zustandskorrekturen:

$$|E_n^{(p)}\rangle = \sum_m |E_m^{(0)}\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \left[ \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_n^{(p-1)} \rangle - \sum_{j=1}^p E_n^{(j)} \langle E_m^{(0)} | E_n^{(p-j)} \rangle \right]. \quad (43)$$

Es sind nun mit den Gleichungen (40) und (43) die nötigen Formeln bekannt, um die Potenzreihen bis in beliebig hohe Ordnungen zu entwickeln.

Im Folgenden wird das Ziel sein, die Grundzustandsenergie eines Atomkerns zu bestimmen, daher wird ab jetzt  $n = 0$  gesetzt. Außerdem bietet es sich an Gleichung (40) für die Energiekorrekturen so umzuschreiben, dass Matrixelemente des Störhamiltonians  $\mathbf{H}_1$  in der ungestörten Basis, also Ausdrücke der Form  $\langle E_{m'}^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_m^{(0)} \rangle$ , vorkommen:

$$E_0^{(p)} = \langle E_0^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_0^{(p-1)} \rangle = \sum_m \langle E_0^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_m^{(0)} \rangle \langle E_m^{(0)} | E_0^{(p-1)} \rangle. \quad (44)$$

Dies ist sinnvoll, da man nun als Ausgangspunkt für die Rechnung die Matrixelemente  $\langle E_0^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_m^{(0)} \rangle$  nutzen kann, die unabhängig von der Störungsrechnung berechnet werden können. Für weitere Informationen zu diesen Matrixelementen mit dem für spätere Berechnungen verwendeten Hamiltonian siehe Abschnitt 4.2. Außerdem werden für die Energiekorrekturen die oben abgeleiteten Entwicklungskoeffizienten (Gleichung (42)) benötigt, die sich noch etwas umformen lassen:

$$\begin{aligned} \langle E_m^{(0)} | E_0^{(p)} \rangle &= \frac{1}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \left[ \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_0^{(p-1)} \rangle - \sum_{j=1}^p E_0^{(j)} \langle E_m^{(0)} | E_0^{(p-j)} \rangle \right] \\ &= \frac{1}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \left[ \sum_{m'} \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_{m'}^{(0)} \rangle \langle E_{m'}^{(0)} | E_0^{(p-1)} \rangle - \sum_{j=1}^p E_0^{(j)} \langle E_m^{(0)} | E_0^{(p-j)} \rangle \right]. \end{aligned}$$

Es bietet sich an folgende Kompaktnotation einzuführen:

$$C_m^{(p)} \doteq \langle E_m^{(0)} | E_0^{(p)} \rangle = \frac{1}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \left[ \sum_{m'} \langle E_m^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_{m'}^{(0)} \rangle C_{m'}^{(p-1)} - \sum_{j=1}^p E_0^{(j)} C_m^{(p-j)} \right]. \quad (45)$$

Dies ist wieder eine Rekursionsformel für die Koeffizienten. Für die Energiekorrekturen ergibt sich damit:

$$E_0^{(p)} = \sum_m \langle E_0^{(0)} | \mathbf{H}_1 | E_m^{(0)} \rangle \cdot C_m^{(p-1)}. \quad (46)$$

Das Mathematica Programm (siehe AnhangA) wird unter anderem auf die beiden Formeln (45) und (46) zurückgreifen. Für weitere Informationen zur Rayleigh-Schrödingerschen Vielteilchen-Störungstheorie siehe [3, 1].

## 4.2 Anmerkungen zum Hamiltonian - Partitionierung

Wie bereits oben beschrieben ist die Grundvoraussetzung für die Anwendung der Störungsrechnung, die Aufteilung des Hamiltonians in einen exakt lösbaren Teil und eine Störung. Diese Aufteilung nennt man Partitionierung. Die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen wird hier durch  $V_{\text{UCOM}}$ , dem korrelierten Argonne-V18-Potential, beschrieben (siehe Abschnitt 3). Zu dem nuklearen Hamiltonian  $\tilde{\mathbf{H}}$  addiert man einen harmonischen Oszillatorhamiltonian und zieht ihn einmal wieder ab. Ausgangspunkt für die Rechnung ist dann folgender Hamiltonian:

$$\mathbf{H}' = \mathbf{H}_{HO} + \lambda \underbrace{(\tilde{\mathbf{H}} - \mathbf{H}_{HO})}_{\mathbf{H}_1}. \quad (47)$$

Nun wird für die Störungsrechnung  $H_{HO}$  als exakt lösbarer Teil des Hamiltonians verwendet, so dass die Zustände  $|E_n^{(0)}\rangle$  die bekannten Eigenzustände des harmonischen Oszillators sind. Desweiteren fällt folgende nützliche Relation auf:

$$\langle E_n^{(0)} | \tilde{H} - H_{HO} | E_m^{(j)} \rangle = \langle E_n^{(0)} | \tilde{H} | E_m^{(j)} \rangle - \langle E_n^{(0)} | H_{HO} | E_m^{(j)} \rangle = \langle E_n^{(0)} | \tilde{H} | E_m^{(j)} \rangle - E_{HO,m}^{(0)} \delta_{nm} \delta_{0j}. \quad (48)$$

Das heißt, die Subtraktion des harmonischen Oszillatorpotentials spielt nur bei diagonalen Matrixelementen von  $H_1$  eine Rolle. Bei außerdiagonalen Matrixelementen erhält man automatisch nur Beiträge des nuklearen Hamiltonians. Für die Programmierung mit Mathematica dienen Matrixelemente von  $\tilde{H}$  als Ausgangspunkt (siehe Anhang A). Dies muss bei der Berechnung der Koeffizienten in Gleichung (42) und der ersten Energiekorrektur (Gleichung (40)) beachtet werden, da bei allen auftretenden diagonalen Matrixelementen von  $H_1$  die Subtraktion der Oszillatorenergien explizit durchgeführt werden muss. Da nur bei der ersten Energiekorrektur ein diagonales Matrixelement von  $H_1$  auftritt, stellt man fest, dass die angesetzte Potenzreihe für die Grundzustandsenergie bei  $\lambda = 1$  nur die Energie des Atomkerns liefert. Die Energie des künstlich addierten und subtrahierten Potentials fällt wieder heraus:

$$\begin{aligned} E_0 &= E_{HO,0}^{(0)} + E_0^{(1)} && + E_0^{(2)} && + \dots \\ &= E_{HO,0}^{(0)} + \langle E_0^{(0)} | H_1 | E_0^{(0)} \rangle && + \langle E_0^{(0)} | H_1 | E_0^{(1)} \rangle && + \dots \\ &= E_{HO,0}^{(0)} + \langle E_0^{(0)} | \tilde{H} | E_0^{(0)} \rangle - E_{HO,0}^{(0)} && + \langle E_0^{(0)} | H_1 | E_0^{(1)} \rangle && + \dots \\ &= && \langle E_0^{(0)} | \tilde{H} | E_0^{(0)} \rangle && + \langle E_0^{(0)} | \tilde{H} | E_0^{(1)} \rangle && + \dots \end{aligned} \quad (49)$$

Damit erhält man durch einfaches Aufsummieren der einzelnen Energiekorrekturen bereits die Grundzustandsenergie des betrachteten Kerns, vorausgesetzt die Potenzreihe konvergiert (siehe beispielsweise Abbildung 2).

Außerdem ist zu beachten, dass die Summe über  $m$  in Gleichung (46) und über  $m'$  in Gleichung (45) nicht bis unendlich ausgeführt werden kann. Bei den Eigenzuständen des exakt lösbaren Hamiltonians  $H_0$  handelt es sich um Eigenzustände des harmonischen Oszillators. In den folgenden Rechnungen wird immer eine maximale HO-Hauptquantenzahl  $e$  angegeben, bis zu der alle möglichen Einteilchen-Zustände berücksichtigt werden. Dabei handelt es sich um die Quantenzahl, die auch die Eigenenergien  $E_{HO} = \hbar\omega (e + \frac{3}{2})$  charakterisiert. Für festes  $e$  gibt es noch mehrere mögliche Einteilchen-Zustände, die sich durch die Radialquantenzahl, den Gesamtdrehimpuls und Isospin unterscheiden. Desweiteren werden die verwendeten Hilberträume dadurch eingeschränkt werden, dass eine maximal zulässige Anregungsenergie der aus den Einteilchen-Zuständen gebildeten Slaterdeterminanten vorgegeben wird. Schließlich kann noch angegeben werden wie viele Einteilchen-Zustände in den verwendeten Slaterdeterminanten sich höchstens von den Einteilchen-Zuständen in der ungestörten Slaterdeterminante  $|E_0^{(0)}\rangle$  unterscheiden dürfen. Sind dies  $n$  Einteilchen-Zustände spricht man davon, dass alle Zustände bis einschließlich  $n$ -Teilchen- $n$ -Loch-Anregungen berücksichtigt werden.

### 4.3 Anwendung der Störungsrechnung für ${}^4\text{He}$

Als erstes Beispiel soll die beschriebene Störungsrechnung für  ${}^4\text{He}$  diskutiert werden. Die einzelnen Energiekorrekturen wurden mit dem beschriebenen Schema bis zur 30. Ordnung berechnet. Sie sind in Tabelle 1 gezeigt. Der hierfür verwendete Mathematica-Code befindet sich in Anhang A. Natürlich musste die unendliche Summe über  $m'$  in Gleichung (42) bei einem endlichen Wert abgebrochen werden, so dass es sich um genäherte Werte handelt. Im vorliegenden Beispiel wurden Zustände mit  $e \leq 4$  berücksichtigt, die man durch 4-Teilchen-4-Loch-Anregungen oder kleineren Anregungen aus dem Grundzustand erhält. Summiert man alle Beiträge bis zur 30. Energiekorrektur auf,

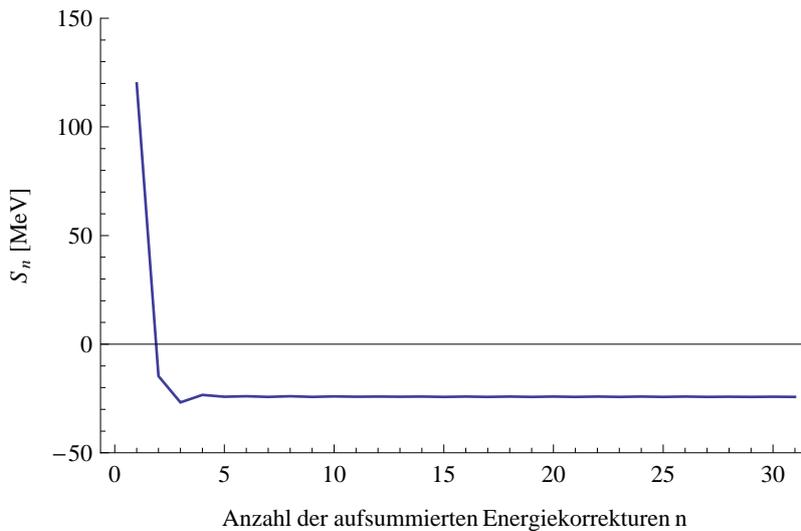


Abbildung 2: Aufgetragen sind hier die Partialsummen  $S_n$  der Potenzreihe für  $E(\lambda)$  über der Anzahl der berücksichtigten Summanden. Man erkennt, dass die Potenzreihe für  ${}^4\text{He}$  konvergiert.

Korr. #	0	1	2	3	4	5	6
	120	-134.685	-12.072	3.406	-0.8546	0.215	-0.2904
Korr. #	7	8	9	10	11	12	13
	0.349	-0.349	0.252	-0.188	0.1361	-0.135	0.1271
Korr. #	14	15	16	17	18	19	20
	-0.137	0.129	-0.136	0.1303	-0.1382	0.132	-0.1374
Korr. #	21	22	23	24	25	26	27
	0.129	-0.130	0.120	-0.1202	0.109	-0.106	0.0947
Korr. #	28	29	30				
	-0.091	0.078	-0.073				

Tabelle 1: Energiekorrekturen für  ${}^4\text{He}$  in MeV.

was dem Auswerten der Potenzreihe an der physikalischen Stelle  $\lambda = 1$  entspricht, erhält man  $E_0 \approx -24.23$  MeV. Dieses Aufsummieren ist in Abbildung 2 schematisch gezeigt. Die Abszisse stellt die Anzahl der Summanden dar, die zur zugehörigen Partialsumme beitragen. Man erkennt, dass die Reihe für  ${}^4\text{He}$

zu konvergieren scheint, was auch durch die immer kleiner werdenden Korrekturen plausibel erscheint. Dies wurde, mit gleichem Ergebnis, auch für andere Hilberträume untersucht, wobei im größten alle Zustände bis  $e \leq 10$  berücksichtigt wurden, die durch 2-Teilchen-2-Loch-Anregungen mit maximaler Anregungsenergie aus dem Grundzustand hervorgehen. Allerdings kann man sich trotzdem nicht sicher sein, ob nicht höhere Korrekturterme doch wieder anwachsen und so die Konvergenz zerstört wird. Es gibt im Gegensatz zur Berechnung der Entwicklungskoeffizienten einer Taylorreihe zu einer analytischen Funktion hier *keine* Möglichkeit ein Restglied abzuschätzen. Es gibt keinen Satz der die Konvergenz nach endlich vielen Ordnungen garantieren kann.

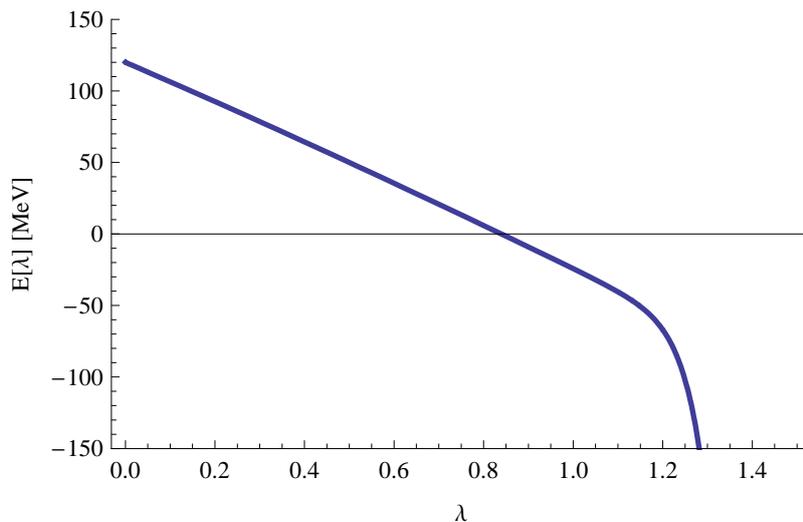


Abbildung 3: Störungsreihe für  ${}^4\text{He}$  bis einschließlich 30. Ordnung.

In Abbildung 3 ist die Potenzreihe für die Energie unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen in Abhängigkeit von  $\lambda$  gezeigt. Man erkennt, dass es sich bis  $\lambda = 1$  um einen linearen Verlauf handelt der dann in einen stärker abfallenden übergeht.

#### 4.4 Anwendung der Störungsrechnung für ${}^{16}\text{O}$

Als weiteres Beispiel soll nun  ${}^{16}\text{O}$  betrachtet werden. Für diese Rechnung wurden Zustände mit  $e \leq 10$  verwendet, die durch maximal 4-Teilchen-4-Loch-Anregung aus dem Grundzustand mit maximaler Anregungsenergie von  $4\hbar\omega$  entstehen. In Tabelle 2 sind die einzelnen Energiekorrekturen aufgeführt.

In Abbildung 4 sind nun wieder die Partialsummen der Störungsreihe für die Grundzustandsenergie aufgetragen. Hier erkennt man nun das Problem. Von Konvergenz der Störungsreihe nach 30 Ordnungen kann keine Rede sein. Das heißt aber auch, dass durch Auswertung der Störungsreihe mit einer bestimmten Anzahl berücksichtigter Terme bei  $\lambda = 1$  eine Bestimmung der Grundzustandsenergie unmöglich ist.

