

Bachelor Thesis

**Optimierung von UCOM-Korrelatoren für das chirale
N³LO Potential**

Florian Wagner

Betreut von Prof. Dr. Robert Roth

November 2008

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Methode der unitären Korrelatoren	3
2.1	Zentralkorrelator	4
2.2	Tensorkorrelator	5
2.3	Clusterentwicklung	7
3	Bestimmung der Korrelationsfunktionen $R_{\pm}(r), \vartheta(r)$	9
3.1	Energieminimierung im Zweiteilchenraum	10
3.1.1	Matrixelemente der Korrelatoren in harmonischer Oszillatordarstellung	10
3.1.2	Matrixelemente der korrelierten Wechselwirkung	12
3.1.3	Matrixelemente der korrelierten kinetischen Energie	15
4	Korrelatoroptimierung für das Argonne V18 Potential	21
4.1	Das Argonne V18 Potential	21
4.2	Ergebnisse der Energieminimierung	21
4.3	Vergleich mit früheren Optimierungen	26
5	Korrelatoroptimierung für das chirale N3LO Potential	29
5.1	Das N3LO Potential	29
5.2	Ergebnisse der Energieminimierung	30
6	Ausblick: No-Core Schalenmodell für ${}^3\text{H}$ und ${}^4\text{He}$	37
7	Zusammenfassung	39
A	Mathematica-Code	41

1 Einleitung

Um in der theoretischen Kernphysik Eigenschaften von Atomkernen, wie zum Beispiel Bindungsenergien und Dichteverteilungen bestimmen und vorhersagen zu können, muss man sich mit zwei Fragestellungen auseinandersetzen:

- Wie sieht die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen aus?
- Wie löst man das quantenmechanische Vielteilchenproblem?

Die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung würde man idealerweise aus der Quantenchromodynamik (QCD) herleiten. Nach dieser Theorie bestehen die Nukleonen aus 3 Quarks, deren zugrundeliegende Wechselwirkung die starke Wechselwirkung ist. Diese koppelt an die Farbladung der Quarks. Da das Nukleon als gebundener Zustand von 3 Quarks farbneutral ist, gibt es keine langreichweitige Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen. Erst bei sehr kurzem Abstand wird durch gegenseitige Polarisierung eine Wechselwirkung induziert. Vergleichbar ist die Situation mit der zweier neutraler Atome, die keine langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung aufweisen, aber bei kurzen Abständen durch induzierte elektrische Dipolmomente wechselwirken, was man als van-der-Waals-Wechselwirkung bezeichnet [1].

Da die parameterfreie Herleitung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung aus der QCD derzeit noch nicht möglich ist, konstruiert man sogenannte realistische Potentiale. Dabei stützt man sich auf fundamentale Symmetrieeigenschaften, wie z.B. Hermitizität, Translations-, Rotations- und Galilei-Invarianz sowie experimentelle Daten z.B. aus Streuexperimenten und Deutroneigenschaften (Bindungsenergie, rms-Radius, Quadrupolmoment). Aufgrund der Symmetrien lassen sich die für die Operatorstruktur der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung in Frage kommenden Operatoren auf eine relativ kleine Zahl beschränken. Diese werden dann mit Radialfunktionen versehen, deren freie Parameter durch Anpassung an die oben genannten experimentellen Daten bestimmt werden [1].

Mit den verfügbaren experimentellen Daten ist eine eindeutige Konstruktion eines realistischen Potentials nicht möglich, weshalb es viele verschiedene Potentiale gibt (z.B. Argonne V18 [7], CD Bonn, Nijmegen I/II), die trotz Unterschieden in der Struktur die Streuphasen und Deutroneigenschaften mit hoher Genauigkeit reproduzieren [1].

Eine alternative, theoretisch besser fundierte Methode, die NN-Wechselwirkung zu bestimmen, bietet die chirale effektive Feldtheorie (χ EFT) [8, 9], welche auf der spontan gebrochenen chiralen Symmetrie der QCD bei kleinen Energien und Impulsen basiert. Ausgehend von einem effektivem chiralen Lagrangian, welcher symmetriebrechende Anteile enthält, lässt sich die Wechselwirkung bestimmen. Das N³LO Potential [8, 9], das in Kapitel 5 behandelt wird, entstammt der EFT.

Das quantenmechanische Vielteilchenproblem „exakt“ numerisch zu lösen ist sehr rechenaufwendig und die dafür verwendeten, sogenannten Ab-initio-Methoden (z.B. No-Core-Schalenmodell [11] oder Green's Function Monte Carlo [12]) können mit den heutigen Computern nur für leichte Kerne mit Massenzahl

$A \leq 16$ angewendet werden. Um auch schwerere Kerne berechnen zu können hat man verschiedene Näherungsverfahren entwickelt. Zu diesen Näherungen gehören die Mean-Field-Verfahren (z.B. Hartree-Fock [1]), bei denen ein einzelnes Nukleon im mittleren Potential der anderen Nukleonen betrachtet wird. Dabei wird der Vielteilchenhilbertraum auf einen Modellraum eingeschränkt, der durch einen Versuchszustand mit wenigen Freiheitsgraden, in der Regel eine Slaterdeterminante aus Einteilchenzuständen, aufgespannt wird. Dabei tritt folgendes Problem auf: Die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung erzeugt kurzreichweitige Korrelationen, die von einer einzigen Slaterdeterminante nicht beschrieben werden können. Eine Lösung bietet die Methode der unitären Korrelatoren (Unitary Correlation Operator Method, UCOM) [2, 3, 4, 5]. Bei dieser Methode werden die kurzreichweitigen Korrelationen durch zustandsunabhängige unitäre Transformationen behandelt. Diese können dabei je nach Problemstellung entweder auf den Versuchszustand oder auf den betrachteten Operator, insbesondere den Hamiltonoperator, angewendet werden.

In dieser Arbeit wird zunächst in Kapitel 2 ein kurzer Überblick über die Methode der unitären Korrelatoren gegeben. In Kapitel 3 wird beschrieben, wie die Korrelationsfunktionen $R_{\pm}(r)$ und $\vartheta(r)$, welche die unitären Transformationen charakterisieren, bestimmt werden können. Dazu werden Ausdrücke für korrelierte Zweiteilchenmatrixelemente des Hamiltonoperators in harmonischer Oszillatordarstellung hergeleitet. In Kapitel 4 werden die optimalen Korrelationsfunktionen für das Argonne V18 Potential bestimmt. Schließlich erfolgt in Kapitel 5 die Optimierung der Korrelationsfunktionen für das chirale N3L0 Potential.

2 Methode der unitären Korrelatoren

Der folgende Überblick stützt sich auf [4, 5, 2, 3].

Bei der Methode der unitären Korrelatoren werden kurzreichweitige Korrelationen, die nicht durch eine einzige Slaterdeterminante beschrieben werden können, durch zustandsunabhängige unitäre Transformationen behandelt. Aus einem Anfangszustand $|\Psi\rangle$ erzeugt man dabei durch Transformation den korrelierten Zustand $|\tilde{\Psi}\rangle$, der die kurzreichweitigen Korrelationen enthält. Aufgrund der komplexen Natur der Transformation im Vielteilchenraum kann dieser nicht mehr durch eine einfache Slaterdeterminante dargestellt werden:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \mathbf{C} |\Psi\rangle . \quad (1)$$

\mathbf{C} ist hierbei der unitäre Korrelationsoperator, für den gilt: $\mathbf{C}^\dagger \mathbf{C} = \mathbf{I}$.

Aufgrund der Unitarität des Korrelators \mathbf{C} ist die Berechnung von Matrixelementen eines Operators \mathbf{O} in den korrelierten Zuständen $|\tilde{\Psi}\rangle$ äquivalent zur Berechnung der Matrixelemente eines korrelierten effektiven Operators $\tilde{\mathbf{O}}$ in den unkorrelierten Zuständen $|\Psi\rangle$:

$$\langle \tilde{\Psi}_1 | \mathbf{O} | \tilde{\Psi}_2 \rangle = \langle \Psi_1 | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C} | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1 | \mathbf{C}^{-1} \mathbf{O} \mathbf{C} | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1 | \tilde{\mathbf{O}} | \Psi_2 \rangle . \quad (2)$$

Man unterscheidet zwischen zwei verschiedenen Korrelationsarten: den Zentralkorrelationen, die durch die kurzreichweitige Abstoßung der nuklearen Wechselwirkung entstehen und den durch die Tensorkraft der Wechselwirkung erzeugten Tensorkorrelationen. Die Tensorkorrelationen enthalten sowohl kurzreichweitige als auch langreichweitige Anteile, wobei hier nur die kurzreichweitigen Anteile behandelt werden.