Die nach der 30. Korrektur abgebrochene Störungsreihe ist in Abbildung 5 noch einmal gezeigt. Man sieht, dass sie erst abfällt, wie im Fall von  ${}^4\text{He}$ ,

Korr. #	0	1	2	3	4	5	6
	720	-772.39	-46.68	21.03	7.96	-19.45	5.15
Korr. #	7	8	9	10	11	12	13
	18.198	-20.75	-7.11	34.56	-18.71	-35.24	57.79
Korr. #	14	15	16	17	18	19	20
	6.71	-98.93	75.01	98.65	-213.26	21.86	345.30
Korr. #	21	22	23	24	25	26	27
	-345.04	-293.28	868.55	-263.23	-1305.96	1651.66	845.93
Korr. #	28	29	30				
	-3743.76	1872.37	5096.43				

Tabelle 2: Energiekorrekturen für  $^{16}\text{O}$  in MeV.

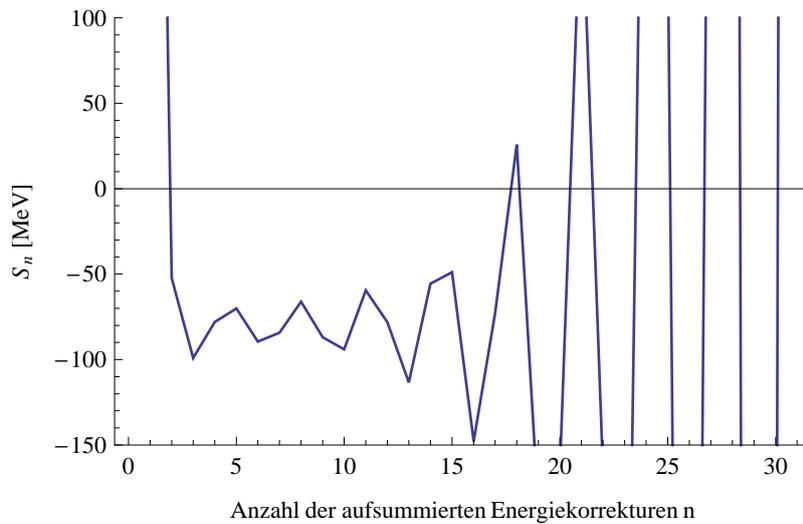


Abbildung 4: Partialsummen  $S_n$  der Störungsreihe der Energie für  $^{16}\text{O}$  aufgetragen gegen die Anzahl berücksichtigter Summanden  $n$ .

doch dann wachsen die Werte sehr stark an. Eine Auswertung der Potenzreihe bei  $\lambda = 1$  hilft überhaupt nicht weiter, wenn man die Grundzustandsenergie bestimmen will. Man würde einen großen positiven Wert erhalten (siehe Abbildung 5). Die Grundzustandsenergie muss aber negativ sein.

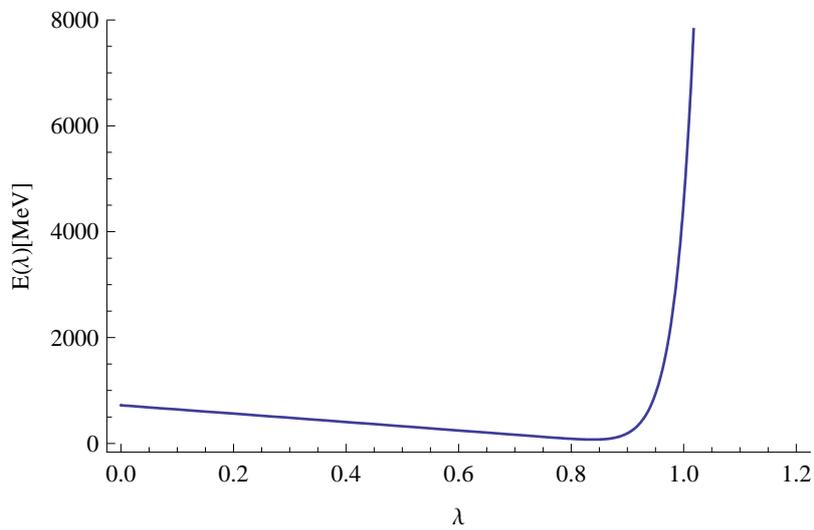


Abbildung 5: Störungsreihe von  $^{16}\text{O}$  bis einschließlich 30. Ordnung.



## 5 Padé-Approximation

In diesem Abschnitt wird das Verfahren der Padé-Approximation vorgestellt. Es handelt sich dabei um eine alternative Methode die Information über die Grundzustandsenergie aus den Energiekorrekturen der Störungsrechnung zu extrahieren. Das Problem bei der Darstellung der Funktion  $E(\lambda)$  als Potenzreihe wurde schon mehrfach angesprochen: Da man die komplette Potenzreihe nicht kennt, sondern nur endliche viele Terme davon, ist nicht bekannt ab welcher Anzahl von Summanden die Potenzreihe abgebrochen werden und bei  $\lambda = 1$  sinnvoll ausgewertet werden kann. Die erhaltene Energie kann sehr stark von der tatsächlichen Grundzustandsenergie abweichen, wie in Abschnitt 4.4 gezeigt.

Außerdem ist bei der Darstellung einer analytischen Funktion der Konvergenzradius einer Taylorreihe oft durch Polstellen beschränkt. Mit dem Verfahren der Padé-Approximation wird es möglich werden, solche Polstellen darzustellen, da man den Zähler und Nenner der Funktion als Potenzreihen ansetzt. Daher liefern Padé-Approximanten oft auch jenseits dieses Konvergenzradius noch eine gute Näherung an die Funktion [5]. Dies wird in Abschnitt 5.3 deutlich. Auch innerhalb des Konvergenzradius sind Padé-Approximanten oft eine bessere Näherung als die abgebrochene Taylorreihe.

Auch ohne explizit bekannte analytische Funktion beschreiben Padé-Approximanten die Funktion, die durch die Potenzreihe dargestellt wird, oft um einiges besser als die abgebrochene Potenzreihe, obwohl mit den Koeffizienten der Potenzreihe die gleiche Information eingeht (siehe Abschnitt 5.5).

### 5.1 Idee und Definition der Padé-Approximation

Die Idee der Padé-Approximation besteht darin, eine gebrochenrationale Funktion zu finden, die eine andere Funktion bis auf Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(x^{L+M+1})$  wiedergibt. Man kann einen Padé-Approximanten wie folgt definieren (siehe [4, 5]):

Gibt es ein Polynom  $P(x)$  mit Grad  $M$  und ein Polynom  $Q(x)$  mit Grad  $L$ , so dass mit einer gegebenen Funktion  $f(x)$

$$\frac{P(x)}{Q(x)} - f(x) = \mathcal{O}(x^{M+L+1}) \quad (50)$$

gilt, dann ist der Padé-Approximant  $[M/L]$  durch

$$[M/L] = \frac{P(x)}{Q(x)} = \frac{a_0 + a_1x + \dots + a_Mx^M}{b_0 + b_1x + \dots + b_Lx^L} \quad (51)$$

definiert. Die Definition (50) bedeutet, dass die ersten  $M + L$  Terme der Taylorreihe des Padé-Approximanten mit den ersten  $M + L$  Termen der Taylorreihe der Funktion identisch sind.

Um den Padé-Approximanten zu bestimmen, müssen also die Koeffizienten im Zähler  $\{a_m\}$  und Nenner  $\{b_l\}$  bestimmt werden.

Ausgangspunkt dafür ist die folgende Gleichung

$$Q(x) \cdot f(x) = P(x) + \mathcal{O}(x^{M+L+1}). \quad (52)$$

Dabei soll außerdem gelten:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i \\ P(x) &= \sum_{m=0}^M a_m x^m \\ Q(x) &= \sum_{l=0}^L b_l x^l. \end{aligned} \quad (53)$$

Setzt man dies in die Ausgangsgleichung ein erhält man

$$\begin{aligned} &\sum_{l=0}^L \sum_{i=0}^{\infty} b_l c_i x^{l+i} = \sum_{m=0}^M a_m x^m \\ \Leftrightarrow &\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{l=i}^{L+i} b_{l-i} c_i x^l = \sum_{m=0}^M a_m x^m \\ \Leftrightarrow &\sum_{i=0}^{\infty} \{b_0 c_i x^i + b_1 c_i x^{i+1} + \dots + b_L c_i x^{i+L}\} = \sum_{m=0}^M a_m x^m. \end{aligned} \quad (54)$$

Mittels Koeffizientenvergleich erhält man die folgenden Gleichungssysteme:

$$\begin{aligned} a_0 &= b_0 c_0 \\ a_1 &= b_1 c_0 + b_0 c_1 \\ a_2 &= b_2 c_0 + b_1 c_1 + b_0 c_2 \\ &\vdots \\ a_M &= \sum_{i=0}^{\min(M,L)} b_i c_{M-i}, \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} 0 &= b_0 c_{M+1} + b_1 c_M + \dots + b_L c_{M-L+1} \\ 0 &= b_0 c_{M+2} + b_1 c_{M+1} + \dots + b_L c_{M-L+2} \\ &\vdots \\ 0 &= b_0 c_{M+L} + b_1 c_{M+L-1} + \dots + b_L c_M. \end{aligned} \quad (56)$$

Es handelt sich um  $M + L + 1$  Gleichungen mit  $M + L + 2$  Unbekannten, also ist das Gleichungssystem überbestimmt und nicht eindeutig lösbar. Bei einer gebrochenrationalen Funktion gibt es immer einen gemeinsamen Faktor mit dem man Zähler und Nenner multiplizieren kann, ohne dass sich das Resultat ändert. Diese Freiheit wird genutzt, um eine Unbekannte zu eliminieren, indem man  $b_0$  auf den Wert 1 setzt.

Damit kann das Gleichungssystem (56) eindeutig, zum Beispiel mit der Cramerschen Regel, gelöst werden. Kennt man dann alle Koeffizienten  $\{b_l\}$ , setzt

man diese im Gleichungssystem (55) ein und erhält damit auch alle Koeffizienten  $\{a_m\}$ . Damit ist der Padé-Approximant eindeutig bestimmt.

Es gibt allerdings auch eine elegantere Möglichkeit Padé-Approximanten zu bestimmen [5]. Dazu definiert man

$$Q^{[M/L]}(x) = \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} & c_{M+L} \\ x^L & x^{L-1} & \dots & x & 1 \end{vmatrix}, \quad (57)$$

$$P^{[M/L]}(x) = \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{M-L} c_i x^{L+i} & \sum_{i=0}^{M-L+1} c_i x^{L+i-1} & \dots & \sum_{i=0}^{M-1} c_i x^{1+i} & \sum_{i=0}^M c_i x^i \end{vmatrix}. \quad (58)$$

Dabei sei  $c_i = 0$  für  $i < 0$ . Nun betrachtet man folgende Größe:

$$Q^{[M/L]}(x) \cdot f(x) - P^{[M/L]}(x) = Q^{[M/L]}(x) \cdot \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i - P^{[M/L]}(x). \quad (59)$$

Den ersten Teil kann man als

$$Q^{[M/L]}(x) \cdot \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i = \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^{L+i} & \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^{L+i-1} & \dots & \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^{1+i} & \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i \end{vmatrix} \quad (60)$$

schreiben. Da Determinanten ihren Wert nicht ändern, wenn man das Vielfache einer Zeile zu einer anderen addiert kann man  $P^{[M/L]}(x)$  umschreiben, indem man zur letzten Zeile jeweils das  $x^{M+1}$ -fache der ersten Zeile, das  $x^{M+2}$ -fache der zweiten Zeile, ... und das  $x^{M+L}$ -fache der vorletzten Zeile addiert. Dann ergibt sich für den ersten Eintrag der letzten Zeile:

$$\sum_{i=0}^{M-L} c_i x^{L+i} + x^{M+1} c_{M-L+1} + x^{M+2} c_{M-L+2} + \dots + x^{M+L} c_M = \sum_{i=0}^M c_i x^{L+i}. \quad (61)$$

Außerdem kann nun jeder Eintrag der letzten Zeile durch Summation bis Unendlich und Subtraktion der überschüssigen Terme in zwei Summen umschreiben, so dass beispielsweise der erste Eintrag der letzten Zeile

$$\sum_{i=0}^M c_i x^{L+i} = \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^{L+i} - \sum_{i=M+1}^{\infty} c_i x^{L+i} \quad (62)$$

lautet. Nun kann  $P^{[M/L]}(x)$  als Differenz zweier Determinanten geschrieben werden:

$$P^{[M/L]}(x) = \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} & c_{M+L} \\ \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^{L+i} & \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^{L+i-1} & \dots & \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^{1+i} & \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i \end{vmatrix} \\
 - \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} & c_{M+L} \\ \sum_{i=M+1}^{\infty} c_i x^{L+i} & \sum_{i=0}^{\infty} c_{M+2} x^{L+i-1} & \dots & \sum_{i=L+M}^{\infty} c_i x^{1+i} & \sum_{i=L+M+1}^{\infty} c_i x^i \end{vmatrix} \quad (63)$$

Da die erste Determinante gerade  $Q^{[M/L]}(x) \cdot \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i$  entspricht, folgt mit Gleichung (59)

$$Q^{[M/L]}(x) \cdot f(x) - P^{[M/L]}(x) \\
 = \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} & c_{M+L} \\ \sum_{i=M+1}^{\infty} c_i x^{L+i} & \sum_{i=M+2}^{\infty} c_i x^{L+i-1} & \dots & \sum_{i=L+M}^{\infty} c_i x^{1+i} & \sum_{i=L+M+1}^{\infty} c_i x^i \end{vmatrix} \quad (64) \\
 = \sum_{i=1}^{\infty} x^{M+L+i} \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} & c_{M+L} \\ c_{M+i} & c_{M+1+i} & \dots & c_{M+L-1+i} & c_{M+L+i} \end{vmatrix} = \mathcal{O}(x^{M+L+1})$$

Teilt man Gleichung (59) durch  $Q^{[M/L]}(x)$  erhält man

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i - \frac{P^{[M/L]}(x)}{Q^{[M/L]}(x)} = \mathcal{O}(x^{M+L+1}) \quad (65)$$

Das heißt, es muss sich bei  $\frac{P^{[M/L]}(x)}{Q^{[M/L]}(x)}$  um den Padé-Approximanten

$$[M/L] = \frac{\begin{array}{ccccc} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} & c_{M+L} \\ \sum_{i=0}^{M-L} c_i x^{L+i} & \sum_{i=0}^{M-L+1} c_i x^{L+i-1} & \dots & \sum_{i=0}^{M-1} c_i x^{1+i} & \sum_{i=0}^M c_i x^i \end{array}}{\begin{array}{ccccc} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M & c_{M+1} \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} & c_{M+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} & c_{M+L} \\ x^L & x^{L-1} & \dots & x & 1 \end{array}} \quad (66)$$

handeln.

Die Berechnung der Padé-Approximanten kann demnach auf die Berechnung von Determinanten zurückgeführt werden, für die als „Input“ lediglich die Koeffizienten der Potenzreihe der darzustellenden Funktion benötigt werden. Soll der der Approximant  $[M/L]$  berechnet werden, müssen die ersten  $M + L$  Koeffizienten der Potenzreihe bekannt sein. Für die Berechnung der Padé-Approximanten wurde im Rahmen dieser Arbeit Gleichung (66) dem Lösen der Gleichungssysteme vorgezogen (siehe Anhang A).

## 5.2 Konvergenzeigenschaften der Padé-Approximanten

Es wurde bereits angedeutet, dass die Padé-Approximation über den Konvergenzradius der Taylorreihe einer Funktion hinaus eine sinnvolle Beschreibung der Funktion liefern kann. Es wäre ideal auch für Padé-Approximanten mathematische Sätze zu finden, die die Konvergenz gegen die zu nähernde Funktion garantieren und es erlauben würden Restglieder anzugeben. Sätze wie „die Folge der Padé-Approximanten  $[M/L]$  konvergiert, genau dann wenn...“ mit einfach zu überprüfenden analytischen Bedingungen existieren aber nicht. Dennoch gibt es eine vielfältige Konvergenztheorie zur Padé-Approximation. Einige unter Umständen nützliche Sätze sollen nun vorgestellt werden.