Gemäß dieser Unterscheidung spaltet man den Korrelationsoperator \mathbf{C} in zwei Teile auf, den Tensorkorrelator \mathbf{C}_Ω und den Zentralkorrelator \mathbf{C}_r :

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_\Omega \mathbf{C}_r . \quad (3)$$

Als unitäre Operatoren kann man die Korrelatoren als Exponentiale hermitescher Generatoren \mathbf{G} schreiben:

$$\mathbf{C}_r = e^{-i\mathbf{G}_r} , \quad \mathbf{C}_\Omega = e^{-i\mathbf{G}_\Omega} \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}_r^\dagger = \mathbf{G}_r , \quad \mathbf{G}_\Omega^\dagger = \mathbf{G}_\Omega . \quad (4)$$

Da hier nur Zweiteilchenkorrelationen behandelt werden sollen, kann man die hermiteschen Generatoren \mathbf{G}_r und \mathbf{G}_Ω durch Zweiteilchenoperatoren $\mathbf{g}_r^{(mn)}$ und $\mathbf{g}_\Omega^{(mn)}$ darstellen:

$$\mathbf{G}_r = \sum_{m < n} \mathbf{g}_r^{(mn)} , \quad (5)$$

$$\mathbf{G}_\Omega = \sum_{m < n} \mathbf{g}_\Omega^{(mn)}. \quad (6)$$

2.1 Zentralkorrelator

Im Folgenden werden Korrelatoren im Zweiteilchenraum betrachtet. Um den Unterschied zu den allgemeinen Korrelationen im Vielteilchenraum deutlich zu machen, werden alle Zweiteilchenoperatoren mit kleinen Buchstaben bezeichnet. Ursprung der Zentralkorrelationen ist der stark abstoßende Core der nuklearen Wechselwirkung. Dieser bewirkt ein Loch der Relativwellenfunktion zweier Nukleonen bei kleinen Abständen. Aufgabe des Zentralkorrelators ist es daher, zwei Nukleonen in radiale Richtung voneinander zu entfernen, falls deren Abstand zu klein ist.

Generator radialer Translationen ist die Projektion des Relativimpulses $\vec{\mathbf{q}} = \frac{1}{2}(\vec{\mathbf{p}}_1 - \vec{\mathbf{p}}_2)$ auf die Relativkoordinate $\vec{\mathbf{r}} = \vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2$:

$$\mathbf{q}_r = \frac{1}{2}(\vec{\mathbf{q}} \cdot \frac{\vec{\mathbf{r}}}{r} + \frac{\vec{\mathbf{r}}}{r} \cdot \vec{\mathbf{q}}). \quad (7)$$

Die Abstandsabhängigkeit der radialen Verschiebung wird durch eine Operatorfunktion $s(\mathbf{r})$ beschrieben. Diese erzeugt große Verschiebungen für kleine Abstände und verschwindet für große Distanzen. Damit erhält man den Generator des Zentralkorrelators im Zweiteilchenraum [2]:

$$\mathbf{g}_r = \frac{1}{2}(s(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{q}_r + \mathbf{q}_r \cdot s(\mathbf{r})) = s(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{q}_r + \frac{1}{2}[\mathbf{q}_r, s(\mathbf{r})] = s(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{q}_r - \frac{i}{2} \left(\frac{\partial s}{\partial r}(\mathbf{r}) \right). \quad (8)$$

Wendet man den sich daraus ergebenden Zentralkorrelator $\mathbf{c}_r = e^{-i\mathbf{g}_r}$ auf den Relativteil $|\varphi\rangle$ des Zweiteilchenzustandes $|\Phi\rangle = |\phi_{cm}\rangle \otimes |\varphi\rangle$ im Zweiteilchenraum an, so ergibt sich in Ortsdarstellung folgender Ausdruck [2]:

$$\langle \vec{\mathbf{r}} | \mathbf{c}_r | \varphi \rangle = \frac{1}{r\sqrt{s(r)}} e^{(-s(r)\frac{\partial}{\partial r})} r \sqrt{s(r)} \langle \vec{\mathbf{r}} | \varphi \rangle. \quad (9)$$

Transformiert man auf eine neue Koordinate y mit $y = Y(r)$ und $r = R(y)$, so dass $s(r)\frac{\partial}{\partial r} \rightarrow \frac{\partial}{\partial y}$, so beschreibt die Exponentialfunktion eine Translation um -1 in der neuen Koordinate y . Für den korrelierten Zustand erhält man damit [2]:

$$\langle R(y) \frac{\vec{\mathbf{r}}}{r} | \mathbf{c}_r | \varphi \rangle = \frac{R(y-1)}{R(y)} \sqrt{\frac{s(R(y-1))}{s(R(y))}} \langle R(y-1) \frac{\vec{\mathbf{r}}}{r} | \varphi \rangle. \quad (10)$$

Durch die Definition der Korrelationsfunktionen $R_\mp = R(Y(r) \mp 1)$ und aus der Beziehung $R'_\pm(r) = \frac{s(R_\pm(r))}{s(r)}$, die aus den Eigenschaften der Transformation $r \rightarrow y$ folgt, vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\langle \vec{r} | \mathbf{c}_r | \varphi \rangle = \frac{R_-(r)}{r} \sqrt{\frac{\partial R_-(r)}{\partial r}} \langle R_-(r) \frac{\vec{r}}{r} | \varphi \rangle . \quad (11)$$

Definiert man $\mathcal{R}_\pm(r) = \frac{R_\pm(r)}{r} \sqrt{\frac{\partial R_\pm(r)}{\partial r}}$, so ergibt sich schließlich für die Ortsdarstellung der zentralkorrelierten Zustände [2]:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \mathbf{c}_r | \varphi \rangle &= \mathcal{R}_-(r) \langle R_-(r) \frac{\vec{r}}{r} | \varphi \rangle , \\ \langle \vec{r} | \mathbf{c}_r^\dagger | \varphi \rangle &= \mathcal{R}_+(r) \langle R_+(r) \frac{\vec{r}}{r} | \varphi \rangle . \end{aligned} \quad (12)$$

Durch hermitesches adjungieren erhält man daraus:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \mathbf{c}_r^\dagger | \vec{r} \rangle &= \mathcal{R}_-(r) \langle \varphi | R_-(r) \frac{\vec{r}}{r} \rangle , \\ \langle \varphi | \mathbf{c}_r | \vec{r} \rangle &= \mathcal{R}_+(r) \langle \varphi | R_+(r) \frac{\vec{r}}{r} \rangle . \end{aligned} \quad (13)$$

Zwischen den Korrelationsfunktionen $R_\pm(r)$ und der Verschiebungsfunktion $s(r)$ besteht der Zusammenhang:

$$\int_r^{R_\pm(r)} \frac{d\xi}{s(\xi)} = \pm 1 . \quad (14)$$

Eine anschauliche Bedeutung der Korrelationsfunktionen erhält man durch Taylorentwicklung von $R_\pm(r) = R(Y(r) \pm 1)$ um y bis zur 1. Ordnung:

$$R_\pm(r) \approx r \pm s(r) . \quad (15)$$

Haben die Teilchen im unkorrelierten Zustand einen Abstand r , so haben sie nach Anwendung des Zentralkorrelators \mathbf{c}_r einen Abstand von $r \pm s(r)$.

2.2 Tensorkorrelator

Tensorkorrelationen werden durch die Tensorkraft der nuklearen Wechselwirkung erzeugt. Die Tensorwechselwirkungsenergie zwischen zwei Nukleonen hängt von den Spins beider Nukleonen und deren relativer räumlicher Orientierung ab. Für parallele Spins ist eine Ausrichtung entlang ihrer Verbindungsachse energetisch am Günstigsten, während für antiparallele Spins die Ausrichtung senkrecht zur Verbindungsachse die günstigere Variante ist. Die Aufgabe des Tensorkorrelators \mathbf{c}_Ω ist eine Verschiebung der Nukleonen senkrecht zu ihrer Verbindungsachse. Solche Verschiebungen werden durch den Winkelteil des Relativimpulses generiert:

$$\vec{q}_\Omega = \vec{q} - \frac{\vec{r}}{r} \mathbf{q}_r = \frac{1}{2r^2} (\vec{l} \times \vec{r} - \vec{r} \times \vec{l}) \quad (16)$$

Mit dem Bahndrehimpulsoperator $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{q}$.

Daraus wird der Generator \mathbf{g}_Ω des Tensorkorrelators bestimmt, wobei die Radialabhängigkeit analog zu $s(\mathbf{r})$ durch die Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(\mathbf{r})$ beschrieben wird:

$$\mathbf{g}_\Omega = \frac{3}{2}\vartheta(\mathbf{r})[(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{q}_\Omega)(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}) + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{q}_\Omega)] = \vartheta(\mathbf{r})\mathbf{s}_{12}(\vec{r}, \vec{q}_\Omega). \quad (17)$$

Wie der Zentralkorrelator, so wirkt auch der Tensorkorrelator \mathbf{c}_Ω nur auf den Relativteil eines Zweiteilchenzustandes. Der Schwerpunktanteil bleibt invariant.

Wir betrachten zunächst die nichtverschwindenden Matrixelemente des Tensoroperators $\mathbf{s}_{12}(\vec{r}, \vec{q}_\Omega)$ in LS-gekoppelten Zweiteilchenzuständen $|\phi(L, S)JT\rangle$. Die Projektionsquantenzahlen M und M_T haben keinen Einfluss auf die Matrixelemente und sind daher der Einfachheit halber unterdrückt.

$$\langle \phi(J \pm 1, 1)JT | \mathbf{s}_{12}(\vec{r}, \vec{q}_\Omega) | \phi(J \mp 1, 1)JT \rangle = \pm 3i\sqrt{J(J+1)}\vartheta(r). \quad (18)$$

Daraus kann man die Matrixelemente des Generators \mathbf{g}_Ω bestimmen:

$$\langle \phi(J \pm 1, 1)JT | -i\mathbf{g}_\Omega | \phi(J \mp 1, 1)JT \rangle = \pm \vartheta_J(r), \quad (19)$$

wobei folgende Definition verwendet wurde:

$$\vartheta_J(r) = 3\sqrt{J(J+1)}\vartheta(r). \quad (20)$$

Durch Bestimmung des Matrixexponentials erhält man dann die Matrixelemente des kompletten Tensorkorrelators \mathbf{c}_Ω , woraus man die tensorkorrelierten Zweiteilchenzustände konstruieren kann [5].