### 5.2.1 Stieltjes-Reihen und Padé-Approximation

Die Padé-Approximation ist ein sehr nützliches Werkzeug, wenn eine Funktion angenähert werden soll, deren Potenzreihendarstellung eine Stieltjes-Reihe ist. Um eine Stieltjes-Reihe handelt es sich genau dann, wenn es eine beschränkte nicht abfallende Funktion  $\varphi(u)$  gibt, die in  $[0, \infty)$  unendlich viele verschiedene Werte annimmt und außerdem

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j (-x)^j \quad (67)$$

gilt, wobei

$$f_j = \int_0^{\infty} u^j d\varphi(u) . \quad (68)$$

Es handelt sich also um eine sehr spezielle Forderung. Es gibt aber relativ einfache Möglichkeiten zu überprüfen, ob es sich um eine Stieltjes-Reihe handelt, für die man lediglich die Koeffizienten der „gewöhnlichen“ Potenzreihenentwicklung benötigt [5]. Handelt es sich um eine Stieltjes-Reihe, muss

$$(-1)^{m(n+1)} C(m+n, n+1) \geq 0 \quad \forall m, n \geq 0 \quad (69)$$

gelten, wobei

$$C(M, L) = \begin{vmatrix} c_{M-L+1} & c_{M-L+2} & \dots & c_M \\ c_{M-L+2} & c_{M-L+3} & \dots & c_{M+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_M & c_{M+1} & \dots & c_{M+L-1} \end{vmatrix} \quad (70)$$

Das Problem dabei ist offensichtlich, dass man dies für alle Werte von  $m$  und  $n$  überprüfen müsste. Alternativ kann man natürlich direkt durch Überprüfung der in der Definition gestellten Bedingungen zeigen, dass es sich um eine Stieltjes-Reihe handelt.

Angenommen man hätte dies gezeigt, gelten unter anderem folgende Sätze:

- Padé-Approximanten einer Stieltjes-Reihe (siehe Gleichung (67)) erfüllen für  $x > 0$  die Ungleichungen [4]

$$(-1)^{1+i} \{[M+1+i/M+1] - [M+i/M]\} \geq 0, \quad (71)$$

$$(-1)^{1+i} \{[M+i/M] - [M+i+1/M-1]\} \geq 0, \quad (72)$$

$$[M/M] \geq f(x) \geq [M-1/M], \quad (73)$$

$$[M/M]' \geq f'(x) \geq [M-1/M]', \quad (74)$$

wobei  $i \geq -1$ . Man erkennt, dass in diesem Fall bestimmte Padé-Approximanten obere und untere Schranken für den Funktionswert bilden. Außerdem werden die oberen Schranken immer besser, je größer  $M$  wird. Dies erkennt man, wenn in Gleichung (71)  $i = 0$  gesetzt wird.

- Die Pole des  $[M+i/M]$  Padé Approximanten (mit  $i \geq -1$ ) zu  $f(x)$  sind einfache Pole die auf der negativen reellen Achse liegen und deren Residuen positiv sind [5].

Weitere Sätze finden sich in [4, 5].

### 5.2.2 Padé-Annahme

Nun soll die sogenannte Padé-Annahme vorgestellt werden [4], für deren Richtigkeit es bisher weder einen Beweis noch ein Gegenbeispiel gibt:

Ist  $P(x)$  die Potenzreihe einer bei  $x = +1$  stetigen Funktion, die für  $|x| \leq 1$  ausgenommen von  $m$  Polen regulär ist, dann konvergiert mindestens eine Teilfolge von  $[M/M]$  Padé-Approximanten für  $|x| \leq 1$  auf dem Gebiet das entsteht, wenn man kleine Kreise um die Pole entfernt, gleichmäßig gegen die Funktion.

Diese Annahme ist sehr nützlich, wenn ohnehin eine Funktion beschrieben werden soll, die keine wesentlichen Singularitäten im Bereich  $|x| \leq 1$  hat. Das Problem ist natürlich die Teilfolge zu finden. Allerdings kann damit zumindest motiviert werden, warum Padé-Approximanten zum richtigen Ergebnis bzw. zu einer guten Annäherung der Funktion führen.

### 5.3 Anwendungsbeispiel für eine analytische Funktion

Als Beispiel soll für eine gegebene analytische Funktion der Padé-Approximant berechnet werden, und mit der Taylor-Entwicklung der Funktion verglichen werden.

Die zu untersuchende Funktion lautet:

$$f(x) = \sqrt{\frac{1 + \frac{1}{2}x}{1 + 2x}} = 1 - \frac{3}{4}x + \frac{39}{32}x^2 + \dots \quad (75)$$

Der Konvergenzradius der Taylorreihe ist offensichtlich  $\frac{1}{2}$ . Das heißt für  $x > \frac{1}{2}$  kann man keine Übereinstimmung der abgebrochenen Taylorreihe mit der Funktion mehr erwarten.

Für den Padé-Approximanten  $[1/1]$  erhält man mit Gleichung (66):

$$[1/1] = \frac{\begin{vmatrix} -\frac{3}{4} & \frac{39}{32} \\ x & 1 - \frac{3}{4}x \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} -\frac{3}{4} & \frac{39}{32} \\ x & 1 \end{vmatrix}} = \frac{1 + \frac{7}{8}x}{1 + \frac{13}{8}x}. \quad (76)$$

In Abbildung 6 kann man den Vergleich zwischen der exakten Funktion  $f(x)$  und der nach der quadratischen Ordnung abgebrochenen Taylorreihe und dem Padé-Approximanten  $[1/1]$  sehen. Zu beachten ist, dass zur Berechnung der Taylorreihe und des Padé-Approximanten die gleiche Information über die Funktion eingegangen ist, nämlich die ersten beiden Entwicklungskoeffizienten. In Abbildung 6 wird sehr deutlich, um wie viel besser der Padé-Approximant die Funktion beschreibt, als die abgebrochene Taylorreihe. Selbst im Grenzwert  $x \rightarrow \infty$  ergibt sich mit dem genäherten Wert  $[1/1](\infty) = 0,54$  im Vergleich zum exakten Wert  $f(\infty) = 0,5$  nur eine Abweichung von 8%. Geht man davon aus, dass die Padé-Annahme aus Abschnitt 5.2.2 stimmt, kann man diese gute Übereinstimmung motivieren. Da die Funktion  $f(x)$  bei  $|x| \leq 1$  nur eine Polstelle hat und bei  $x = +1$  stetig ist, gibt es eine Teilfolge die gegen die Funktion konvergiert. Die gute Übereinstimmung von  $[1/1]$  mit der Funktion kann man nun begründen, indem man davon ausgeht, dass  $[1/1]$  zur Teilfolge gehört.

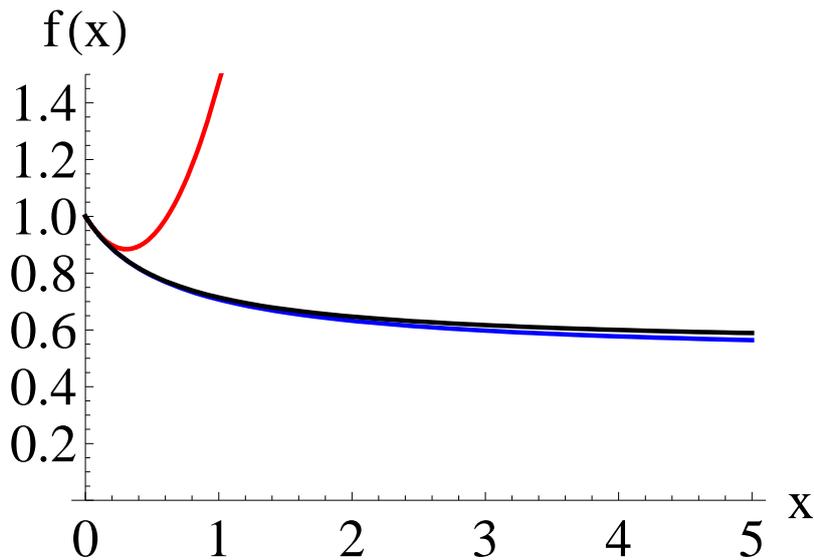


Abbildung 6: Vergleichsplot der Funktion  $f(x)$  (blau), der abgebrochenen Taylorreihe (rot) und dem Padé-Approximanten  $[1/1]$  (schwarz).

## 5.4 Anwendungsbeispiel für ${}^4\text{He}$

Wie bereits in Abschnitt 4.3 soll nun die Grundzustandsenergie von  ${}^4\text{He}$  bestimmt werden, diesmal allerdings mit Hilfe der Padé-Approximation. Dazu wird die Funktion  $E(\lambda)$  durch einen Padé-Approximanten angenähert, der dann bei  $\lambda = 1$  ausgewertet wird. Als Koeffizienten der Potenzreihenentwicklung dienen die Energiekorrekturen der Störungsrechnung. Zur Berechnung des Padé-Approximanten wird Gleichung (66) benutzt. Den Programmcode findet man in Anhang A.

Alle folgenden Approximanten in diesem Abschnitt sind mit den in Tabelle 1 angegebenen Korrekturen berechnet. In den Abbildungen 7, 8 und 9 sind jeweils Zähler, Nenner und der Padé-Approximant  $[2/2]$ ,  $[6/6]$  und  $[13/13]$  für  ${}^4\text{He}$  gezeigt. Man erkennt, dass sich Zähler und Nenner der Approximanten immer stark verändern, wenn man zu einem anderen übergeht. Der Quotient aus beiden, also der Padé-Approximant als Ganzes, bleibt jedoch nahezu gleich.

Insbesondere stellt man fest, dass bei keinem der gezeigten Padé-Approximanten im dargestellten Bereich eine Polstelle auftaucht. Dies ist prinzipiell aber möglich, da das Nennerpolynom natürlich Nullstellen haben kann. *Physikalisch* erwartet man allerdings keine Polstelle, da dies unendlicher Energie für einen Wert von  $\lambda$  entsprechen würde. Dies ist nicht möglich, da die Grundzustandsenergie egal welches  $\lambda$  im Hamiltonian vorkommt immer endlich bleiben muss. Das heißt, dass Padé-Approximanten die die Funktion  $E(\lambda)$  gut beschreiben, also solche für große  $M$ , in der konvergenten Teilfolge der  $[M/M]$ -Approximanten, keine Nennernullstellen haben sollten. Die Approximanten  $[2/2]$ ,  $[6/6]$  und  $[13/13]$  haben zwar außerhalb des gezeigten Bereichs noch Nennernullstellen, aber auf Grund der Tatsache, dass die Approximanten selbst stabil erscheinen ist zu erwarten, dass die Bestimmung der Grundzustandsenergie gut möglich ist.

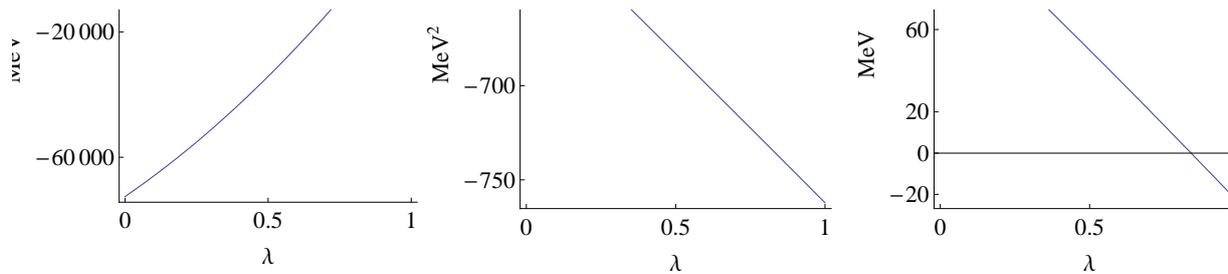


Abbildung 7: Zähler, Nenner und der Padé-Approximant [2/2].

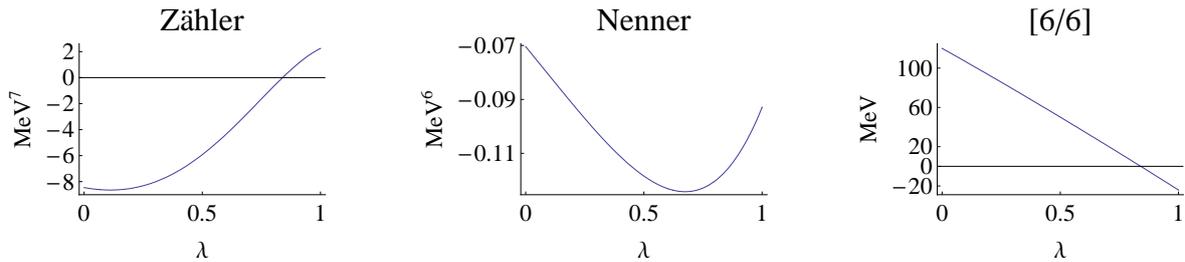


Abbildung 8: Zähler, Nenner und der Padé-Approximant [6/6].

Es bleibt zu klären, wie gut die gezeigten Approximanten die tatsächliche Funktion  $E(\lambda)$  approximieren. Überprüft man mit den Energiekorrekturen für  ${}^4\text{He}$  die in Gleichung (69) angegebene Bedingung für eine Stieltjes-Reihe, stellt man fest, dass sie nicht erfüllt ist. Die Ungleichungen (71)-(74) sind somit wertlos und man erhält keine Schrankeneigenschaft. Für den physikalischen Punkt bei  $\lambda = 1$  stellt man wie in Tabelle 3 gezeigt ohnehin fest, dass die Ungleichungen nicht erfüllt sind.

$L$	2	3	4	5	6	7
PA [L/L]	-24.034	-24.034	-24.1089	-24.2263	-24.1623	-24.1462
$L$	8	9	10	11	12	13
PA [L/L]	-24.2146	-24.2316	-24.245	-24.2464	-24.2457	-24.24671

Tabelle 3: „Diagonale“ Padé-Approximanten an der physikalischen Stelle  $\lambda = 1$  angegeben in MeV.

Allerdings lohnt es sich, sich an die erwähnte Padé-Annahme zu erinnern. Ist sichergestellt, dass die Funktion  $E(\lambda)$  für  $\lambda \leq 1$  eine endliche Anzahl von Polen besitzt und bei  $\lambda = 1$  stetig ist, konvergiert eine Teilfolge der  $[M/M]$  Padé-Approximanten gegen die Funktion  $E(\lambda)$ . Die Bedingungen sollten für das physikalische System ohne Probleme erfüllt sein. Daher kann man motivieren, dass die Padé-Annahme anwendbar ist. Dann sollten zumindest für große  $M$  die diagonalen Padé-Approximanten dem exakten Wert für  $E(\lambda)$  sehr nahe kommen. In Abbildung 10 sind die Werte verschiedener Padé-Approximanten an der physikalischen Stelle gezeigt. Im linken Graph sind die diagonalen Approximanten zu sehen, auf die sich die Padé-Annahme bezieht. Man erkennt, dass die Werte mit dem durch eine exakte Diagonalisierung (No-Core-Schalenmodell [7]) ermittelten, als Strich eingezeichneten Wert von  $-24.248$  MeV

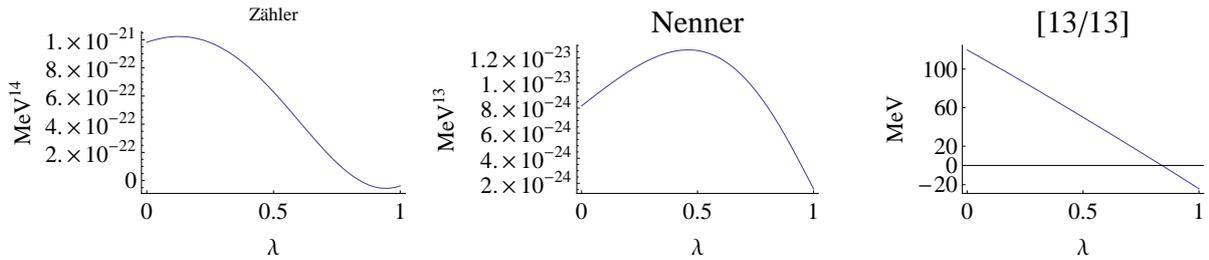


Abbildung 9: Zähler, Nenner und der Padé-Approximant [13/13].

gut übereinstimmen. Daraus könnte man schließen, dass diese Approximanten zu der konvergenten Teilfolge gehören und diese außerdem schnell konvergiert, da es schon bei diesen relativ kleinen Werten für  $M$  bereits gute Übereinstimmung mit dem exakten Resultat gibt.

In den anderen beiden Graphen in Abbildung 10 sind die Padé-Approximanten der beiden Nebendiagonalen gezeigt. Man erkennt, dass sie dem Mittelwert der diagonalen Approximanten ebenfalls sehr nahe kommen. Allerdings sieht man im mittleren Graph auch eine größere Abweichung des Approximanten [8/9]. Da aber selbst bei den diagonalen Approximanten nur eine Teilfolge konvergiert und somit große Abweichungen Einzelner möglich sind, ist einzusehen, dass solche Abweichungen bei nebendiagonalen Approximanten auch vorkommen. Es ist dennoch bemerkenswert, dass die Grundzustandsenergiebestimmung auch mit den Nebendiagonalen-Approximanten gut möglich zu sein scheint.

Bildet man den Mittelwert der diagonalen Approximanten ab [8/8] und der nebendiagonalen Approximanten ab [9/10] bzw. [9/8] erhält man für die Grundzustandsenergie  $-24.2425$  MeV.

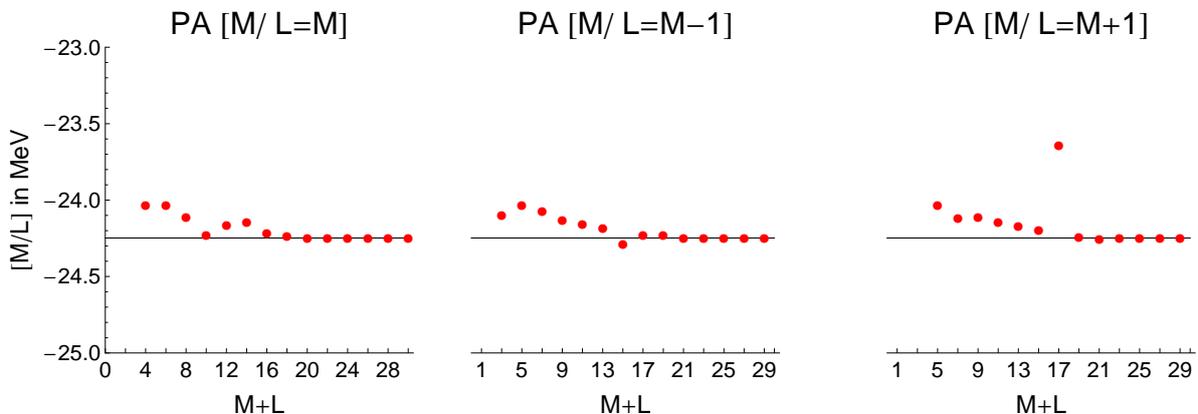


Abbildung 10: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  ${}^4\text{He}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit  $e \leq 4$  ohne weitere Einschränkungen.

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-27.9456	1	0	-14.685	0	1	56.5404
2	2	-24.034	2	1	-24.1001	1	2	-22.8557
3	3	-24.034	3	2	-24.0328	2	3	-24.0328
4	4	-24.1089	4	3	-24.0692	3	4	-24.1163
5	5	-24.2263	5	4	-24.1305	4	5	-24.1137
6	6	-24.1623	6	5	-24.1545	5	6	-24.1454
7	7	-24.1462	7	6	-24.1808	6	7	-24.1705
8	8	-24.2146	8	7	-24.2853	7	8	-24.1976
9	9	-24.2316	9	8	-24.2286	8	9	-23.6404
10	10	-24.245	10	9	-24.226	9	10	-24.2382
11	11	-24.2464	11	10	-24.2494	10	11	-24.2526
12	12	-24.2457	12	11	-24.245	11	12	-24.2453
13	13	-24.2467	13	12	-24.2465	12	13	-24.2498
14	14	-24.2471	14	13	-24.2464	13	14	-24.2471
15	15	-24.247	15	14	-24.2472	14	15	-24.2471

Tabelle 4: Werte der in Abbildung 10 gezeigten Padé-Approximanten

### 5.5 Anwendungsbeispiel für $^{16}\text{O}$

Nachdem die Grundzustandsenergiebestimmung für Helium mit der Padé-Approximation möglich war, soll dies nun auch für  $^{16}\text{O}$  versucht werden. Es wird sich zeigen, dass dies hier möglich ist, obwohl die Potenzreihe bis zur 30. Ordnung nicht konvergiert (siehe Abbildung 4).

Für die Berechnung der Energiekorrekturen durch die Störungsrechnung wurden alle Zustände bis  $e \leq 10$  verwendet die aus dem Grundzustand durch 4-Teilchen-4-Loch-Anregungen hervorgehen und höchstens  $4\hbar\omega$  Anregungsenergie haben. In Abbildung 11 sieht man Zähler, Nenner von  $[2/2]$  und den Approximanten  $[2/2]$  selbst. Vergleicht man diese Graphen mit denen in Abbildung 12, in der das Gleiche für den Padé-Approximanten  $[8/8]$  gezeigt ist, stellt man wieder fest, dass sich Zähler und Nenner der einzelnen Approximanten untereinander stark verändern, aber gleichzeitig der Padé-Approximant stabil bleibt. Bei  $[8/8]$  geht das soweit, dass der Zähler eine zusätzliche Nullstelle aufweist, die im Approximanten nicht zu sehen ist, weil der Nenner ebenfalls an der Stelle eine Nullstelle hat.

Die Bedingung (69) kann auch in diesem Beispiel nicht erfüllt werden, so dass die Schrankeneigenschaften nicht verwendet werden können.

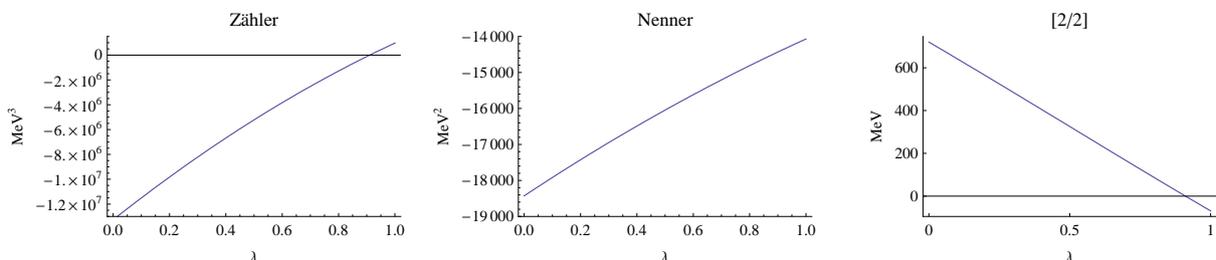


Abbildung 11: Zähler, Nenner und der Padé-Approximant  $[2/2]$ .

Als nächstes soll wieder die Übersicht über Approximanten der Diagonale und der Nebendiagonale gezeigt werden. Dies ist in Abbildung 13 zu sehen. Man erkennt, wie auch schon bei Helium, dass sich die diagonalen Approximanten

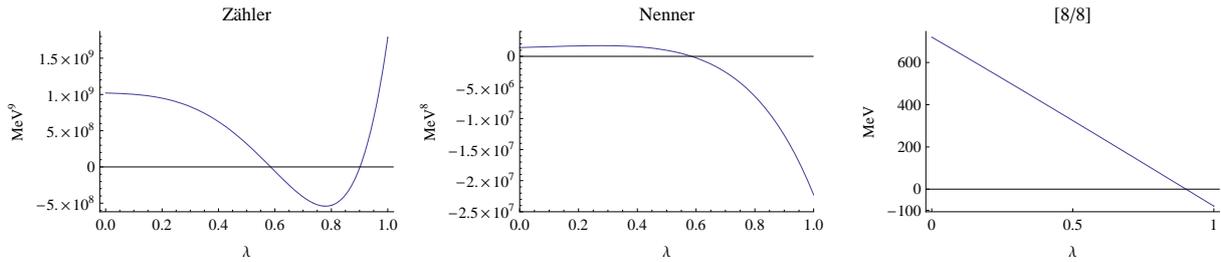


Abbildung 12: Zähler, Nenner und der Padé-Approximant [8/8].

ab einem bestimmten Wert für  $M$  kaum noch ändern, was wieder auf die konvergente Teilfolge schließen lässt. Auch die nebendiagonalen Approximanten ändern sich ab einem bestimmten Approximanten nicht mehr und sind daher zur Grundzustandsenergiebestimmung nützlich. Bildet man wieder den Mittelwert der diagonalen Approximanten ab [6/6] und der nebendiagonalen ab [5/6] bzw. [5/4] erhält man für die Grundzustandsenergie  $-80.3552$  MeV. Die Grundzustandsenergie aus einer exakten Diagonalisierung des Hamiltonians in diesem Hilbertraum beträgt  $-80.3559$  MeV.

Es ist also möglich die Grundzustandsenergie mit der Padé-Approximation näherungsweise zu bestimmen, obwohl die Störungsreihe keinerlei Anzeichen von Konvergenz zeigt. Dies ist bemerkenswert, da sowohl bei der Potenzreihe als auch bei der Padé-Approximation die *gleiche physikalische Information* als Input dienen, nämlich die gleiche Anzahl von Energiekorrekturen.

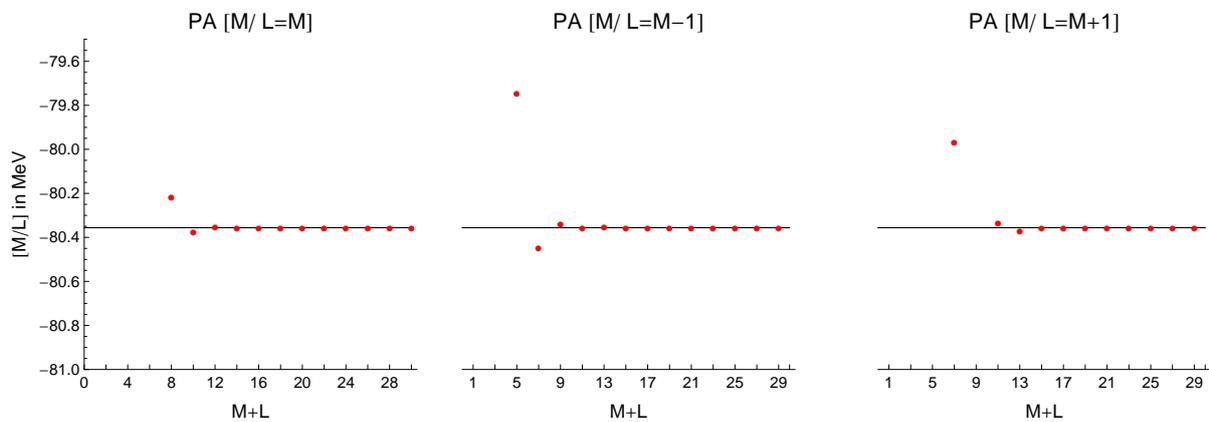


Abbildung 13: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  $^{16}\text{O}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit  $4p4h$ -Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $4\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-102.078	1	0	-52.3909	0	1	347.362
2	2	-68.8285	2	1	-84.5744	1	2	-76.5872
3	3	-81.191	3	2	-79.7456	2	3	-75.1988
4	4	-80.217	4	3	-80.4468	3	4	-79.9697
5	5	-80.378	5	4	-80.3415	4	5	-77.4506
6	6	-80.352	6	5	-80.358	5	6	-80.3343
7	7	-80.3562	7	6	-80.3557	6	7	-80.3715
8	8	-80.3565	8	7	-80.356	7	8	-80.3559
9	9	-80.3559	9	8	-80.3559	8	9	-80.3558
10	10	-80.3559	10	9	-80.3559	9	10	-80.3559
11	11	-80.3559	11	10	-80.3559	10	11	-80.3559
12	12	-80.3559	12	11	-80.3559	11	12	-80.3559
13	13	-80.3559	13	12	-80.3559	12	13	-80.3559
14	14	-80.3559	14	13	-80.3559	13	14	-80.3559
15	15	-80.3559	15	14	-80.3559	14	15	-80.3559

Tabelle 5: Werte der in Abbildung 13 gezeigten Padé-Approximanten.



## 6 Anwendung auf doppelt-magische Kerne

In diesem Abschnitt soll die Padé-Approximation für verschiedene Modellräume auf die Kerne  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  und  ${}^{40}\text{Ca}$  angewendet werden. Es werden dafür jeweils die ersten 30 Energiekorrekturen aus der Störungsrechnung verwendet und die Padé-Approximanten immer an der physikalischen Stelle  $\lambda = 1$  ausgewertet. Der Oszillatorparameter ist in allen Fällen  $\hbar\omega = 20$  MeV. Um den Vergleich mit dem Wert aus der exakten Diagonalisierung machen zu können, werden für jeden Modellraum die aus dem vorigen Abschnitt bekannten Abbildungen mit den Werten und Plots der diagonalen und nebendiagonalen Padé-Approximanten gezeigt. In den Plots ist dabei der exakte Wert durch die eingezeichnete Linie hervorgehoben.

Es sei außerdem angemerkt, dass die angesprochenen Schrankeneigenschaften (71)-(74) in keinem Fall verwendet werden können.

### 6.1 ${}^4\text{He}$

In Abbildung 14 ist für  ${}^4\text{He}$  die Übersicht der Padé-Approximanten für einen Modellraum gezeigt, in dem es bis zu 4-Teilchen-4-Loch-Anregungen alle Zustände mit maximaler Anregungsenergie von  $6\hbar\omega$  gibt. Man erkennt, dass die Approximanten bereits für kleine Werte von  $M$  gut mit dem exakten Wert übereinstimmen. Es lässt sich also wieder argumentieren, dass die gut übereinstimmenden diagonalen Approximanten zu der konvergenten Teilfolge gehören. Außerdem sind auch wieder die nebendiagonalen Approximanten zur Grundzustandsenergiebestimmung geeignet. Der eingezeichnete exakte Wert ist  $-23.785$  MeV. Bildet man den Mittelwert der diagonalen Approximanten ab  $[4/4]$  und der nebendiagonalen ab  $[5/4]$  bzw.  $[4/5]$  ergibt sich für die approximierte Grundzustandsenergie  $-23.785$  MeV, was genau mit dem exakten Wert übereinstimmt.

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-28.0958	1	0	-14.685	0	1	56.5404
2	2	-23.6462	2	1	-23.935	1	2	-22.4647
3	3	-23.928	3	2	-23.7339	2	3	-23.7872
4	4	-23.7808	4	3	-23.771	3	4	-23.8078
5	5	-23.7737	5	4	-23.7832	4	5	-23.7826
6	6	-23.7855	6	5	-23.7858	5	6	-23.7848
7	7	-23.7857	7	6	-23.7856	6	7	-23.7859
8	8	-23.7857	8	7	-23.7858	7	8	-23.7857
9	9	-23.7857	9	8	-23.7857	8	9	-23.7857
10	10	-23.7857	10	9	-23.7857	9	10	-23.7857
11	11	-23.7857	11	10	-23.7857	10	11	-23.7857
12	12	-23.7857	12	11	-23.7857	11	12	-23.7857
13	13	-23.7857	13	12	-23.7857	12	13	-23.7857
14	14	-23.7857	14	13	-23.7857	13	14	-23.7857
15	15	-23.7857	15	14	-23.7857	14	15	-23.7857

Tabelle 6: Werte der in Abbildung 14 gezeigten Padé-Approximanten.