Zustände mit $L = J$ sind invariant unter Anwendung des Tensorkorrelators:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_\Omega |\phi(J, S)JT\rangle &= |\phi(J, S)JT\rangle, \\ \mathbf{c}_\Omega^\dagger |\phi(J, S)JT\rangle &= |\phi(J, S)JT\rangle. \end{aligned} \quad (21)$$

Nur Zustände mit $L = J \pm 1$ verändern sich bei Anwendung des Tensorkorrelators. Sie erhalten eine Beimischung eines Zustandes mit $L' = J \mp 1$:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_\Omega |\phi(J \pm 1, 1)JT\rangle &= \cos \vartheta_J(r) |\phi(J \pm 1, 1)JT\rangle \mp \sin \vartheta_J(r) |\phi(J \mp 1, 1)JT\rangle, \\ \mathbf{c}_\Omega^\dagger |\phi(J \pm 1, 1)JT\rangle &= \cos \vartheta_J(r) |\phi(J \pm 1, 1)JT\rangle \pm \sin \vartheta_J(r) |\phi(J \mp 1, 1)JT\rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

2.3 Clusterentwicklung

Bei dem Korrelationsoperator \mathbf{C} und somit auch bei allen korrelierten Operatoren $\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C}$ handelt es sich um Vielteilchenoperatoren. Diese lassen sich auch wie folgt darstellen [4]:

$$\tilde{\mathbf{O}} = \tilde{\mathbf{O}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{O}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{O}}^{[3]} + \dots \quad (23)$$

$\tilde{\mathbf{O}}^{[n]}$ ist hierbei ein irreduzibler n -Teilchenoperator. Gleichung (23) bezeichnet man als Clusterentwicklung. Handelt es sich beim Operator \mathbf{O} um einen k -Teilchenoperator, so ist k die niedrigste Ordnung in der Clusterentwicklung. Daraus folgt, dass bei der korrelierten Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung der erste Beitrag in der Clusterentwicklung ein irreduzibler Zweiteilchenoperator ist. Da die Verwendung aller in der Clusterentwicklung vorkommenden Operatoren oft zu hohem Rechenaufwand führt, verwendet man die Zweiteilchennäherung [4]:

$$\tilde{\mathbf{O}}^{C2} = \tilde{\mathbf{O}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{O}}^{[2]} \quad (24)$$

Diese Näherung ist gerechtfertigt für kleine Dichten des Systems und kurze Reichweiten der Korrelationen im Vergleich zum mittleren Teilchenabstand. Bei zu langreichweitigen Korrelationen ist daher eine Begrenzung der Reichweite erforderlich.

3 Bestimmung der Korrelationsfunktionen $R_{\pm}(r)$, $\vartheta(r)$

Um die korrelierten Zustände aus Anfangszuständen zu bestimmen, benötigt man die Korrelationsfunktionen $R_{\pm}(r)$ und $\vartheta(r)$. In dieser Arbeit werden die Korrelationsfunktionen mit der Methode der Energieminimierung im Zweiteilchenraum bestimmt [5]. Dabei verwendet man Parametrisierungen der Korrelationsfunktionen mit 3 oder 4 Parametern und variiert diese so, dass man ein Minimum der Energie für die korrelierten Zweiteilchenzustände erhält.

Die gängigen Variationsansätze für die Zentralkorrelationsfunktion sind [5]:

$$R_+^I(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta} \right)^\eta \exp \left[-\exp \left(\frac{r}{\beta} \right) \right], \quad (25)$$

$$R_+^{II}(r) = r + \alpha \left[1 - \exp \left(-\frac{r}{\gamma} \right) \right] \exp \left[-\exp \left(\frac{r}{\beta} \right) \right]. \quad (26)$$

Auch für die Tensorkorrelationsfunktionen gibt es zwei Parametrisierungen:

$$\vartheta^I(r) = \alpha \left(1 - \exp \left[-\left(\frac{r}{\gamma} \right) \right] \right) \exp \left[-\exp \left(\frac{r}{\beta} \right) \right], \quad (27)$$

$$\vartheta^{II}(r) = \alpha \left(1 - \exp \left[-\left(\frac{r}{\gamma} \right)^\eta \right] \right) \exp \left[-\left(\frac{r}{\beta} \right) \right]. \quad (28)$$

Die Parameter werden für jeden Spin-Isospin-Kanal separat bestimmt. In den beiden Kanälen mit $S = 0$ wirkt nur der Zentralkorrelator.

Im $S = 0, T = 0$ Kanal ist das Potential rein abstoßend. Um hier eine zu langreichweitige Korrelationsfunktion $R_+(r)$ zu verhindern, führt man den Reichweitenparameter I_{R_+} ein, der als Nebenbedingung bei der Variation auf einen konstanten Wert gesetzt wird [5]:

$$I_{R_+} = \int dr \cdot r^2 (R_+(r) - r). \quad (29)$$

Langreichweitige Korrelationen zeigen eine starke Abhängigkeit vom betrachteten Kern. Man möchte jedoch universelle, zustandsunabhängige Korrelatoren haben. Daher beschreibt man nur die zustandsunabhängigen, kurzreichweitigen Korrelationen durch die unitären Transformationen, während langreichweitige Korrelationen durch den jeweiligen Vielteilchenzustand beschrieben werden [2].

In den Kanälen mit $S = 1$ wirken sowohl der Zentralkorrelator als auch der Tensorkorrelator. Die Parameter der Korrelationsfunktionen $R_{\pm}(r)$ und $\vartheta(r)$ werden in diesen Kanälen gleichzeitig bestimmt. Die Tensorkorrelationen haben sowohl kurzreichweitige als auch langreichweitige Anteile. Um auch hier nur den kurzreichweitigen Teil zu berücksichtigen, verwendet man den Reichweitenparameter I_{ϑ} [5]:

$$I_{\vartheta} = \int dr \cdot r^2 \vartheta(r) . \quad (30)$$

3.1 Energieminimierung im Zweiteilchenraum

Als Versuchszustand für die Energieminimierung verwendet man beispielsweise eine Streulösung $\varphi_L(r) \sim r^L$ mit Energie $E = 0$ [5]. Alternativ dazu kann man auch harmonische Oszillatorfunktionen verwenden, was einen minimalen Unterschied in den resultierenden Korrelationsfunktionen zur Folge hat. In dieser Arbeit werden LS-gekoppelte Eigenzustände $|n(L, S) JM T M_T\rangle$ des sphärischen harmonischen Oszillators verwendet. Da alle im folgenden betrachteten Matrixelemente unabhängig von den Projektionsquantenzahlen M und M_T sind, werden diese weggelassen.

In Ortsdarstellung lauten die harmonische Oszillatorfunktionen:

$$\langle r(L, S) JT | n(L, S) JT \rangle = N_{nL} r^L e^{-\nu r^2} \mathcal{L}_n^{L+\frac{1}{2}}(2\nu r^2) \quad (31)$$

mit der Normierung

$$N_{nL} = \sqrt{\sqrt{\frac{2\nu^3}{\pi}} \frac{2^{n+2L+3} n! \nu^2}{(2n+2L+1)!!}} \quad \text{mit} \quad \nu = \frac{\mu\omega}{2\hbar} \quad (32)$$

und den generalisierten Laguerrepolynomen

$$\mathcal{L}_n^k(x) = \sum_{i=0}^n \binom{n+k}{n-i} \frac{(-x)^i}{i!} . \quad (33)$$

μ ist hierbei die reduzierte Masse und ω die Eigenfrequenz des harmonischen Oszillators.

Die Energie erhält man dann als Erwartungswert des Hamiltonoperators $\mathbf{h} = \mathbf{t} + \mathbf{v}$ in den korrelierten Zuständen:

$$E = \langle n(L, S) JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{h} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S) JT \rangle = \langle n(L, S) JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger (\mathbf{t} + \mathbf{v}) \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S) JT \rangle . \quad (34)$$

Nach einer Vorüberlegung zu den Matrixelementen der Korrelatoren in Kapitel 3.1.1 folgt die Bestimmung der diagonalen Matrixelemente des Potentials in Kapitel 3.1.2. Schließlich werden in Kapitel 3.1.3 die diagonalen Matrixelemente der kinetischen Energie bestimmt.

3.1.1 Matrixelemente der Korrelatoren in harmonischer Oszillatordarstellung

Um für die Energieminimierung die korrelierten Matrixelemente eines Potentials sowie der kinetischen Energie zu bestimmen, benötigt man die Matrixelemente der Korrelatoren:

$$\begin{aligned}
& \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(L', S)JT \rangle \\
&= \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r \int dr \cdot r^2 \sum_{L'' S'' J'' T''} |r(L'', S'')J''T''\rangle \langle r(L'', S'')J''T'' | n'(L', S)JT \rangle \\
&= \int dr \cdot r^2 \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | r(L', S)JT \rangle \langle r(L', S)JT | n'(L', S)JT \rangle \\
&= \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} | R_+(r)(L', S)JT \rangle \langle r(L', S)JT | n'(L', S)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{35}$$

Zunächst wird hier der Einsoperator in Ortsdarstellung hinter dem Zentralkorrelator \mathbf{c}_r eingeschoben. Die Transformation des Zentralkorrelators kann dann mit Hilfe von (12) bestimmt werden. Die Orthogonalität der Zustände für verschiedene Werte von L , S , J und T führt dazu, dass von der Summe über die Quantenzahlen L'' , S'' , J'' und T'' nur Zustände mit L' , S' , J' und T' übrig bleiben.

Der Tensorkorrelator \mathbf{C}_{Ω} liefert nur für $L' = J$ oder $L' = J \pm 1$ von Null verschiedene Matrixelemente.

Für $L' = J$ ergibt sich unter Verwendung von (22):

$$\langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(J, S)JT \rangle = \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle n(L, S)JT | R_+(r)(J, S)JT \rangle \langle r(J, S)JT | n'(J, S)JT \rangle . \tag{36}$$

Für $L' = J \pm 1$ folgt:

$$\begin{aligned}
& \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(J \pm 1, S)JT \rangle \\
&= \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle r(J \pm 1, S)JT | n'(J \pm 1, S)JT \rangle \\
&\quad \times \langle n(L, S)JT | \left\{ \cos \vartheta_J(R_+) |R_+(r)(J \pm 1, S)JT \rangle \mp \sin \vartheta_J(R_+) |R_+(r)(J \mp 1, S)JT \rangle \right\} .
\end{aligned} \tag{37}$$

Im Folgenden werden alle von Null verschiedenen Matrixelemente aufgelistet.

Zunächst betrachten wir die diagonalen Matrixelemente mit $L = L' = J$:

$$\langle n(J, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(J, S)JT \rangle = \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle n(J, S)JT | R_+(r)(J, S)JT \rangle \langle r(J, S)JT | n'(J, S)JT \rangle . \quad (38)$$

Die diagonalen Matrixelemente mit $L = L' = J + 1$ und $L = L' = J - 1$ lauten:

$$\begin{aligned} & \langle n(J + 1, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(J + 1, S)JT \rangle \\ &= \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle r(J + 1, S)JT | n'(J + 1, S)JT \rangle \cos \vartheta_J(R_+(r)) \langle n(J + 1, S)JT | R_+(r)(J + 1, S)JT \rangle , \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} & \langle n(J - 1, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(J - 1, S)JT \rangle \\ &= \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle r(J - 1, S)JT | n'(J - 1, S)JT \rangle \cos \vartheta_J(R_+(r)) \langle n(J - 1, S)JT | R_+(r)(J - 1, S)JT \rangle . \end{aligned} \quad (40)$$

Schließlich ergibt sich für die außerdiagonalen Matrixelemente mit $L = J \pm 1$ und $L' = J \mp 1$:

$$\begin{aligned} & \langle n(J + 1, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(J - 1, S)JT \rangle \\ &= \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle r(J - 1, S)JT | n'(J - 1, S)JT \rangle \sin \vartheta_J(R_+(r)) \langle n(J + 1, S)JT | R_+(r)(J + 1, S)JT \rangle , \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} & \langle n(J - 1, S)JT | \mathbf{c}_{\Omega} \mathbf{c}_r | n'(J + 1, S)JT \rangle \\ &= - \int dr \cdot r^2 \mathcal{R}_+(r) \langle r(J + 1, S)JT | n'(J + 1, S)JT \rangle \sin \vartheta_J(R_+(r)) \langle n(J - 1, S)JT | R_+(r)(J - 1, S)JT \rangle . \end{aligned} \quad (42)$$

3.1.2 Matrixelemente der korrelierten Wechselwirkung

Durch Einschleiben von Einsen in harmonischer Oszillatordarstellung vor und hinter dem Potential \mathbf{v} , lässt sich die Bestimmung von Matrixelementen der korrelierten Wechselwirkung auf die vorher bestimmten Matrixelemente der Korrelatoren zurückführen:

$$\begin{aligned}
& \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{v} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle \\
&= \sum_{n_1, L_1, S_1, J_1, T_1} \sum_{n_2, L_2, S_2, J_2, T_2} \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger | n_1(L_1, S_1)J_1T_1 \rangle \\
&\quad \times \langle n_1(L_1, S_1)J_1T_1 | \mathbf{v} | n_2(L_2, S_2)J_2T_2 \rangle \langle n_2(L_2, S_2)J_2T_2 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle \\
&= \sum_{n_1, L_1} \sum_{n_2, L_2} \langle n_1(L_1, S)JT | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle \\
&\quad \times \langle n_1(L_1, S)JT | \mathbf{v} | n_2(L_2, S)JT \rangle \langle n_2(L_2, S)JT | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{43}$$

Im Zweiteilchenraum können sowohl Spin S als auch Isospin T nur die Werte 0 oder 1 annehmen. Für die Energieminimierung wird in jedem Spin-Isospin-Kanal der Zustand mit dem niedrigst möglichen Bahndrehimpuls L verwendet. Da es sich bei den Nukleonen um Fermionen handelt, muss deren Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung sein. Eine antisymmetrische Gesamtwellenfunktion ergibt sich nur für ungerade $L + S + T$. Dadurch ist das niedrigste L für jeden ST -Kanal eindeutig bestimmt und nimmt die Werte 0 oder 1 an. Die möglichen Werte für J ergeben sich dann aus der für Drehimpulskopplung bekannten Beziehung, $|L - S| \leq J \leq L + S$.

In den beiden Kanälen mit $S = 0$ wirkt nur der Zentralkorrelator. Da dieser keine Beimischung eines anderen Bahndrehimpulses bewirkt, bleibt von den Summen über L_1 und L_2 aufgrund der Orthogonalität der Zustände jeweils nur der Bahndrehimpuls L übrig:

Betrachten wir zunächst den Kanal $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$, $T = 1$:

$$\begin{aligned}
& \langle n(0, 0)01 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{v} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 0)01 \rangle \\
&= \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(0, 0)01 | \mathbf{c}_r | n(0, 0)01 \rangle \langle n_2(0, 0)01 | \mathbf{c}_r | n(0, 0)01 \rangle \langle n_1(0, 0)01 | \mathbf{v} | n_2(0, 0)01 \rangle .
\end{aligned} \tag{44}$$

Für $L = 1$, $S = 0$, $J = 1$, $T = 0$ ergibt sich folgendes Matrixelement:

$$\begin{aligned}
& \langle n(1, 0)10 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{v} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 0)10 \rangle \\
&= \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(1, 0)10 | \mathbf{c}_r | n(1, 0)10 \rangle \langle n_2(1, 0)10 | \mathbf{c}_r | n(1, 0)10 \rangle \langle n_1(1, 0)10 | \mathbf{v} | n_2(1, 0)10 \rangle .
\end{aligned} \tag{45}$$

In dem Kanal mit $S = 1$ und $T = 0$ wirkt zusätzlich zum Zentralkorrelator noch der Tensorkorrelator. Dieser erzeugt je nach Wert von L eine Beimischung von $\Delta L = \pm 2$, weshalb von den Summen zwei Terme übrig bleiben.

Damit ergibt sich für die Quantenzahlen $L = 0$, $S = 1$, $J = 1$, $T = 0$ folgendes Matrixelement:

$$\begin{aligned}
& \langle n(0, 1)10 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{v} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 1)10 \rangle \\
&= \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(0, 1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 1)01 \rangle [\langle n_2(0, 1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 1)10 \rangle \langle n_1(0, 1)10 | \mathbf{v} | n_2(0, 1)10 \rangle \\
&\quad + \langle n_2(2, 1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 1)10 \rangle \langle n_1(0, 1)10 | \mathbf{v} | n_2(2, 1)10 \rangle] \quad (46) \\
&\quad + \langle n_1(2, 1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 1)10 \rangle [\langle n_2(0, 1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 1)10 \rangle \langle n_1(2, 1)10 | \mathbf{v} | n_2(0, 1)10 \rangle \\
&\quad + \langle n_2(2, 1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 1)10 \rangle \langle n_1(2, 1)10 | \mathbf{v} | n_2(2, 1)10 \rangle] .
\end{aligned}$$

Für $S = 1$, $T = 1$ ist $L = 1$ der niedrigste mögliche Bahndrehimpuls, der zu einer antisymmetrischen Gesamtwellenfunktion führt. Für den Gesamtdrehimpuls J ergeben sich damit die möglichen Werte $J = 0$, $J = 1$ und $J = 2$. Für $J = 0$ und $J = 1$ wirkt kein Tensorkorrelator. Für die Energieminimierung verwenden wir hier

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{9} \langle n(1, 1)01 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{h} \mathbf{c}_r | n(1, 1)01 \rangle + \frac{3}{9} \langle n(1, 1)11 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{h} \mathbf{c}_r | n(1, 1)11 \rangle \\
&\quad + \frac{5}{9} \langle n(1, 1)21 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{h} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle , \quad (47)
\end{aligned}$$

wobei die einzelnen Matrixelemente mit $2J + 1$ gewichtet wurden.

Kommen wir nun wieder zu den Matrixelementen des Potentials.