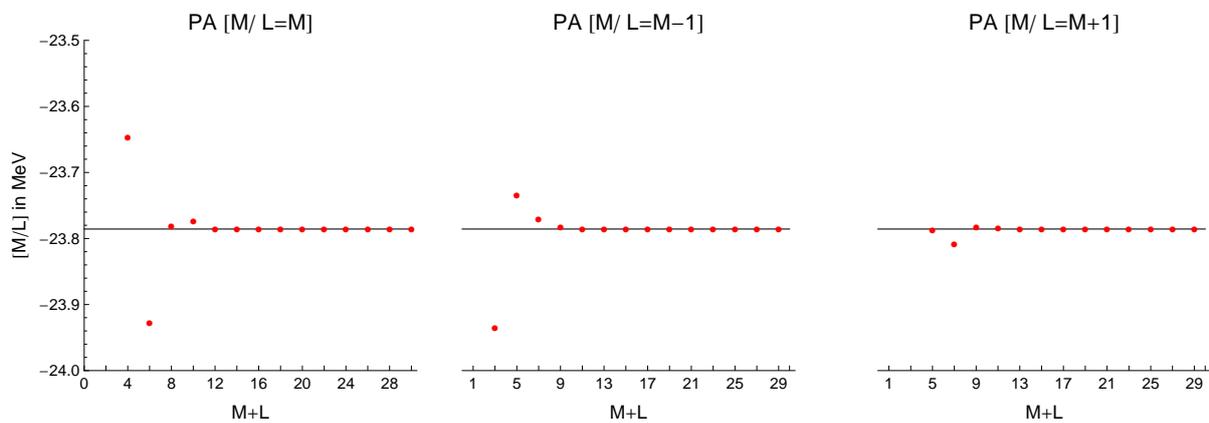


Abbildung 14: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  ${}^4\text{He}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit 4p4h-Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $6\hbar\omega$ .

Vergrößert man den Modellraum weiter, in dem man bis zu 4-Teilchen-4-Loch-Zustände mit einer maximalen Anregungsenergie von  $8\hbar\omega$  zulässt ergibt sich das in Abbildung 15 gezeigte Bild. Wieder stimmen die Approximanten mit genügend großem  $M$  gut mit dem exakten Wert überein. Dieser ist hier  $-25.078\text{ MeV}$ . Mittelt man die Padé-Approximanten ab  $[4/4]$ ,  $[5/4]$  und  $[3/4]$  erhält man für die approximierte Grundzustandsenergie  $-25.077\text{ MeV}$ , was wieder sehr gut mit dem exakten Wert übereinstimmt.

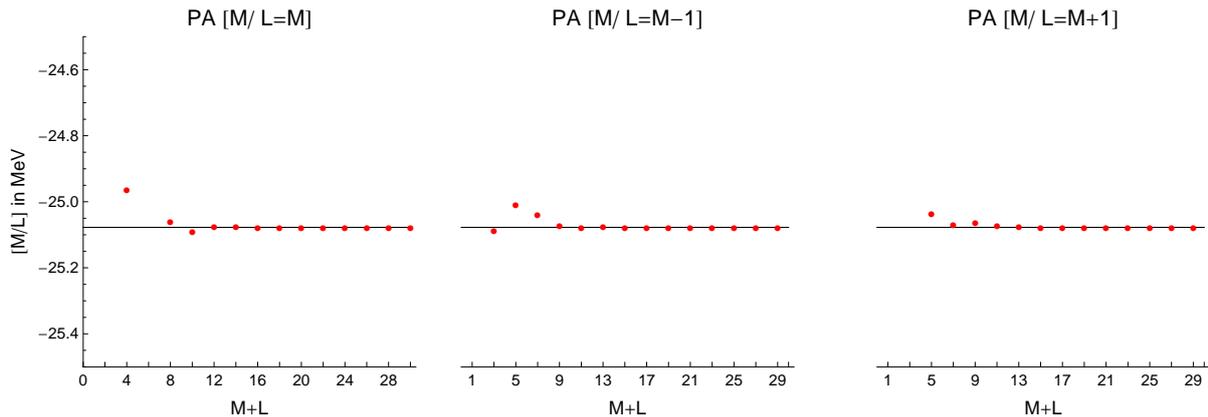


Abbildung 15: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  ${}^4\text{He}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit  $4p4h$ -Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $8\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-30.2314	1	0	-14.685	0	1	56.5404
2	2	-24.9636	2	1	-25.0892	1	2	-23.1727
3	3	-23.4157	3	2	-25.0088	2	3	-25.0372
4	4	-25.0594	4	3	-25.0395	3	4	-25.069
5	5	-25.0901	5	4	-25.0719	4	5	-25.0637
6	6	-25.0772	6	5	-25.0774	5	6	-25.0738
7	7	-25.0772	7	6	-25.077	6	7	-25.0771
8	8	-25.0775	8	7	-25.0773	7	8	-25.0776
9	9	-25.0776	9	8	-25.0777	8	9	-25.0776
10	10	-25.0776	10	9	-25.0776	9	10	-25.0776
11	11	-25.0776	11	10	-25.0776	10	11	-25.0776
12	12	-25.0776	12	11	-25.0776	11	12	-25.0776
13	13	-25.0776	13	12	-25.0776	12	13	-25.0776
14	14	-25.0776	14	13	-25.0776	13	14	-25.0776
15	15	-25.0776	15	14	-25.0776	14	15	-25.0776

Tabelle 7: Werte der in Abbildung 15 gezeigten Padé-Approximanten.

Abschließend wird der Modellraum noch ein weiteres Mal vergrößert. Nun sind auch Zustände mit maximaler Anregungsenergie von  $10\hbar\omega$  erlaubt. Abbildung 16 zeigt die zugehörigen Plots und Werte. Auch hier ist die gute Übereinstimmung mit dem exakten Wert zu erkennen. Der exakte Wert für diesen Modellraum lautet  $-25.946$  MeV. Mittelwertbildung der Approximanten ab  $[6/6]$ ,  $[5/4]$ , und  $[5/6]$  ergibt  $-25.946$  MeV, also genau den exakten Wert.

Zusammenfassen kann für die betrachteten Fälle für Helium gesagt werden, dass die Padé-Approximation eine gute Möglichkeit der Grundzustandsenergiebestimmung ist.

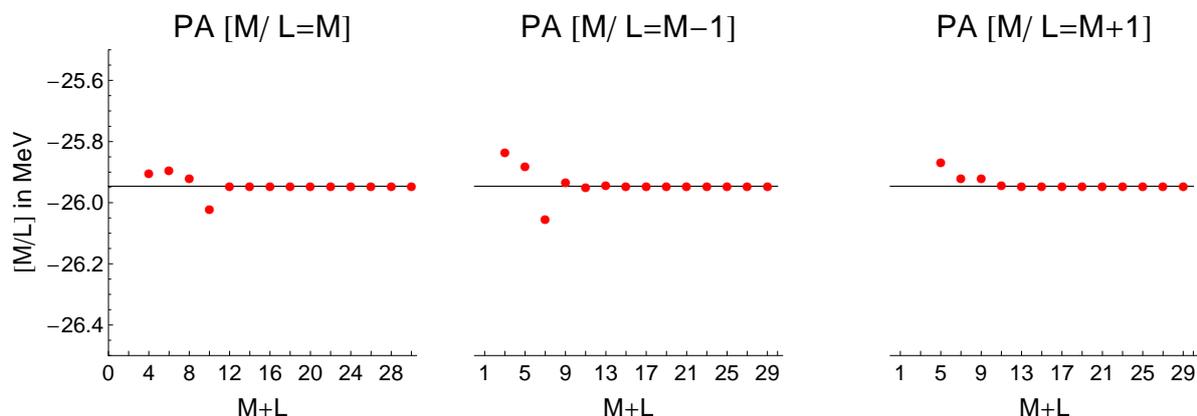


Abbildung 16: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  ${}^4\text{He}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit  $4p4h$ -Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $10\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-31.5423	1	0	-14.685	0	1	56.5404
2	2	-25.9037	2	1	-25.8354	1	2	-23.6843
3	3	-25.8941	3	2	-25.8804	2	3	-25.8688
4	4	-25.9197	4	3	-26.0552	3	4	-25.9196
5	5	-26.0224	5	4	-25.932	4	5	-25.9196
6	6	-25.945	6	5	-25.9496	5	6	-25.9417
7	7	-25.9448	7	6	-25.9441	6	7	-25.9444
8	8	-25.946	8	7	-25.9456	7	8	-25.9467
9	9	-25.9462	9	8	-25.9467	8	9	-25.9462
10	10	-25.9462	10	9	-25.9462	9	10	-25.9462
11	11	-25.9462	11	10	-25.9462	10	11	-25.9462
12	12	-25.9462	12	11	-25.9462	11	12	-25.9462
13	13	-25.9462	13	12	-25.9462	12	13	-25.9462
14	14	-25.9462	14	13	-25.9462	13	14	-25.9462
15	15	-25.9462	15	14	-25.9462	14	15	-25.9462

Tabelle 8: Werte der in Abbildung 16 gezeigten Padé-Approximanten.

6.2  $^{16}\text{O}$ 

Nun folgt die Diskussion für Sauerstoff. Eine gute Übereinstimmung der exakten mit der approximierten Grundzustandsenergie ist bereits in Abbildung 13 gezeigt. Der exakte Wert wird jeweils durch eine No-Core-Schalenmodell Rechnung im gleichen Modellraum ermittelt. Jetzt wird ein Modellraum betrachtet, in dem maximal 4-Teilchen-4-Loch-Zustände berücksichtigt werden, die maximale Anregungsenergie  $2\hbar\omega$  haben. Die Übersicht ist in Abbildung 17 gezeigt. Es zeigt sich erneut die gute Übereinstimmung mit dem exakten Wert von  $-63.053\text{ MeV}$ . Dies belegt auch der Mittelwert von  $-63.053\text{ MeV}$ , bei dem die Approximanten ab  $[5/5]$ ,  $[5/4]$  und  $[5/6]$  berücksichtigt wurden.

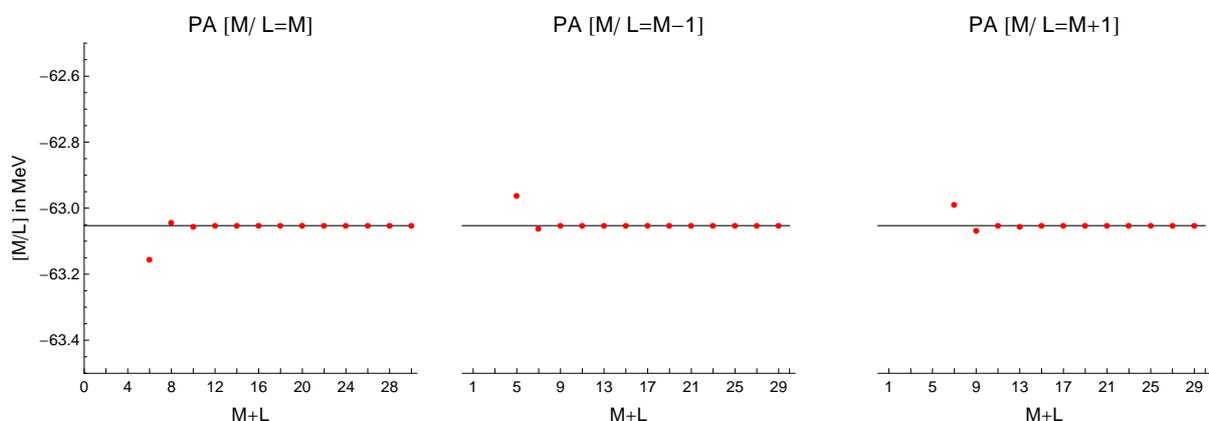


Abbildung 17: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  $^{16}\text{O}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit  $4p4h$ -Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $2\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-69.8685	1	0	-52.3909	0	1	347.362
2	2	-61.6176	2	1	-64.053	1	2	-61.3314
3	3	-63.1556	3	2	-62.9625	2	3	-61.3012
4	4	-63.0438	4	3	-63.0614	3	4	-62.9883
5	5	-63.0544	5	4	-63.0522	4	5	-63.0664
6	6	-63.0531	6	5	-63.0534	5	6	-63.052
7	7	-63.0533	7	6	-63.0532	6	7	-63.0538
8	8	-63.0532	8	7	-63.0532	7	8	-63.0532
9	9	-63.0532	9	8	-63.0532	8	9	-63.0532
10	10	-63.0532	10	9	-63.0532	9	10	-63.0532
11	11	-63.0532	11	10	-63.0532	10	11	-63.0532
12	12	-63.0532	12	11	-63.0532	11	12	-63.0532
13	13	-63.0532	13	12	-63.0532	12	13	-63.0532
14	14	-63.0532	14	13	-63.0532	13	14	-63.0532
15	15	-63.0532	15	14	-63.0532	14	15	-63.0532

Tabelle 9: Werte der in Abbildung 17 gezeigten Padé-Approximanten.

Betrachtet man einen Modellraum mit maximal 2-Teilchen-2-Loch-Zuständen mit  $4\hbar\omega$  Anregungsenergie erlaubt sind, findet man die in Abbildung 18 gezeigte Übersicht. Die gezeigten Approximanten stimmen gut mit dem eingezeichneten exakten Wert überein. Im rechten Plot erkennt man, dass die Approximanten anfangs noch größere Abweichungen zeigen, die dann aber rasch geringer werden. Der gemittelte Wert aus den Approximanten ab  $[6/6]$ ,  $[6/5]$  und  $[7/8]$  beträgt  $-79.028$  MeV. Der exakte Wert ist ebenfalls  $-79.028$  MeV und stimmt genau mit dem approximierten überein.

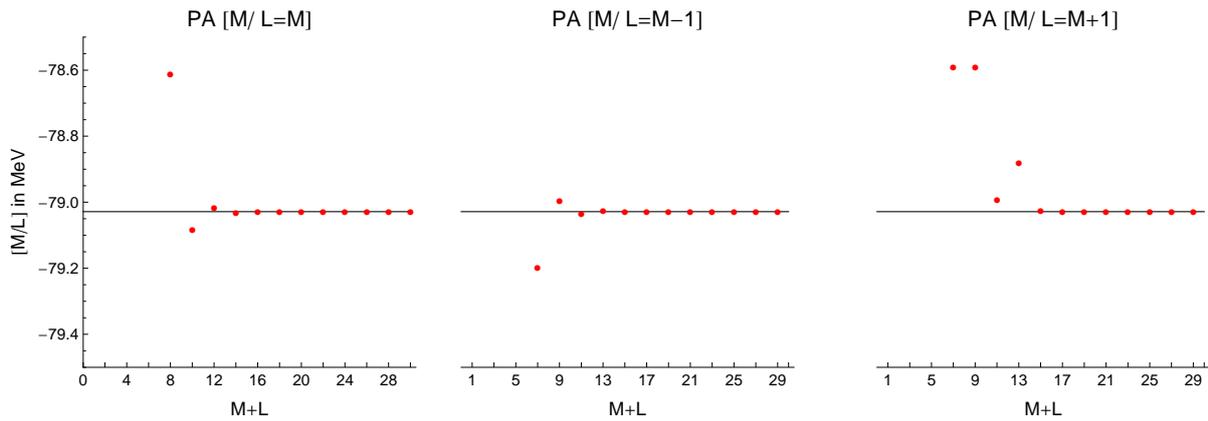


Abbildung 18: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für <sup>16</sup>O bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit 2p2h-Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $4\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-102.078	1	0	-52.3909	0	1	347.362
2	2	-40.2976	2	1	-84.5744	1	2	-76.5872
3	3	-80.2851	3	2	-78.0774	2	3	-72.1041
4	4	-78.6122	4	3	-79.1995	3	4	-78.5913
5	5	-79.0824	5	4	-78.9967	4	5	-78.5909
6	6	-79.0164	6	5	-79.0344	5	6	-78.9933
7	7	-79.0304	7	6	-79.0273	6	7	-78.8807
8	8	-79.028	8	7	-79.0286	7	8	-79.0263
9	9	-79.0285	9	8	-79.0284	8	9	-79.0297
10	10	-79.0284	10	9	-79.0284	9	10	-79.0283
11	11	-79.0284	11	10	-79.0284	10	11	-79.0285
12	12	-79.0284	12	11	-79.0284	11	12	-79.0284
13	13	-79.0284	13	12	-79.0284	12	13	-79.0284
14	14	-79.0284	14	13	-79.0284	13	14	-79.0284
15	15	-79.0284	15	14	-79.0284	14	15	-79.0284

Tabelle 10: Werte der in Abbildung 18 gezeigten Padé-Approximanten.