Die Matrixelemente im Kanal $L = 1$, $S = 1$, $T = 1$ mit $J = 0$ und $J = 1$ lauten:

$$\begin{aligned}
& \langle n(1, 1)01 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{v} \mathbf{c}_r | n(1, 1)01 \rangle \\
&= \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(1, 1)01 | \mathbf{c}_r | n(1, 1)01 \rangle [\langle n_2(1, 1)01 | \mathbf{c}_r | n(1, 1)01 \rangle \langle n_1(1, 1)01 | \mathbf{v} | n_2(1, 1)01 \rangle] , \quad (48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle n(1, 1)11 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{v} \mathbf{c}_r | n(1, 1)11 \rangle \\
&= \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(1, 1)11 | \mathbf{c}_r | n(1, 1)11 \rangle [\langle n_2(1, 1)11 | \mathbf{c}_r | n(1, 1)11 \rangle \langle n_1(1, 1)11 | \mathbf{v} | n_2(1, 1)11 \rangle] . \quad (49)
\end{aligned}$$

Im Kanal $L = 1$, $S = 1$, $J = 2$, $T = 1$ wirkt nun auch der Tensorkorrelator:

$$\begin{aligned}
 & \langle n(1, 1)21 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{v} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \\
 &= \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(1, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle [\langle n_2(1, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \langle n_1(1, 1)21 | \mathbf{v} | n_2(1, 1)21 \rangle \\
 & \quad + \langle n_2(3, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \langle n_1(1, 1)21 | \mathbf{v} | n_2(3, 1)21 \rangle] \quad (50) \\
 & \quad + \langle n_1(3, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle [\langle n_2(1, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \langle n_1(3, 1)21 | \mathbf{v} | n_2(1, 1)21 \rangle \\
 & \quad + \langle n_2(3, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \langle n_1(3, 1)21 | \mathbf{v} | n_2(3, 1)21 \rangle] .
 \end{aligned}$$

3.1.3 Matrixelemente der korrelierten kinetischen Energie

Der Operator der kinetischen Energie im Zweiteilchenraum ist gegeben durch

$$\mathbf{t} = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{p}}_1^2 + \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{p}}_2^2, \quad (51)$$

mit den den Impulsoperatoren $\vec{\mathbf{p}}_1$, $\vec{\mathbf{p}}_2$ beider Teilchen. Hier wurde die gleiche mittlere Masse $m = \frac{1}{2}(m_p + m_n)$ für Protonen und Neutronen angenommen.

Drückt man die Impulsoperatoren durch Schwerpunkts- und Relativimpuls aus, so lässt sich auch der Operator der kinetischen Energie in einen Schwerpunkts- und Relativteil zerlegen:

$$\mathbf{t} = \mathbf{t}_{cm} + \mathbf{t}_{rel} = \frac{1}{2M} \vec{\mathbf{P}}_{cm}^2 + \frac{1}{2\mu} \vec{\mathbf{q}}^2 \quad (52)$$

mit der Gesamtmasse $M = 2m$ und der reduzierten Masse $\mu = \frac{m}{2}$.

Der Schwerpunktsanteil \mathbf{t}_{cm} bleibt unbeeinflusst von den Korrelatoren, so dass dieser für die Energieminimierung keine Rolle spielt [2]. Wir betrachten also nur das Matrixelement des Relativteils \mathbf{t}_{rel} der kinetischen Energie:

$$\langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle. \quad (53)$$

Analog zum Abschnitt 3.1.2 schieben wir nun Einsen in harmonischer Oszillatordarstellung vor und hinter dem Operator \mathbf{t}_{rel} ein, wodurch wir die Bestimmung der Matrixelemente der korrelierten kinetischen Energie auf die Bestimmung der Matrixelemente der Korrelatoren sowie der unkorrelierten kinetischen Energie zurückführen:

$$\begin{aligned}
& \langle n(J, S)JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(J, S)JT \rangle \\
&= \sum_{n_1, L_1, S_1, J_1, T_1} \sum_{n_2, L_2, S_2, J_2, T_2} \langle n(L, S)JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger | n_1(L_1, S_1)J_1T_1 \rangle \\
&\quad \times \langle n_1(L_1, S_1)J_1T_1 | \mathbf{t}_{rel} | n_2(L_2, S_2)J_2, T_2 \rangle \langle n_2(L_2, S_2)J_2T_2 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle \\
&= \sum_{n_1, L_1} \sum_{n_2, L_2} \langle n_1(L_1, S)JT | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)J, T \rangle \\
&\quad \times \langle n_1(L_1, S)JT | \mathbf{t}_{rel} | n_2(L_2, S)J, T \rangle \langle n_2(L_2, S)JT | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{54}$$

Um die Matrixelemente der unkorrelierten kinetischen Energie zu bestimmen, schieben wir nun eine Eins in Ortsdarstellung vor dem Operator \mathbf{t}_{rel} ein:

$$\begin{aligned}
& \langle n_1(L_1, S)JT | \mathbf{t}_{rel} | n_2(L_2, S)JT \rangle = \langle n_1(L_1, S)JT | \frac{\vec{q}^2}{2\mu} | n_2(L_2, S)JT \rangle \\
&= \frac{1}{2\mu} \int dr \cdot r^2 \sum_{L' S' J' T'} \langle n_1(L_1, S)JT | r(L', S')J'T' \rangle \langle r(L', S')J'T' | \vec{q}^2 | n_2(L_2, S)JT \rangle \\
&= \frac{1}{2\mu} \int dr \cdot r^2 \langle n_1(L_1, S)JT | r(L_1, S)JT \rangle \langle r(L_1, S)JT | \vec{q}^2 | n_2(L_2, S)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{55}$$

Durch Ausnutzen der Ortsdarstellung des Operators \vec{q}^2

$$\langle r(L, S)JT | \vec{q}^2 | \Psi \rangle = \hbar^2 \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L(L+1)}{r^2} \right) \langle r(L, S)JT | \Psi \rangle \tag{56}$$

erhalt man:

$$\begin{aligned}
& \langle n_1(L_1, S)JT | \mathbf{t}_{rel} | n_2(L_2, S)JT \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int dr \cdot r^2 \langle n_1(L_1, S)JT | r(L_1, S)JT \rangle \\
&\quad \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L_1(L_1+1)}{r^2} \right) \langle r(L_1, S)JT | n_2(L_2, S)JT \rangle .
\end{aligned} \tag{57}$$

Das Skalarprodukt $\langle r(L_1, S)JT | n_2(L_2, S)JT \rangle$ fuhrt aufgrund der Orthogonalitatsrelation beider Zustande dazu, dass bei den Matrixelementen der korrelierten kinetischen Energie die Summe uber L_2 wegfallt. Somit ergibt sich fur die korrelierte kinetische Energie:

$$\begin{aligned}
 & \langle n(J, S)JT | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(J, S)JT \rangle \\
 &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{n_1, n_2, L_1} \langle n_1(L_1, S)JT | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle \langle n_2(L_1, S)JT | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(L, S)JT \rangle \\
 & \times \int dr \langle n_1(L_1, S)JT | r(L_1, S)JT \rangle \left\{ -r \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(L_1, S)JT | n_2(L_1, S)JT \rangle \right) \right. \\
 & \qquad \qquad \qquad \left. + L_1(L_1 + 1) \langle r(L_1, S)JT | n_2(L_1, S)JT \rangle \right\}.
 \end{aligned} \tag{58}$$

Wie in 3.1.2 betrachten wir die einzelnen Spin-Isospin-Kanäle separat.
Wir beginnen mit dem Kanal $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$, $T = 1$:

$$\begin{aligned}
 & \langle n(0, 0)01 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0, 0)01 \rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(0, 0)01 | \mathbf{c}_r | n(0, 0)01 \rangle \langle n_2(0, 0)01 | \mathbf{c}_r | n(0, 0)01 \rangle \\
 & \times \int dr \cdot r \langle n_1(0, 0)01 | r(0, 0)01 \rangle \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(0, 0)01 | n_2(0, 0)01 \rangle \right).
 \end{aligned} \tag{59}$$

Das Integral über den Relativabstand r kann durch Verwendung spezieller Orthogonalitätsrelationen der generalisierten Laguerrepolynome, die in den harmonischen Oszillatorfunktionen vorkommen, bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
 & \int dr \cdot r \langle n_1(0, 0)01 | r(0, 0)01 \rangle \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(0, 0)01 | n_2(0, 0)01 \rangle \right) \\
 &= \frac{N_{n_1, 0} N_{n_2, 0}}{\sqrt{2\nu}} \left\{ \frac{\Gamma(n_1 + \frac{3}{2})}{n_1!} \left[\left(-\frac{1}{2}n_1 - \frac{3}{4} \right) \delta_{n_1(n_2-1)} - \left(n_1 + \frac{3}{4} \right) \delta_{n_1 n_2} - \frac{1}{2}n_1 \delta_{(n_1-1)n_2} \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{60}$$

Für $L = 1$, $S = 0$, $J = 1$, $T = 0$ erhalten wir das Matrixelement:

$$\begin{aligned}
& \langle n(1,0)10 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1,0)10 \rangle \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(1,0)10 | \mathbf{c}_r | n(1,0)10 \rangle \langle n_2(1,0)10 | \mathbf{c}_r | n(1,0)10 \rangle \\
& \quad \times \int dr \langle n_1(1,0)10 | r(1,0)10 \rangle \left\{ r \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(1,0)10 | n_2(1,0)10 \rangle \right) - 2 \langle r(1,0)10 | n_2(1,0)10 \rangle \right\}.
\end{aligned} \tag{61}$$

Das Radialintegral kann analog zu (61) bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
& \int dr \langle n_1(1,0)10 | r(1,0)10 \rangle \left\{ r \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(1,0)10 | n_2(1,0)10 \rangle \right) - 2 \langle r(1,0)10 | n_2(1,0)10 \rangle \right\} \\
&= \frac{N_{n_1,1} N_{n_2,1}}{\nu \sqrt{2\nu}} \left\{ \frac{\Gamma(n_1 + \frac{5}{2})}{n_1!} \left(\left(-\frac{1}{2} n_1 - \frac{5}{8} \right) \delta_{n_1 n_2} - \frac{1}{4} n_1 \delta_{(n_1-1)n_2} \right) + \frac{\Gamma(n_2 + \frac{5}{2})}{n_2!} \left(-\frac{1}{4} n_2 \delta_{n_1(n_2-1)} \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{62}$$

Für die Quantenzahlen $L = 0$, $S = 1$, $J = 1$, $T = 0$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}
& \langle n(0,1)10 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0,1)10 \rangle \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{n_1, n_2} \left[\langle n_1(0,1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0,1)10 \rangle \langle n_2(0,1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0,1)10 \rangle \right. \\
& \quad \times \int dr \cdot r \langle n_1(0,1)10 | r(0,1)10 \rangle \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(0,1)10 | n_2(0,1)10 \rangle \right) \\
& \quad + \langle n_1(2,1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0,1)10 \rangle \langle n_2(2,1)10 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(0,1)10 \rangle \\
& \quad \left. \times \int dr \langle n_1(2,1)10 | r(2,1)10 \rangle \left\{ \left(r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(2,1)10 | n_2(2,1)10 \rangle \right) - 6 \langle r(2,1)10 | n(2,1)10 \rangle \right\} \right],
\end{aligned} \tag{63}$$

mit dem Radialintegral:

$$\begin{aligned}
 & \int dr \langle n_1(2,1)10|r(2,1)10 \rangle \left\{ \left(r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(2,1)10|n_2(2,1)10 \rangle \right) - 6 \langle r(2,1)10|n(2,1)10 \rangle \right\} \\
 &= \frac{N_{n_1,2} N_{n_2,2}}{\nu^2 \sqrt{2\nu}} \left\{ \frac{1}{8} \frac{\Gamma(n_1 + \frac{7}{2})}{n_1!} \left(\left(-2n_1 - \frac{7}{2} \right) \delta_{n_1 n_2} - n_1 \delta_{(n_1-1)n_2} \right) - \frac{1}{8} \frac{\Gamma(n_2 + \frac{7}{2})}{n_2!} (n_2 \delta_{n_1(n_2-1)}) \right\}. \tag{64}
 \end{aligned}$$

Im Kanal $L = 1$, $S = 1$, $T = 1$ betrachten wir wieder die Fälle $J = 0$, $J = 1$, $J = 2$.
Für $J = 0$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 & \langle n(1,1)01|\mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r|n(1,1)01 \rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(1,1)01|\mathbf{c}_r|n(1,1)01 \rangle \langle n_2(1,1)01|\mathbf{c}_r|n(1,1)01 \rangle \\
 &\quad \times \int dr \langle n_1(1,1)01|r(1,1)01 \rangle \left\{ r \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(1,1)01|n_2(1,1)01 \rangle \right) - 2 \langle r(1,1)01|n_2(1,1)01 \rangle \right\}. \tag{65}
 \end{aligned}$$

Da die harmonischen Oszillator Eigenfunktionen nur von der Bahndrehimpulsquantenzahl L und nicht von den Quantenzahlen S , T und J abhängen, entspricht das Radialintegral dem Radialintegral im Kanal $S = 0$, $T = 0$.

Für $J = 1$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 & \langle n(1,1)11|\mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r|n(1,1)11 \rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{n_1, n_2} \langle n_1(1,1)11|\mathbf{c}_r|n(1,1)11 \rangle \langle n_2(1,1)11|\mathbf{c}_r|n(1,1)11 \rangle \\
 &\quad \times \int dr \langle n_1(1,1)11|r(1,1)11 \rangle \left\{ r \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(1,1)11|n_2(1,1)11 \rangle \right) - 2 \langle r(1,1)11|n_2(1,1)11 \rangle \right\}. \tag{66}
 \end{aligned}$$

Auch hier entspricht das Radialintegral dem Integral im Kanal $S = 0$, $T = 0$.

Schließlich erhalten wir für $J = 2$:

$$\begin{aligned}
& \langle n(1, 1)21 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_\Omega^\dagger \mathbf{t}_{rel} \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{n_1, n_2} \left[\langle n_1(1, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \langle n_2(1, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \right. \\
&\quad \times \int dr \cdot r \langle n_1(1, 1)21 | r(1, 1)21 \rangle \left\{ \left(r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(1, 1)21 | n_2(1, 1)21 \rangle \right) - 2 \langle r(1, 1)21 | n(1, 1)21 \rangle \right\} \quad (67) \\
&\quad + \langle n_1(3, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \langle n_2(3, 1)21 | \mathbf{c}_\Omega \mathbf{c}_r | n(1, 1)21 \rangle \\
&\quad \times \int dr \langle n_1(3, 1)21 | r(3, 1)21 \rangle \left\{ \left(r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(3, 1)21 | n_2(3, 1)21 \rangle \right) - 12 \langle r(3, 1)21 | n(3, 1)21 \rangle \right\} \left. \right].
\end{aligned}$$

Das erste Radialintegral entspricht wieder dem Radialintegral im Kanal $S = 0$, $T = 0$. Für das zweite Radialintegral ergibt sich nach einigen Umformungen:

$$\begin{aligned}
& \int dr \cdot \langle n_1(3, 1)21 | r(3, 1)21 \rangle \left\{ \left(r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \langle r(3, 1)21 | n_2(3, 1)21 \rangle \right) - 12 \langle r(3, 1)21 | n(3, 1)21 \rangle \right\} \\
&= \frac{N_{n_1, 3} N_{n_2, 3}}{4\nu^3 \sqrt{2\nu}} \left\{ \frac{\Gamma(n_1 + \frac{9}{2})}{n_1!} \left(\left(\frac{1}{2} n_1 + \frac{9}{8} \right) \delta_{n_1 n_2} + \frac{1}{4} n_1 \delta_{(n_1-1)n_2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\Gamma(n_2 + \frac{9}{2})}{n_2!} \left(\frac{1}{4} n_2 \delta_{n_1(n_2-1)} \right) \right\}. \quad (68)
\end{aligned}$$

4 Korrelatoroptimierung für das Argonne V18 Potential

4.1 Das Argonne V18 Potential

Das Argonne V18 Potential [7] ist ein realistisches Nukleon-Nukleon Potential. Es besteht aus 3 Wesentlichen Teilen: einem Anteil, der die kurz- und mittelreichweitige Wechselwirkung der Nukleonen beschreibt, einem langreichweitigen Teil und elektromagnetischen Korrekturen, die über die Coulombwechselwirkung hinausreichen.

Der langreichweitige Teil stützt sich auf den Ein-Pion-Austausch der Mesonentheorie. Nach diesem durch die QCD-motivierten Modell, wird die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen durch den Austausch von Mesonen vermittelt. Je nach Quantenzahlen (Spin J , Parität π und Isospin T) der Mesonen, erzeugen diese unterschiedliche Operatorstrukturen. Die einfachsten Operatoren, die aufgrund allgemeiner Symmetrieüberlegungen zur Beschreibung der nuklearen Wechselwirkung möglich sind, lassen sich auch auf diese Weise bestimmen [1].

Im Gegensatz zu Photonen, den Austauschteilchen der elektromagnetischen Wechselwirkung, haben Mesonen eine endliche Ruhemasse. Dies führt zu einer endlichen Reichweite der Wechselwirkung, die durch die Comptonwellenlänge der Austauschteilchen $\lambda_c = \frac{1}{mc}$ gegeben ist. Die verschiedenen Mesonen (π , η , σ usw.) mit ihren unterschiedlichen Massen können somit unterschiedliche Anteile der NN-Wechselwirkung erzeugen. Die Pionen sind mit einer Masse von 140 MeV die leichtesten Mesonen und dominieren daher den langreichweitigen Teil der NN-Wechselwirkung [1].

Der kurz- und mittelreichweitige Anteil des AV18 Potentials basiert nicht auf der Mesonenaustauschtheorie. Er besteht aus fünf phänomenologischen Termen [7]: einem Zentralteil $v_{ST}^c(\mathbf{r})$, einem Tensorteil $v_{ST}^t(\mathbf{r})\mathbf{s}_{12}$ mit dem Tensoroperator \mathbf{s}_{12} , einem Spin-Bahn-Teil $v_{ST}^s(\mathbf{r})\vec{l} \cdot \vec{s}$, einem Quadratischen Spin-Bahn-Teil $v_{ST}^{ls^2}(\mathbf{r}) (\vec{l} \cdot \vec{s})^2$ sowie einem Teil der Proportional zum Quadrat des Bahndrehimpulses ist $v_{ST}^{l^2}(\mathbf{r})\vec{l}^2$. Die freien Parameter der Radialfunktionen werden durch Anpassung an Deutroneigenschaften und NN-Streudaten bestimmt.

Das gesamte Argonne V18 Potential lässt sich mit Hilfe von 18 Operatoren darstellen (daher der Name V18) [7]. Im Vergleich zu seinem Vorgänger, Argonne V14, enthält es vier zusätzliche Operatoren, welche die Ladungsunabhängigkeit brechen. Drei davon erfüllen die Ladungssymmetrie, d.h. die Wechselwirkungen zwischen zwei Protonen und zwischen zwei Neutronen sind identisch, sie unterscheiden sich aber von der Wechselwirkung zwischen Proton und Neutron. Der vierte Operator bricht auch die Ladungssymmetrie, indem er zwischen der Proton-Proton- und der Neutron-Neutron-Wechselwirkung unterscheidet.