Als nächstes sollen auch bis zu 2-Teilchen-2-Loch-Anregungen zugelassen werden, die eine Anregungsenergie von  $6\hbar\omega$  haben. Dies ist in Abbildung 19 gezeigt. Die Approximanten stimmen hier ebenfalls gut überein, auch wenn es im rechten Plot bis zu etwas größeren Werten von  $M$  dauert, bis der Unterschied unwesentlich wird. Der exakte Wert beträgt für diesen Modellraum  $-89.557\text{ MeV}$ . Der gemittelte Wert aus den Approximanten ab  $[8/8]$ ,  $[7/6]$  und  $[9/10]$  erhält man  $-89.557\text{ MeV}$ , was die gute Übereinstimmung nochmals zeigt.

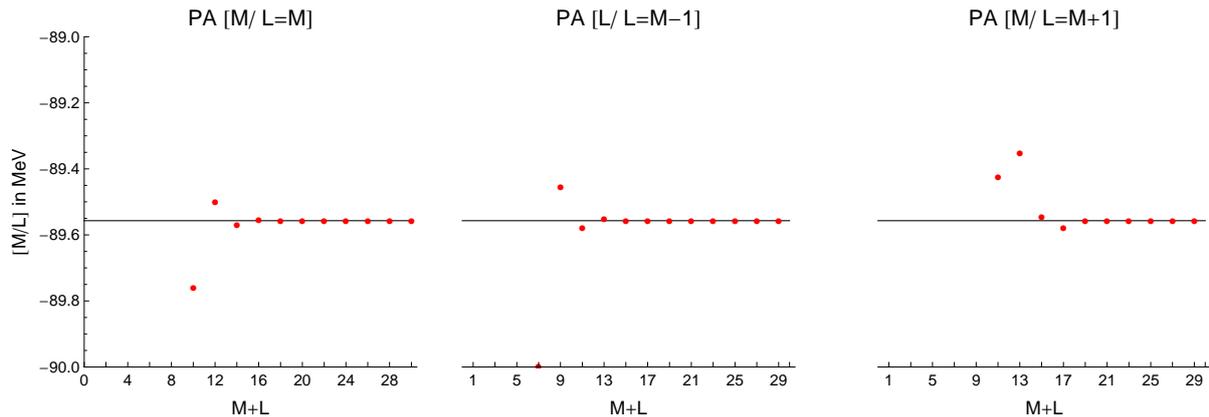


Abbildung 19: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  $^{16}\text{O}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit 2p2h-Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $6\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-130.206	1	0	-52.3909	0	1	347.362
2	2	5.35145	2	1	-98.8608	1	2	-82.9154
3	3	-92.7221	3	2	-87.4864	2	3	-74.6169
4	4	-88.1296	4	3	-89.9975	3	4	-88.398
5	5	-89.7591	5	4	-89.4537	4	5	-88.383
6	6	-89.4997	6	5	-89.5784	5	6	-89.4243
7	7	-89.5686	7	6	-89.5516	6	7	-89.3507
8	8	-89.5543	8	7	-89.5582	7	8	-89.5446
9	9	-89.5577	9	8	-89.5568	8	9	-89.5798
10	10	-89.557	10	9	-89.5571	9	10	-89.5561
11	11	-89.5571	11	10	-89.5571	10	11	-89.5575
12	12	-89.5571	12	11	-89.5571	11	12	-89.557
13	13	-89.5571	13	12	-89.5571	12	13	-89.5571
14	14	-89.5571	14	13	-89.5571	13	14	-89.5571
15	15	-89.5571	15	14	-89.5571	14	15	-89.5571

Tabelle 11: Werte der in Abbildung 19 gezeigten Padé-Approximanten.

Schließlich soll noch der Modellraum betrachtet werden, in dem auch  $8\hbar\omega$  als Anregungsenergie zugelassen ist. Die zugehörige Übersicht zeigt Abbildung 20. Auch hier ist die Übereinstimmung zu erkennen. Der exakte Wert ist  $-96.352\text{ MeV}$ , der mit dem gemittelten Wert von  $-96.352\text{ MeV}$  identisch ist. Dabei wurden alle Approximanten ab  $[8/8]$ ,  $[8/7]$  und  $[9/10]$  berücksichtigt.

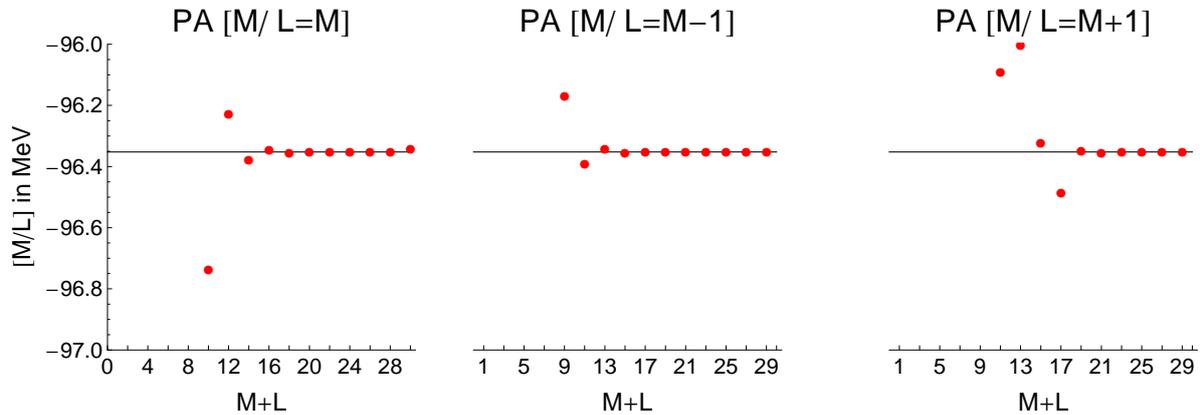


Abbildung 20: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für <sup>16</sup>O bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit 2p2h-Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $8\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-151.199	1	0	-52.3909	0	1	347.362
2	2	26.8757	2	1	-108.219	1	2	-85.1998
3	3	-101.423	3	2	-93.3989	2	3	-74.8056
4	4	-93.7914	4	3	-97.0513	3	4	-94.3654
5	5	-96.7362	5	4	-96.1703	4	5	-94.3303
6	6	-96.2289	6	5	-96.3917	5	6	-96.0915
7	7	-96.3785	7	6	-96.3401	6	7	-96.0031
8	8	-96.3451	8	7	-96.3543	7	8	-96.3226
9	9	-96.354	9	8	-96.3513	8	9	-96.4854
10	10	-96.3518	10	9	-96.3523	9	10	-96.3494
11	11	-96.3524	11	10	-96.3522	10	11	-96.3541
12	12	-96.3522	12	11	-96.3523	11	12	-96.352
13	13	-96.3528	13	12	-96.3523	12	13	-96.3525
14	14	-96.3522	14	13	-96.3522	13	14	-96.3525
15	15	-96.3412	15	14	-96.3522	14	15	-96.3516

Tabelle 12: Werte der in Abbildung 20 gezeigten Padé-Approximanten.

### 6.3 $^{40}\text{Ca}$

Schließlich folgt nun noch die Anwendung der Padé-Approximation auf  $^{40}\text{Ca}$  für verschiedene Modellräume. Zunächst sollen maximal 2-Teilchen-2-Loch-Zustände berücksichtigt werden, die eine maximale Anregungsenergie von  $2\hbar\omega$  haben. Die Werte der Approximanten sind in Abbildung 21 zu sehen. Man erkennt auch hier die gute Übereinstimmung der Approximanten für genügend große  $M$ . Allerdings sieht man auch, dass es durchaus noch Schwankungen gibt, z.B. wenn man den Approximant  $[15/15]$  mit den Vorhergehenden vergleicht. Solche „Ausreißer“ sind aber zu verstehen, wenn man sich daran erinnert, dass nur eine Teilfolge konvergieren sollte. Mittelt man hier alle Approximanten ab  $[22/22]$ ,  $[9/8]$  und  $[9/10]$  erhält man für die Grundzustandsenergie  $-158.127\text{ MeV}$ . Der exakte Wert aus der Diagonalisierungsrechnung ist ebenfalls  $-158.127\text{ MeV}$ .

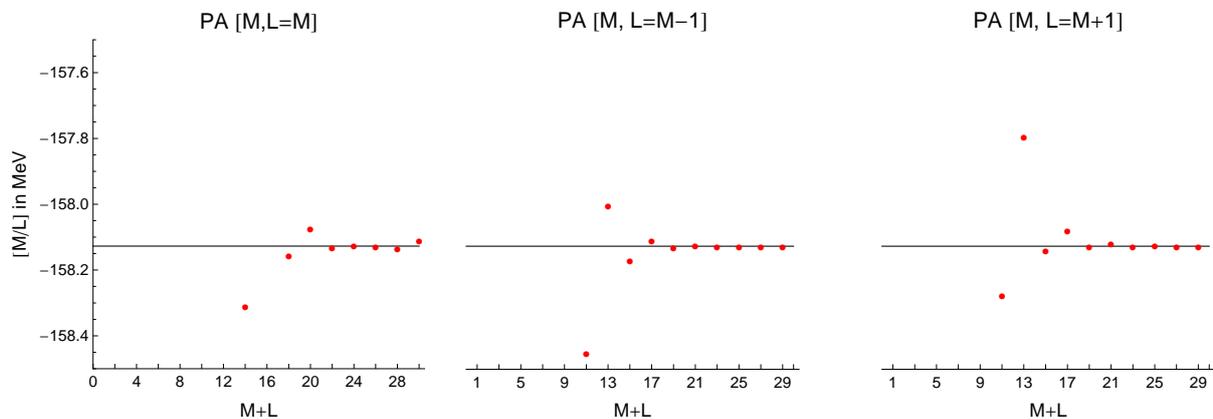


Abbildung 21: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  $^{40}\text{Ca}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit 2p2h-Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $2\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-194.149	1	0	-124.941	0	1	1169.56
2	2	-203.477	2	1	-176.027	1	2	-170.033
3	3	-164.063	3	2	-152.213	2	3	-126.418
4	4	-169.006	4	3	-160.44	3	4	-159.479
5	5	-159.188	5	4	-157.271	4	5	-155.391
6	6	-163.064	6	5	-158.452	5	6	-158.279
7	7	-158.311	7	6	-158.006	6	7	-157.798
8	8	-156.996	8	7	-158.173	7	8	-158.142
9	9	-158.158	9	8	-158.11	8	9	-158.083
10	10	-158.075	10	9	-158.134	9	10	-158.128
11	11	-158.133	11	10	-158.125	10	11	-158.121
12	12	-158.126	12	11	-158.129	11	12	-158.128
13	13	-158.13	13	12	-158.129	12	13	-158.128
14	14	-158.137	14	13	-158.13	13	14	-158.13
15	15	-158.111	15	14	-158.13	14	15	-158.13

Tabelle 13: Werte der in Abbildung 21 gezeigten Padé-Approximanten.

Als nächstes wird der Modellraum dahingehend vergrößert, dass nun auch solche Zustände erlaubt sind, die  $4\hbar\omega$  Anregungsenergie haben. Die zugehörige Übersicht ist in Abbildung 22 gezeigt. Diesmal erkennt man, dass die im mittleren Plot gezeigten Approximanten am besten mit dem exakten Wert von  $-187.682\text{ MeV}$  übereinstimmen. Aber auch die Werte der diagonalen Approximanten und der nebendiagonalen Approximanten im rechten Plot liegen, gemessen am dargestellten Wertebereich, noch dicht am exakten Wert, wenn auch nicht so gut wie in den vorherigen Fällen. Mittelt man hier alle Approximanten ab  $[12/12]$ ,  $[10/9]$  und  $[9/10]$  erhält man  $-187.677\text{ MeV}$ , was einer Abweichung von  $0,003\%$  entspricht.

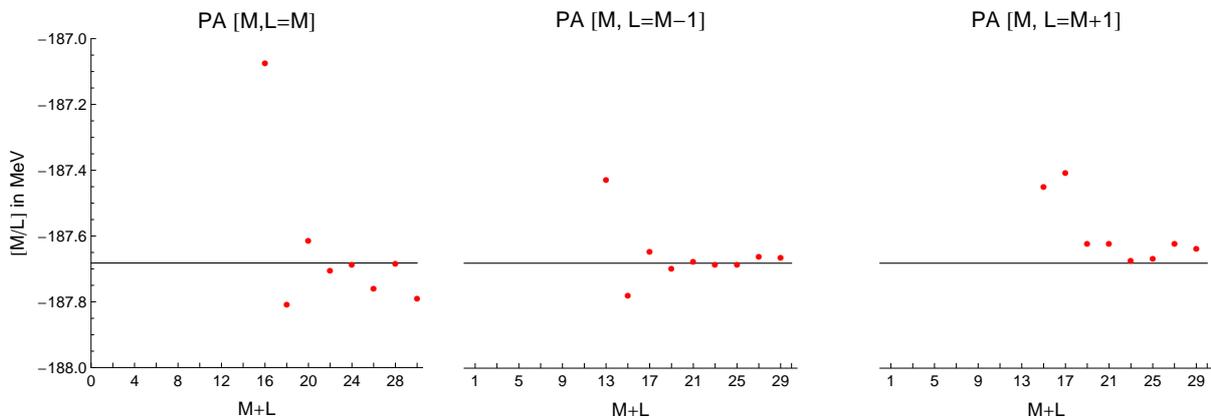


Abbildung 22: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  $^{40}\text{Ca}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit  $2p2h$ -Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $4\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-280.931	1	0	-124.941	0	1	1169.56
2	2	-324.896	2	1	-222.567	1	2	-193.309
3	3	-205.583	3	2	-176.467	2	3	-105.805
4	4	-275.731	4	3	-192.289	3	4	-185.936
5	5	-191.375	5	4	-185.973	4	5	-178.58
6	6	-179.694	6	5	-188.344	5	6	-186.89
7	7	-188.388	7	6	-187.43	6	7	-186.246
8	8	-187.074	8	7	-187.779	7	8	-187.449
9	9	-187.806	9	8	-187.646	8	9	-187.408
10	10	-187.612	10	9	-187.697	9	10	-187.623
11	11	-187.705	11	10	-187.678	10	11	-187.622
12	12	-187.686	12	11	-187.687	11	12	-187.672
13	13	-187.758	13	12	-187.687	12	13	-187.667
14	14	-187.682	14	13	-187.663	13	14	-187.623
15	15	-187.79	15	14	-187.665	14	15	-187.637

Tabelle 14: Werte der in Abbildung 22 gezeigten Padé-Approximanten.

Vergrößert man den Modellraum weiter, so dass auch alle Zustände mit Anregungsenergie von  $6\hbar\omega$  vorkommen dürfen, erhält man die in Abbildung 23 gezeigte Situation. Man sieht zwar Schwankungen, aber dennoch bleiben die meisten Approximanten in der Nähe des exakten Wertes. Mittelt man alle Approximanten ab  $[10/10]$ ,  $[9/8]$  (ohne  $[15/14]$ ) und  $[9/10]$  findet man den Mittelwert  $-211.26$  MeV, was auch identisch dem exakten Wert  $-211.267$  MeV ist.