4.2 Ergebnisse der Energieminimierung

Nach der in Abschnitt 3 erläuterten Methode der Energieminimierung im Zweiteilchenraum, mit LS -gekoppelten Eigenzuständen des sphärischen harmonischen Oszillators als Versuchszustand, werden die

optimalen Parameter der Korrelationsfunktionen $R_+(r)$ und $\vartheta(r)$ für das Argonne V18 Potential bestimmt. In Tabelle 1 sind die Parameter für die Zentralkorrelationsfunktion $R_+(r)$, in Tabelle 2 für die Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$ in den verschiedenen Spin-Isospin-Kanälen aufgelistet. In den Kanälen $S = 0, T = 0$ und $S = 1, T = 1$ wird der Wert des Reichweitenparameters I_{R_+} auf 0.1 fm^4 gesetzt. Für den Reichweitenparameter I_ϑ wählen wir in den Kanälen mit $S = 1$ den Wert 0.09 fm^3 . Von den beiden in Kapitel 3 genannten Parametrisierungen ϑ^I und ϑ^{II} wird stets ϑ^I verwendet.

S	T	Parametrisierung	α [fm]	β [fm]	γ [fm]	η
0	0	II	0.939	1.226	0.582	-
0	1	I	1.392	0.939	-	0.381
1	0	I	1.350	0.890		0.434
1	1	II	0.575	1.356	0.202	

Tabelle 1: Parameter der Zentralkorrelationsfunktion $R_+(r)$ in den verschiedenen Spin-Isospin-Kanälen für die Parametrisierung $R_+^I(r)$ bzw. $R_+^{II}(r)$ (vgl. Kapitel 3).

S	T	α	β [fm]	γ [fm]
1	0	590.000	1.228	973.000
1	1	-0.098	2.710	2.193

Tabelle 2: Parameter der Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$ für die Parametrisierung $\vartheta^I(r)$.

Die folgenden Abbildungen zeigen die optimalen Zentral- und Tensorkorrelationsfunktionen in den verschiedenen Spin-Isospin-Kanälen (links). Um die Wirkung der Korrelatoren zu veranschaulichen, werden rechts die unkorrelierten LS-gekoppelten Eigenzustände des sphärischen harmonischen Oszillators in Ortsdarstellung (gestrichelt) mit den jeweiligen korrelierten Zuständen (durchgezogen) geplottet. Hierbei wird für die Oszillatorquantenzahl n immer der Wert 0 gewählt.

Die Zentralkorrelationsfunktion (Abbildung 1) wächst zunächst stark an. Sie hat ein Maximum von ungefähr 0.12 fm bei $r \approx 0.6 \text{ fm}$ und fällt dann relativ schnell ab. Bei $r = 2.2 \text{ fm}$ ist sie nahezu komplett auf Null abgefallen. Der Zentralkorrelator führt dazu, dass die Wellenfunktion der Teilchen und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit aus dem Zentralbereich nach außen geschoben wird. Das erkennt man an der korrelierten Wellenfunktion, die im Bereich $r \lesssim 1.4 \text{ fm}$ unterhalb der unkorrelierten Wellenfunktion verläuft. Mit zunehmendem Teilchenabstand verschwindet der Einfluss des Zentralkorrelators sehr schnell. Ab $r \approx 2.5 \text{ fm}$ ist kein Unterschied zwischen korrelierter und unkorrelierter Wellenfunktion mehr erkennbar.

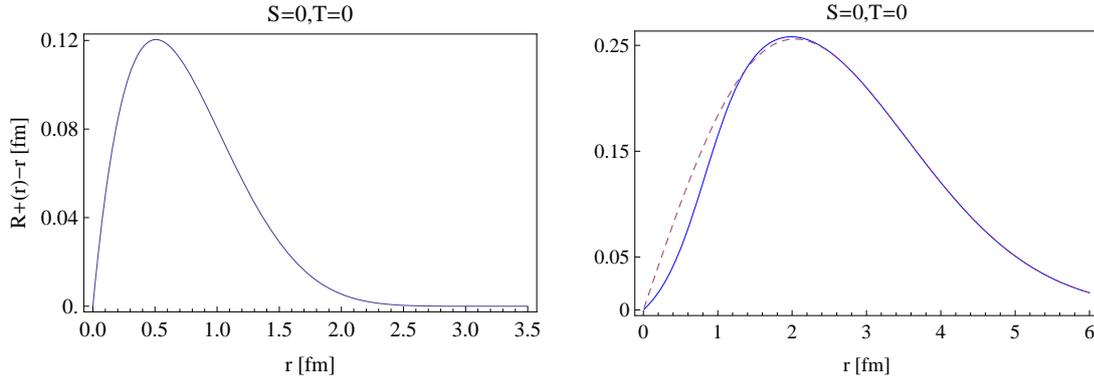


Abbildung 1: Links: Zentralkorrelationsfunktion für $S = 0, T = 0$.
 Rechts: Wellenfunktion $\langle r(1,0)10|0(1,0)10 \rangle$ (gestrichelt) und $\langle r(1,0)10|C_r|0(1,0)10 \rangle$ (durchgezogen).

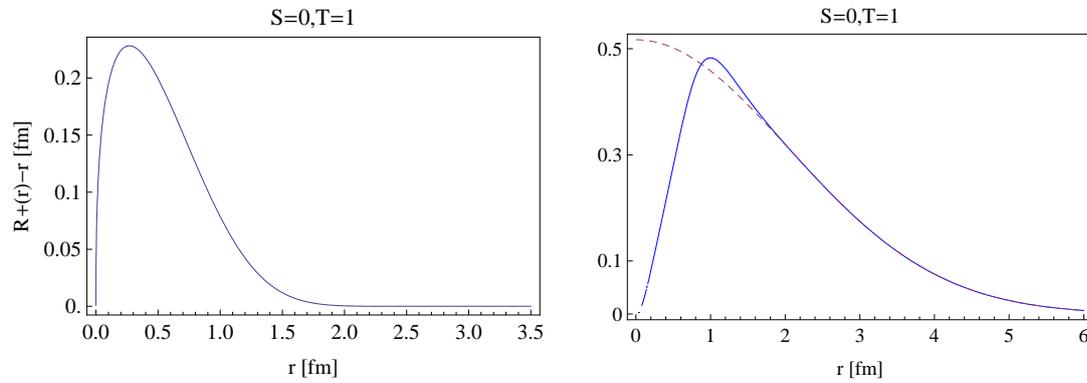


Abbildung 2: Links: Zentralkorrelationsfunktion für $S = 0, T = 1$.
 Rechts: Wellenfunktion $\langle r(0,0)01|0(0,0)01 \rangle$ (gestrichelt) und $\langle r(0,0)01|C_r|0(0,0)01 \rangle$ (durchgezogen).

Im Kanal $S = 0, T = 1$ (Abbildung 2) fällt die Zentralkorrelationsfunktion etwas schneller ab. Bereits bei $r = 1.6$ fm ist sie nahezu komplett auf 0 abgefallen. Ihr Maximalwert beträgt ungefähr 0.25 fm und ist damit etwa doppelt so hoch wie im Kanal $S = 0, T = 0$. Der Grund hierfür ist das Maximum der unkorrelierten Wellenfunktion bei $r = 0$ fm, welches eine stärkere Verschiebung nach außen notwendig macht. Nach Anwendung des Zentralkorrelators zeigt die Wellenfunktion ein Korrelationsloch bei kleinen Abständen. Ihr Maximum ist nun bei etwa $r = 1.2$ fm. Ab $r \approx 2$ fm stimmen korrelierte und unkorrelierte Wellenfunktion wieder überein. Im Kanal $S = 0, T = 0$ wird ein zu kleiner Abstand der Teilchen bereits durch die Zentrifugalbarriere verhindert, die durch den Bahndrehimpuls $L = 1$ zustande kommt.

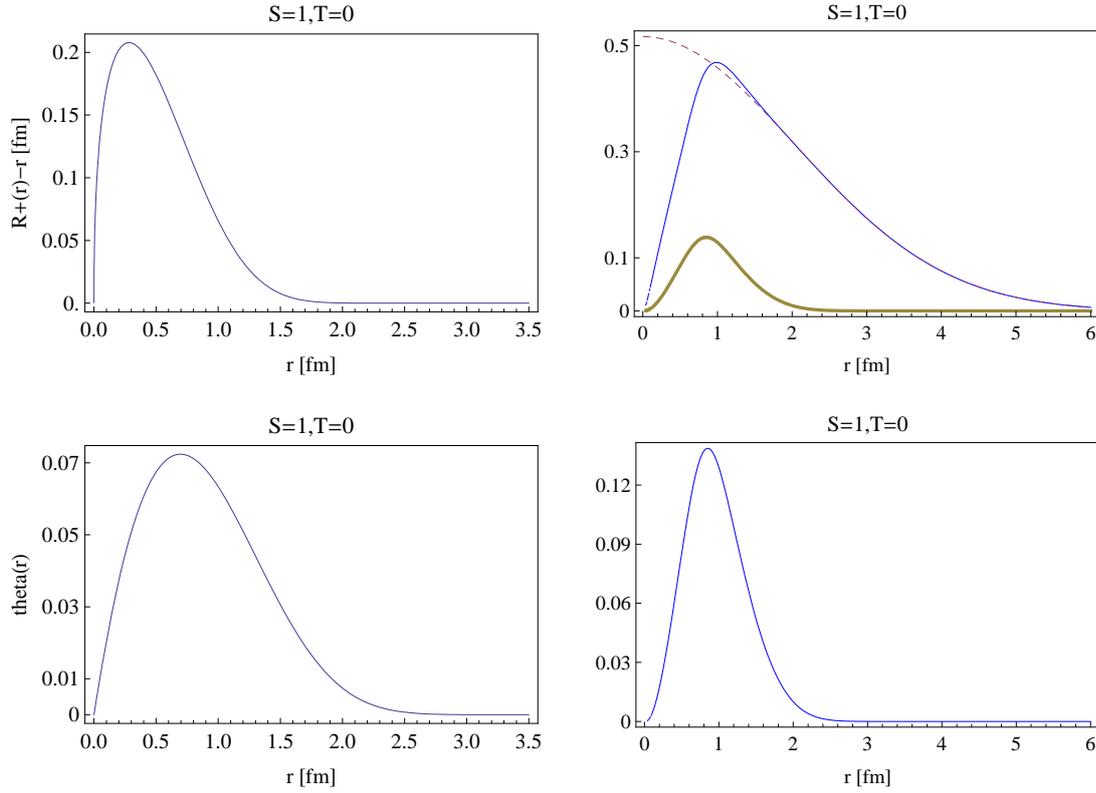


Abbildung 3: Links: Zentral- und Tensorkorrelationsfunktion für $S = 1, T = 0$.
 Rechts, oben: Wellenfunktion $\langle r(0, 1)10|0(0, 1)10\rangle$ (gestrichelt), $\langle r(0, 1)10|C_\Omega C_r|0(0, 1)10\rangle$ (durchgezogen) und $\langle r(2, 1)10|C_\Omega C_r|0(0, 1)10\rangle$ (fett).
 Rechts, unten: Wellenfunktion $\langle r(2, 1)10|C_\Omega C_r|0(0, 1)10\rangle$.