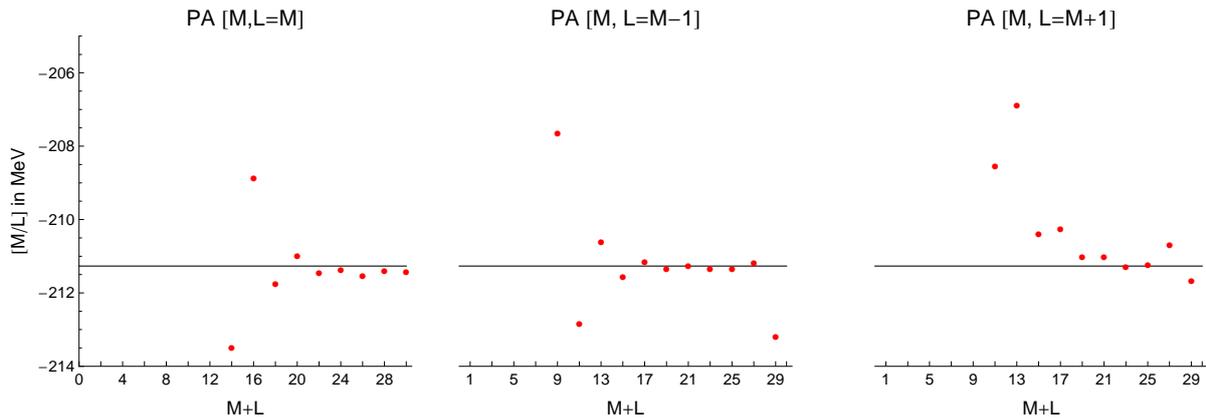


Abbildung 23: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  $^{40}\text{Ca}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit  $2p2h$ -Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $6\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-375.793	1	0	-124.941	0	1	1169.56
2	2	-471.427	2	1	-264.423	1	2	-198.48
3	3	-248.767	3	2	-192.365	2	3	-57.5751
4	4	-370.932	4	3	-220.049	3	4	-203.968
5	5	-220.556	5	4	-207.658	4	5	-188.661
6	6	-181.966	6	5	-212.83	5	6	-208.544
7	7	-213.48	7	6	-210.603	6	7	-206.876
8	8	-208.879	8	7	-211.553	7	8	-210.383
9	9	-211.762	9	8	-211.15	8	9	-210.247
10	10	-210.984	10	9	-211.329	9	10	-211.015
11	11	-211.44	11	10	-211.269	10	11	-211.014
12	12	-211.377	12	11	-211.341	11	12	-211.289
13	13	-211.532	13	12	-211.334	12	13	-211.23
14	14	-211.405	14	13	-211.189	13	14	-210.683
15	15	-211.433	15	14	-213.185	14	15	-211.667

Tabelle 15: Werte der in Abbildung 23 gezeigten Padé-Approximanten.

Nun sollen auch Anregungsenergien von  $8\hbar\omega$  erlaubt werden, und so der Modellraum noch einmal vergrößert werden. Für die zugehörige Übersicht siehe Abbildung 24. Wieder sind Schwankungen um den exakten Wert  $-229.84\text{ MeV}$  zusehen. Mittelt man die Approximanten ab  $[10/10]$ ,  $[9/8]$  und  $[9/10]$  erhält man  $-229.616\text{ MeV}$ , was wieder sehr gut mit dem exakten Wert übereinstimmt. Dies wird besonderes deutlich, wenn man sich nochmals vor Augen hält, dass eine Grundzustandsenergiebestimmung mittels der einfachen Störungsreihe aussichtslos wäre, da diese nach den berücksichtigten 30 Ordnungen noch überhaupt nicht konvergiert.

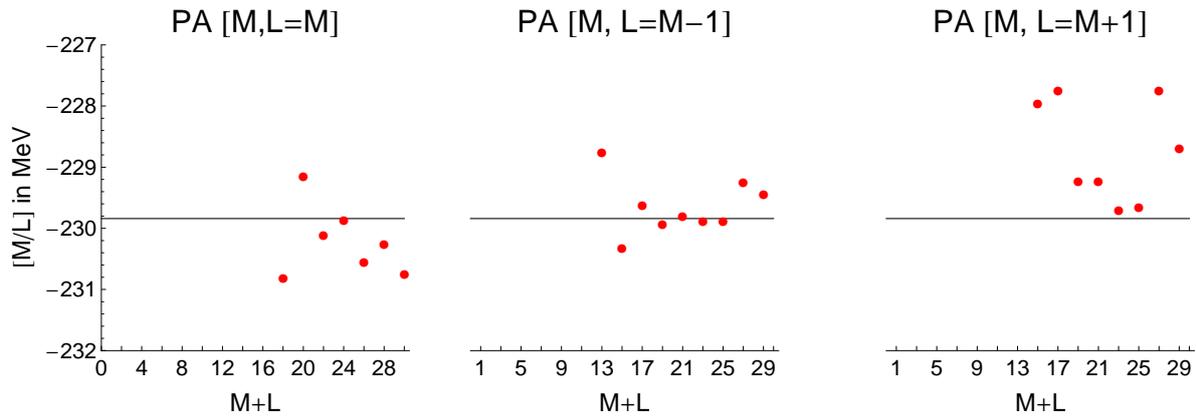


Abbildung 24: Übersicht über diagonale und nebendiagonale Padé-Approximanten (PA) für  $^{40}\text{Ca}$  bei  $\lambda = 1$  unter Berücksichtigung der ersten 30 Energiekorrekturen für Rechnung mit 2p2h-Anregungen und maximaler Anregungsenergie  $6\hbar\omega$ .

M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV	M	L	[M/L] in MeV
1	1	-457.929	1	0	-124.941	0	1	1169.56
2	2	-619.781	2	1	-295.554	1	2	-192.672
3	3	-286.95	3	2	-204.768	2	3	-19.7647
4	4	-489.4	4	3	-242.129	3	4	-214.934
5	5	-245.162	5	4	-224.554	4	5	-193.109
6	6	-178.016	6	5	-232.248	5	6	-224.383
7	7	-233.877	7	6	-228.759	6	7	-221.808
8	8	-225.141	8	7	-230.327	7	8	-227.964
9	9	-230.811	9	8	-229.619	8	9	-227.741
10	10	-229.144	10	9	-229.937	9	10	-229.227
11	11	-230.103	11	10	-229.803	10	11	-229.225
12	12	-229.868	12	11	-229.889	11	12	-229.699
13	13	-230.547	13	12	-229.888	12	13	-229.645
14	14	-230.254	14	13	-229.244	13	14	-227.751
15	15	-230.741	15	14	-229.44	14	15	-228.688

Tabelle 16: Werte der in Abbildung 24 gezeigten Padé-Approximanten.

Insgesamt stellt man also fest, dass in allen betrachteten Fällen die padé-approximierte Grundzustandsenergie sehr gut mit der exakt berechneten übereinstimmt. Dabei spielt es keine Rolle, ob die Störungsreihe nach den verwendeten 30 Energiekorrekturen bereits konvergiert oder nicht.

## 7 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde für verschiedene Atomkerne in verschiedenen Modellräumen die Grundzustandsenergie bestimmt. Dazu wurde zunächst die zeitunabhängige Störungsrechnung verwendet und für den nuklearen Hamiltonian ein UCOM-korreliertes AV18-Potential benutzt. Die Störungsrechnung wurde für den Grundzustand bis zur 30. Korrektur durchgeführt und anschließend die einzelnen Energiekorrekturen aufsummiert. Allerdings stellte man fest, dass die Störungsreihe nach 30 Ordnungen in den meisten Fällen keine Anzeichen von Konvergenz zeigt. Ganz im Gegenteil sorgten die immer größer werdenden Werte der einzelnen Korrekturen für starke Schwankungen. Daher konnte die Grundzustandsenergie mit der Störungsrechnung alleine nicht bestimmt werden.

Daraufhin wurde die Methode der Padé-Approximation angewandt, die als Ausgangspunkt die bereits berechneten Energiekorrekturen aus der Störungsrechnung verwendete und von der man sich eine Konvergenzverbesserung versprach. Es handelt sich dabei um die Annäherung einer Funktion durch eine gebrochenrationale Funktion, für deren Bestimmung nur die Entwicklungskoeffizienten der Ausgangsfunktion nötig sind. Die anzunähernde Funktion war hier  $E(\lambda)$  und die Entwicklungskoeffizienten die einzelnen Energiekorrekturen. Die Auswertung der gebrochenrationalen Funktion bei  $\lambda = 1$  lieferte die Grundzustandsenergie.

Es stellt sich heraus, dass die Grundzustandsenergiebestimmung mit dieser Methode bei allen betrachteten Kernen und in allen betrachteten Modellräumen sehr gut funktioniert. Der Vergleich der padéapproximierten Grundzustandsenergien mit den durch exakte Diagonalisierungen bestimmten Werten zeigt gute Übereinstimmung bis in den 10 keV Energiebereich.

Außerdem zeigt sich, dass, bei Inkaufnahme einer Differenz von 0.1 MeV zur Grundzustandsenergie aus der exakten Diagonalisierung, für leichteren  $^4\text{He}$  bereits Padé-Approximanten für die nur 8 Energiekorrekturen zur Bestimmung nötig sind ausreichen. Für  $^{16}\text{O}$  stellt man fest, dass bei Inkaufnahme einer Abweichung von 0.5 MeV ebenfalls oft Approximanten mit 8-10 Energiekorrekturen ausreichen. Für  $^{40}\text{Ca}$  verschiebt sich die Zahl der nötigen Energiekorrekturen hierfür auf 20. Hier könnten weitere Untersuchungen angestellt werden, ob der Trend, dass für Kerne mit größerer Massenzahl mehr Energiekorrekturen für eine bestimmte Genauigkeit benötigt werden, anhält.

Abschließend soll noch auf die eingangs erwähnte Hoffnung Bezug genommen werden, dass eventuell der Computerrechenaufwand für die Padé-Approximation geringer sein könnte, als für eine exakte Diagonalisierung. Diese Hoffnung konnte im Rahmen dieser Arbeit leider nicht bestätigt werden. Die exakte Diagonalisierung funktioniert mit dem Lanczos-Algorithmus. Es handelt sich dabei im Prinzip um ein iteratives Verfahren, bei dem immer wieder ein Vektor an die hochdimensionale Hamiltonmatrix multipliziert werden muss. Der numerische Aufwand einer solchen Multiplikation ist bei dem hier verwendeten C-Programm vergleichbar mit dem Aufwand, um in der Störungsrechnung eine Ordnung höher zu kommen. Dies liegt daran, dass die verwendeten Programme zur exakten Diagonalisierung bzw. der Störungsrechnung ursprüng-

---

lich aus dem gleichen Programm entstanden sind. Bei  $^{40}\text{Ca}$  wurde beobachtet, dass mindestens 20 Energiekorrekturen nötig sind, um einen sinnvollen Padé-Approximanten zu erhalten. Nach 20 Matrix-Vektor-Multiplikationen ist die Grundzustandsenergie aber auch mit dem Lanczos-Algorithmus bereits bestimmt. Macht man bei der Genauigkeit des Ergebnisses wie oben erwähnt für die kleineren Kerne Abstriche könnte eventuell die Padé-Approximation überlegen sein. Insgesamt besteht aber dennoch die Hoffnung, dass bei einer speicherfreundlicheren Implementation der Störungsrechnung, ohne Zwischenspeicherung der Koeffizientenlisten (siehe Gleichung (45)) und ohne vorheriges generieren aller möglichen Zustände, die Padé-Approximation weniger Rechenaufwand benötigt als eine exakte Diagonalisierung.

## A Mathematica-Code

# Programmcode für die Störungsrechnung für $^4\text{He}$

von Joachim Langhammer

Zunächst muss das Arbeitsverzeichnis definiert werden:

```
SetDirectory["C:\Studium\Bachelor-Arbeit"];
```

---

## Matrixelemente aus Datei ermitteln

Es folgt das Einlesen der Zwei-Teilchen-Matrixelemente der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung aus der Datei. Dabei sind die Zahlen a,b,c,d Sammelindizes für alle Ein-Teilchenquantenzahlen. Die Matrixelemente  $\langle ab|V_{NN}|cd\rangle$  werden direkt in den Variablen f[a,b,c,d] gespeichert.

```
ME1 = Import["av18_E100900_He4_eMax02_hwHO020.ccme", "Table"];
```

```
Do[f[a, b, c, d] = 0,  
  {a, 40}, {b, 40}, {c, 40}, {d, 40}];
```

```
Do[  
  {f[ME1[[i, 1]], ME1[[i, 2]], ME1[[i, 3]], ME1[[i, 4]]] = ME1[[i, 5]],  
  f[ME1[[i, 1]], ME1[[i, 2]], ME1[[i, 4]], ME1[[i, 3]]] = -ME1[[i, 5]],  
  f[ME1[[i, 2]], ME1[[i, 1]], ME1[[i, 3]], ME1[[i, 4]]] = -ME1[[i, 5]],  
  f[ME1[[i, 2]], ME1[[i, 1]], ME1[[i, 4]], ME1[[i, 3]]] = ME1[[i, 5]],  
  f[ME1[[i, 3]], ME1[[i, 4]], ME1[[i, 1]], ME1[[i, 2]]] = ME1[[i, 5]],  
  f[ME1[[i, 4]], ME1[[i, 3]], ME1[[i, 1]], ME1[[i, 2]]] = -ME1[[i, 5]],  
  f[ME1[[i, 3]], ME1[[i, 4]], ME1[[i, 2]], ME1[[i, 1]]] = -ME1[[i, 5]],  
  f[ME1[[i, 4]], ME1[[i, 3]], ME1[[i, 2]], ME1[[i, 1]]] = ME1[[i, 5]]},  
  {i, Length[ME1]}]
```

---

## Initialisierung der zu den einzelnen Vielteilchenzuständen gehörenden Energien

Zunächst wieder das Einlesen aus einer Datei mit den Einteilchen-Quantenzahlen und dann die Speicherung der einzelnen Energien in der Variable EE. Es handelt sich hier um die Energieeigenwerte des ungestörten Hamiltonians  $H_0$ , also um die harmonischen Oszillatoreigenenergien  $\hbar\omega (N + \frac{3}{2})$ . In der vorliegenden Rechnung wird mit  $\hbar\omega=20$  gerechnet. Die Energie hängt dann von 4 Sammel-Ein-Teilchen-Quantenzahlen ab. In einer solchen Sammelquantenzahl sind alle Quantenzahlen zusammengefasst, die zur Beschreibung des Teilchens nötig sind.

```
QZList = Import["av18_E100900_He4_eMax02_hwHO020.ccbas", "Table"];
```

```
Do[EE[{t, u, v, w}] = 0, {t, 1, 40}, {u, 1, 40}, {v, 1, 40}, {w, 1, 40}];
```

```
Do[EE[{QZList[{t, 1}], QZList[{u, 1}], QZList[{v, 1}], QZList[{w, 1}]}] =
  20 (QZList[{t, 2}] + QZList[{u, 2}] + QZList[{v, 2}] + QZList[{w, 2}] + 6),
  {t, 3, 42}, {u, 3, 42}, {v, 3, 42}, {w, 3, 42}];
```

Die spezielle Form dieses letzten Befehls liegt an der Anordnung der Daten in der eingelesenen Datei. Auf der linken Seite des Gleichheitszeichens werden die vier Sammelindizes für die Ein-Teilchenquantenzahlen mit dem Label "EE" für Energie gespeichert und der Summe der zugehörigen Ein-Teilchenenergien zugewiesen.

## Generieren aller möglichen Vier-Teilchen-Zustände

In der folgenden Zelle werden alle möglichen Bra- bzw. Ket-Quantenzahlen generiert. Dabei ist durch die Funktion "Subsets" bereits berücksichtigt, dass keine Quantenzahl doppelt vorkommen kann, da sonst später auf Grund des fermionischen Systems sofort Null resultieren würde. Die Listen mit je 4 Quantenzahlen werden in den Variablen s[i] gespeichert. Will man eine Einschränkung des Hilbertraums bezüglich maximaler Anregungsenergien, wie in einigen Rechnungen in Abschnitt 4 gemacht, müsste man dies an dieser Stelle tun.

```
list78 = Subsets[Table[i, {i, 40}], {4}];
```

```
Do[s[i] = list78[[i]], {i, Length[list78]}];
```

## Anwendung der Slater-Rules zur Rückführung der Vier-Teilchenmatrixelemente auf die relevanten Zwei-Teilchen-Matrixelemente

Ziel dieses Abschnitts ist die Programmierung eines Moduls zur Berechnung von Matrixelementen für  $^4\text{He}$ . Dabei müssen die in Abschnitt 1 der vorliegenden Arbeit präsentierten "Slater-Rules" verwendet werden. Daher muss man die einzelnen Fälle, also 0p-0h-Anregung, 1p-1h-Anregung (hier Case2 genannt), 2p-2h-Anregung (hier Case3 genannt) und höhere Anregungen unterscheiden:

### 2p-2h-Anregung (Case3)

Übergeben werden müssen dem Modul die Bra- und Ket-Quantenzahlen. Als Rückgabe erhält man das zugehörige Zweiteilchenmatrixelement. Die einzelnen Schritte sind im Modul erklärt

```
Case3[{a1_, b1_, c1_, d1_}, {a2_, b2_, c2_, d2_}] :=
Module[{BraList, KetList, CheckListBra, CheckListKet, Prob1Bra,
  Prob2Bra, Prob1Ket, Prob2Ket, KetListNeu1, sign, sign1, sign3, sign4, x,
  CheckList1Ket, CheckList1Bra, KetListNeu2, BraListNeu2, KetListNeu3},

  (*Speichere zunächst die übergebenen Bra- und Ket-Quantenzahlen in zwei Listen*)
  BraList = {a1, b1, c1, d1};
  KetList = {a2, b2, c2, d2};

  (*Ermittlung der Stellen in Bra und Ket an denen die Quantenzahlen stehen,
  die in der jeweils anderen Liste nicht vorkommen*)
```

```

CheckListKet = Table[MemberQ[BraList, KetList[[i]]], {i, Length[KetList]};
CheckListBra = Table[MemberQ[KetList, BraList[[i]]], {i, Length[BraList]};

(*Herausgreifen der ersten der oben ermittelten Stellen*)
ProblBra = Position[CheckListBra, False][[1, 1]];
ProblKet = Position[CheckListKet, False][[1, 1]];

(*Vorzeichendefinition für die folgende Vertauschung*)
If[ProblBra == ProblKet, sign = 1, sign = -1];

(*Vertauschung der Quantenzahlen im Ket, so dass eine der Quantenzahlen
die mit dem Bra nicht übereinstimmen an der gleichen Stelle steht*)
KetListNeu1 = ReplacePart[KetList,
  {ProblBra → KetList[[ProblKet]], ProblKet → KetList[[ProblBra]]}];

(*Vertauschung der Quantenzahlen die im letzten Schritt in Bra und Ket an die
gleiche Stelle gerückt wurden an Position 1. Da hierfür in Bra und Ket gleich
viele Vertauschungen nötig sind, ergibt dies kein zusätzliches Vorzeichen.*)
KetListNeu2 = ReplacePart[KetListNeu1,
  {1 → KetListNeu1[[ProblBra]], ProblBra → KetListNeu1[[1]]}];
BraListNeu2 = ReplacePart[BraList, {1 → BraList[[ProblBra]],
  ProblBra → BraList[[1]]}];

(*In KetListNeu2 und BraListNeu2 steht nun die
eine der beiden "Problemquantenzahlen" an der ersten Stelle,
daher nimmt man für die zweite Vertauschung die QZ die an der
Stelle steht an der "False" das zweite mal steht.*)

(*Es folgt das gleiche Prozedere wie oben: Checkliste erstellen,
Stelle der "Problemquantenzahl" ermitteln,
Vorzeichen definieren, Vertauschung durchführen*)

CheckList1Ket =
Table[MemberQ[BraList, KetListNeu2[[i]]], {i, Length[KetListNeu2]};
CheckList1Bra = Table[MemberQ[KetListNeu2, BraList[[i]]], {i, Length[BraList]};

Prob2Bra = Position[CheckList1Bra, False][[2, 1]];
Prob2Ket = Position[CheckList1Ket, False][[2, 1]];

If[Prob2Bra == Prob2Ket, sign1 = 1, sign1 = -1];

KetListNeu3 = ReplacePart[KetListNeu2,
  {Prob2Bra → KetListNeu2[[Prob2Ket]], Prob2Ket → KetListNeu2[[Prob2Bra]]}];

(*Um das richtige Vorzeichen für den Rückgabewert x zu gernerieren,
müssen nun noch die Reihenfolgen der beiden
übereinstimmenden Quantenzahlen gecheckt werden*)
sign3 = Signature[Delete[KetListNeu3, {{1}, {Prob2Bra}}]];
sign4 = Signature[Delete[BraListNeu2, {{1}, {Prob2Bra}}]];

x = sign sign1 sign3 sign4 f[BraListNeu2[[1]],
  BraListNeu2[[Prob2Bra]], KetListNeu3[[1]], KetListNeu3[[Prob2Bra]]];

Return[x];
]

```

## 1p-1h-Anregung (Case2)

Es müssen hier wieder die Bra- und Ket-Quantenzahlen übergeben werden. Die Rückgabe besteht hier aus einer Summe der Matrixelemente die beitragen.

```
Case2[{a1_, b1_, c1_, d1_}, {a2_, b2_, c2_, d2_}] :=
Module[{x, BraList, BraListNeu, KetList, KetListNeu, PositionList,
  checklistBra, checklistKet, positionBra, positionKet, sign, sign1, sign2},

(*Speichern der Bra- und Ket-Quantenzahlen in entsprechenden Listen*)
BraList = {a1, b1, c1, d1};
KetList = {a2, b2, c2, d2};

(*Ermittlung der Stellen in Bra und Ket an denen die Quantenzahlen stehen,
durch die sich Bra und Ket unterscheiden*)
checklistBra = Table[MemberQ[KetList, BraList[[i]]], {i, Length[BraList]}];
checklistKet = Table[MemberQ[BraList, KetList[[i]]], {i, Length[KetList]}];
positionBra = Position[checklistBra, False][[1, 1]];
positionKet = Position[checklistKet, False][[1, 1]];

(*Explizites Vertauschen der "Problemquantenzahl" im Ket,
so dass sie an der gleichen Stelle steht wie die "Problemquantenzahl" im Bra.*)
KetListNeu = ReplacePart[KetList,
  {positionBra -> KetList[[positionKet]], positionKet -> KetList[[positionBra]]}];

(*Definition des dabei entstehenden Vorzeichens*)
If[positionBra == positionKet, sign = 1, sign = -1];

(*Ermittlung des zusätzlichen Vorzeichens, das sich durch die
Reihenfolgen der gleichen Quantenzahlen in Bra und Ket ergibt*)
KetListNeu = Drop[KetListNeu, {positionBra}];
BraListNeu = Drop[BraList, {positionBra}];

sign1 = Signature[KetListNeu];
sign2 = Signature[BraListNeu];

(*Rückgabe des Matrixelements*)
x = Sum[sign sign1 sign2
  f[BraList[[positionBra]], m, KetList[[positionKet]], m], {m, KetListNeu}];

Return[x]
]
```

## Modul zur Berechnung der Matrixelemente

Dieses Modul entscheidet nun welche der 4 verschiedenen Fälle vorliegen. Entweder alle Quantenzahlen stimmen überein, dann wird im Modul Case1 ausgeführt. Unterscheiden sich Bra und Ket durch zwei Quantenzahlen, wird das Modul für Case2 angewendet und analog für Case3. Unterscheiden sich Bra und Ket durch mehr als 2 Quantenzahlen, resultiert Null. Dies liegt daran, dass es sich bei  $V_{NN}$  um eine Zweiteilchenwechselwirkung handelt, was auch schon in Abschnitt 1 dieser Arbeit angesprochen wurde.

```

EW[{a1_, b1_, c1_, d1_}, {a2_, b2_, c2_, d2_}] :=
Module[{list1, list2, caselist1, caselist2, n, x = 0},

  (*Speichern der Bra- und Ket-Quantenzahlen in entsprechenden Listen*)
  list1 = {a1, b1, c1, d1}; (*Liste Bra-QZ*)
  list2 = {a2, b2, c2, d2}; (*Liste Ket-QZ*)

  (*Ermittlung der Zahl n der
  Quantenzahlen durch die sich Bra und Ket unterscheiden*)
  caselist2 = Table[MemberQ[list1, list2[[i]]], {i, Length[list2]}];
  n = Count[caselist2, False];
  caselist1 = Table[MemberQ[list2, list1[[i]]], {i, Length[list1]}];

  (*Case1 → Erwartungswert*)
  (*gleiche Elemente und gleiche Signatur → kein Minus*)
  If[n == 0 && Signature[list1] == Signature[list2],
    x = 1/2 Sum[f[a, b, a, b], {a, list1}, {b, list1}];
  (*gleiche Elemente aber unterschiedliche Signatur → Minus*)
  If[n == 0 && Signature[list1] == -Signature[list2],
    x = -1/2 Sum[f[a, b, a, b], {a, list1}, {b, list1}];

  (*Case 2 → EinTeilchenloch-Anregung*)
  If[n == 1, x = Case2[{a1, b1, c1, d1}, {a2, b2, c2, d2}]];

  (*Case 3 → ZweiTeilchenLochAnregung*)
  If[n == 2, x = Case3[{a1, b1, c1, d1}, {a2, b2, c2, d2}]];

  (*Easiest Case,
  ist n>2 resultiert wie bereits erklärt Null*)
  If[n > 2, x = 0];

  Return[x]
]

```

## Berechnung der Energiekorrekturen bis in beliebig hohe Ordnung

Definition der ersten beiden Energiekorrekturen:

Die nullte Korrektur ist einfach die ungestörte Oszillator Energie,

die erste der Erwartungswert des Störhamiltonians  $H_1$  im ungestörten Grundzustand

Man kann sie so einfach angeben, da hier noch keine Zustandkorrekturen nötig sind.

```

Korrektur[0] = EE[s[1]];
Korrektur[1] = EW[s[1], s[1]] - EE[s[1]];

```

Um nun die höheren Energiekorrekturen zu berechnen benutzt man die Formel die in Abschnitt 2 der vorliegenden Arbeit hergeleitet wurde. Im folgenden Modul wird die Formel genau dazu verwendet. Es kann alle Koeffizienten der nächsthöheren Ordnung berechnen, wenn man die Koeffizienten der vorherigen kennt. Die Koeffizienten  $\langle E_m^{(0)} | E_0^{(j)} \rangle$  sind jeweils in den Listen CList[i] jeweils für die ite Ordnung angegeben, die Einträge in den

Listen sind dann mit m durchnummeriert.

Allerdings funktioniert die benutzte Formel nur für  $m \neq 0$ , also nicht für den ersten Koeffizienten in den Listen CList[i]! Der erste Eintrag in allen Listen ausser CList[0] ist jedoch immer null, sodass er einfach von Hand hinzugefügt werden kann.

Die Liste CList[0] ist einfach dadurch gegeben, dass an erster Stelle als Koeffizient eine 1 und sonst überall Nullen stehen. Dies kann man sich anhand der Definition der Koeffizienten klar machen.

```

CList[0] = Flatten[{1, Table[0, {i, Length[list78] - 1}]}];
CNextOrderNeu[p_] := Module[
  {α = Length[CList[0]], listpart1, listpart1corr, listpart2, listpart3, finallist},

  listpart1 = {0};
  Do[AppendTo[listpart1, Sum[If[CList[p - 1][[i]] ≠ 0,
    EW[s[m], s[i]] CList[p - 1][[i]], 0], {i, 1, α}], {m, 2, α}];

  (*Hier muss nun auf Grund des Tricks der Addition und
  Subtraktion des harmonischen Oszillatorpotentials im Hamiltonian
  dies wie in Abschnitt 2 beschrieben korrigiert werden*)
  listpart1corr = {0};
  Do[AppendTo[listpart1corr, listpart1[[i]] - EE[s[i]] CList[p - 1][[i]], {i, 2, α}];

  listpart2 = {0};
  Do[
  AppendTo[listpart2, Sum[Korrektur[j] CList[p - j][[i]], {j, 1, p - 1}], {i, 2, α}];

  listpart3 = listpart1corr - listpart2;

  finallist = {0};
  CList[p] =
  Do[AppendTo[finallist, listpart3[[i]] / (EE[s[1]] - EE[s[i]]), {i, 2, α}];

  Return[finallist]
]

```

Dem folgenden Modul muss nur die gewünschte Ordnung übergeben werden, und es berechnet die Energiekorrekturen bis zu dieser Ordnung. Es verwendet nur die in Abschnitt 2 hergeleitete Formel.

```

g[gewünschteOrdnung_] := Module[{},
  Do[
    {CList[j] = CNextOrderNeu[j],
    Korrektur[j + 1] = Sum[EW[s[1], s[m]] CList[j][[m]], {m, 1, Length[CList[j]}]},
    {j, 1, gewünschteOrdnung - 1}];
]

```

```
g[(*gewünschte Ordnung hier einsetzen*)]
```

Hier werden abschließend die Energiekorrekturen angezeigt und können durch Entfernen des auskommentierten Teils in einer Datei gespeichert werden.

```

KorrekturList = Table[Korrektur[i], {i, 0, 30}]
(*>>"Korrekturen He4 Emax2 2p2h.txt"*)

```

# Modul zur Berechnung der Padé-Approximanten

Das folgende Modul berechnet die Padé-Approximanten als Funktion von  $z$ , wenn man die nötigen Energiekorrekturen aus der Störungsrechnung vorgibt. Soll der Approximanten  $[M/L]$  berechnet werden müssen die ersten  $M+L$  Energiekorrekturen bekannt sein. Im Modul wird die in Gleichung (66) gegebene Formel zur Berechnung der Approximanten implementiert. Die Rückgabe besteht aus dem Padé-Approximanten. Um die physikalische Information über die Grundzustandsenergie zu erhalten, muss dieser bei  $z=1$  ausgewertet werden.

```
Padé[L_, M_, z_] := Module[{KoeffMatrix, NennerList, Nenner, ZählerList, Zähler},

  KoeffMatrix = Table[Array[Korrektur, M + 1, L - M + i], {i, M}];
  (*Print[KoeffMatrix];*)
  ZählerList = Append[KoeffMatrix,
    Table[Sum[Korrektur[j] z^(M + j - s), {j, 0, L - M + s}], {s, 0, M}]];
  (*Print[ZählerList];*)
  Zähler = Det[ZählerList];

  NennerList = Append[KoeffMatrix, Reverse[Table[z^m, {m, 0, M}]]];
  (*Print[NennerList];*)
  Nenner = Det[NennerList];

  Return[Zähler / Nenner]
]
```



## Literatur

- [1] Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/2*, 6. Auflage (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New-York, 2006)
- [2] Robert Roth, *Skript Theoretische Kernphysik*, Institut für Kernphysik, TU Darmstadt, WS 2006/07
- [3] Attila Szabo, Neil S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, (Dover Publications, Mineola, New York, 1996)
- [4] Keith A. Brueckner, *Advances in Theoretical Physics Volume 1*, (Academic Press, 1965)
- [5] Baker, Graves-Morris, *Encyclopedia of Mathematics - Padé Approximants 2nd edition*, (Cambridge University Press, 1996)
- [6] W. Pauli, Phys. Rev. 58, 716-722 (1940)
- [7] P. Navratil, J. P. Vary, and B. R. Barrett, Phys. Rev. **C62**, 054311 (2000)
- [8] R. Roth, T. Neff, H. Hergert, H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A745** (2004)
- [9] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, and J. Schnack, Nucl. Phys. **A632**, 61 (1998)
- [10] T. Neff and H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A713**, 311 (2003)
- [11] R. Roth, H. Hergert, P. Papakonstantinou, T. Neff, H. Feldmeier, Phys. Rev. **C 72**, 034002 (2005)



## **Danksagung**

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Professor Dr. Robert Roth für die Überlassung dieses spannenden Themas sowie die hervorragende Betreuung und Beantwortung der zahlreichen Fragen während der Anfertigung dieser Arbeit bedanken.

Außerdem geht mein Dank an die gesamte TNP-Gruppe für die freundliche Aufnahme. Besonderer Dank geht an Dr. Heiko Hergert für das Korrekturlesen dieser Arbeit und die Hilfe bei diversen Computer- und Physikproblemen.

Danke auch an alle Mitinsassen des Büros im 5. Stock für die vielen physikalischen und außerphysikalischen Diskussionen, sowie an die Klimaanlage.

Schließlich danke ich meinen Eltern Elke und Johannes Langhammer für die Unterstützung und Motivation während meines Studium.



Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen Hilfsmittel, als die im Literaturverzeichnis angegebenen, verwendet habe.

---

Ort

Datum

Unterschrift