Die Form der Zentralkorrelationsfunktion und Wirkungsweise des Zentralkorrelators sind im Kanal $S = 1, T = 0$ (Abbildung 3) nahezu identisch mit dem Kanal $S = 0, T = 1$. In beiden Fällen ist der Bahndrehimpuls $L = 0$, sodass die Zentrifugalbarriere entfällt und die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei kleinen Abständen unterdrückt werden muss. Die Amplitude der Zentralkorrelationsfunktion ist hier nur etwas geringer, sodass die Wellenfunktion durch den Zentralkorrelator geringfügig weniger nach außen geschoben wird.

Zusätzlich zum Zentralkorrelator wirkt nun noch der Tensorcorrelator. Dieser bewirkt eine Beimischung des Zustandes $|0(2, 1)10\rangle$ zusätzlich zum Zustand $|0(0, 1)10\rangle$. Das Maximum der entsprechenden Wellenfunktion liegt bei $r \approx 0.9 \text{ fm}$ und ist viel kleiner als das Maximum der Wellenfunktion mit $L = 0$.

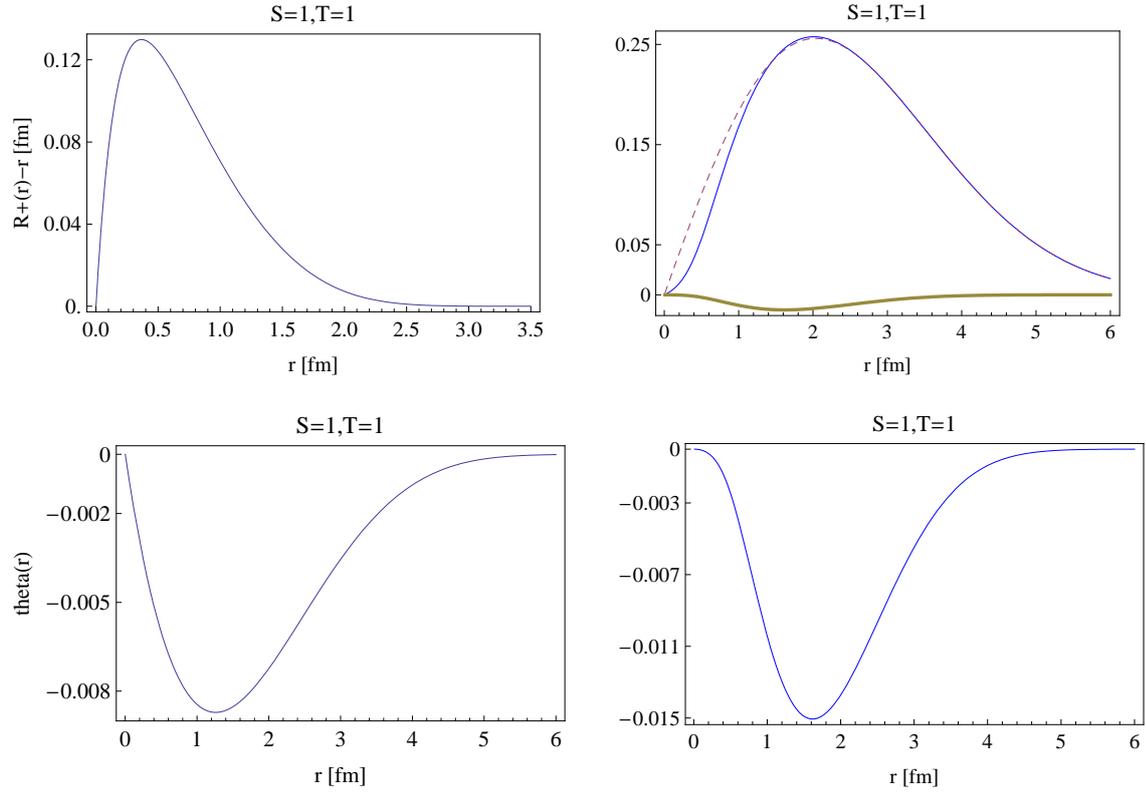


Abbildung 4: Links: Zentral- und Tensorkorrelationsfunktion für $S = 1, T = 1$.
 Rechts, oben: Wellenfunktion $\langle r(1,1)21|0(1,1)21 \rangle$ (gestrichelt), $\langle r(1,1)21|C_\Omega C_r|0(1,1)21 \rangle$ (durchgezogen)
 und $\langle r(3,1)21|C_\Omega C_r|0(1,1)21 \rangle$ (fett). Rechts, unten: Wellenfunktion $\langle r(3,1)21|C_\Omega C_r|0(1,1)21 \rangle$.

Für $S = 1$ und $T = 1$ (Abbildung 4) stimmt die unkorrelierte Wellenfunktion mit der Wellenfunktion im Kanal $S = 0, T = 0$ überein. Die Wirkungsweisen der Zentralkorrelatoren sind daher ähnlich.

Wie in Kapitel 3.1.2 erläutert, gibt es im Kanal $S = 1, T = 1$ für den Gesamtdrehimpuls J die möglichen Werte $J = 0, J = 1$ und $J = 2$. Der Tensorkorrelator wirkt nur für $J = 2$. Er bewirkt eine Beimischung des Zustandes $|0(3,1)21\rangle$ zusätzlich zum Zustand $|0(1,1)2,1\rangle$. Wie schon für $S = 1, T = 0$ hat die Wellenfunktion des beigemischten Zustandes aber nur eine sehr viel geringere Amplitude als die des Zustandes $|0(1,1)2,1\rangle$.

4.3 Vergleich mit früheren Optimierungen

Die nach der in Abschnitt 3 beschriebenen Methode bestimmten Korrelationsfunktionen sollen nun mit Korrelationsfunktionen aus [5] verglichen werden. Anstatt harmonischer Oszillatorzustände wurden in [5] Streulösungen $\varphi_L(r) \sim r^L$ mit Energie 0 als Versuchszustand für die Energieminimierung verwendet. Nach dieser Methode ergeben sich die in Tabelle 3 dargestellten Parameter für die Zentralkorrelationsfunktion, wobei der Reichweitenparameter I_{R_+} hier nur für $S = 0, T = 0$ auf den Wert 0.1 fm^4 gesetzt wurde, während im Kanal mit $S = 1$ und $T = 1$ kein Reichweitenparameter I_{R_+} verwendet wurde:

S	T	Parametrisierung	α [fm]	β [fm]	γ [fm]	η
0	0	II	0.7971	1.2638	0.4621	-
0	1	I	1.3793	0.8853	-	0.3724
1	0	I	1.3265	0.8342		0.4471
1	1	II	0.5665	1.3888	0.1786	

Tabelle 3: Parameter der Zentralkorrelationsfunktion $R_+(r)$ für die verschiedenen Spin-Isospin-Kanäle (aus [5]).

Abbildung 5 zeigt den Vergleich beider Zentralkorrelationsfunktionen in den einzelnen Spin-Isospin-Kanälen. Trotz unterschiedlicher Parameter unterscheiden sich die Korrelationsfunktionen nur sehr wenig. Für $S = 0, T = 0$ ist die Übereinstimmung am Größten. Für den Kanal $S = 1, T = 1$ verläuft die Korrelationsfunktion aus [5] (gestrichelt) im Bereich mittlerer Abstände leicht oberhalb der Korrelationsfunktion aus Kapitel 4.2 (durchgezogen). Für alle anderen Kanäle verlaufen die Korrelationsfunktionen aus Abschnitt 4.2 oberhalb. Dies ließe sich damit erklären, dass die harmonische Oszillatorfunktionen wesentlich stärker bei kleinen Abständen lokalisiert sind als die Streulösungen $\varphi_L(r) \sim r^L$. Um die höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei kleinen Abständen zu unterdrücken ist daher eine stärkere Zentralkorrelationsfunktion erforderlich. Ein entsprechender Vergleich im Kanal $S = 1, T = 1$ ist nicht möglich, da für die Bestimmung der Korrelationsfunktion aus Kapitel 4.2 der Reichweitenparameter I_{R_+} auf den Wert 0.1 fm^4 gesetzt wurde, während in [5] keine Einschränkungen für die Zentralkorrelationsfunktion gemacht wurden. Für sehr geringe und sehr große Abstände stimmen beide Korrelationsfunktionen in allen Kanälen wieder überein.

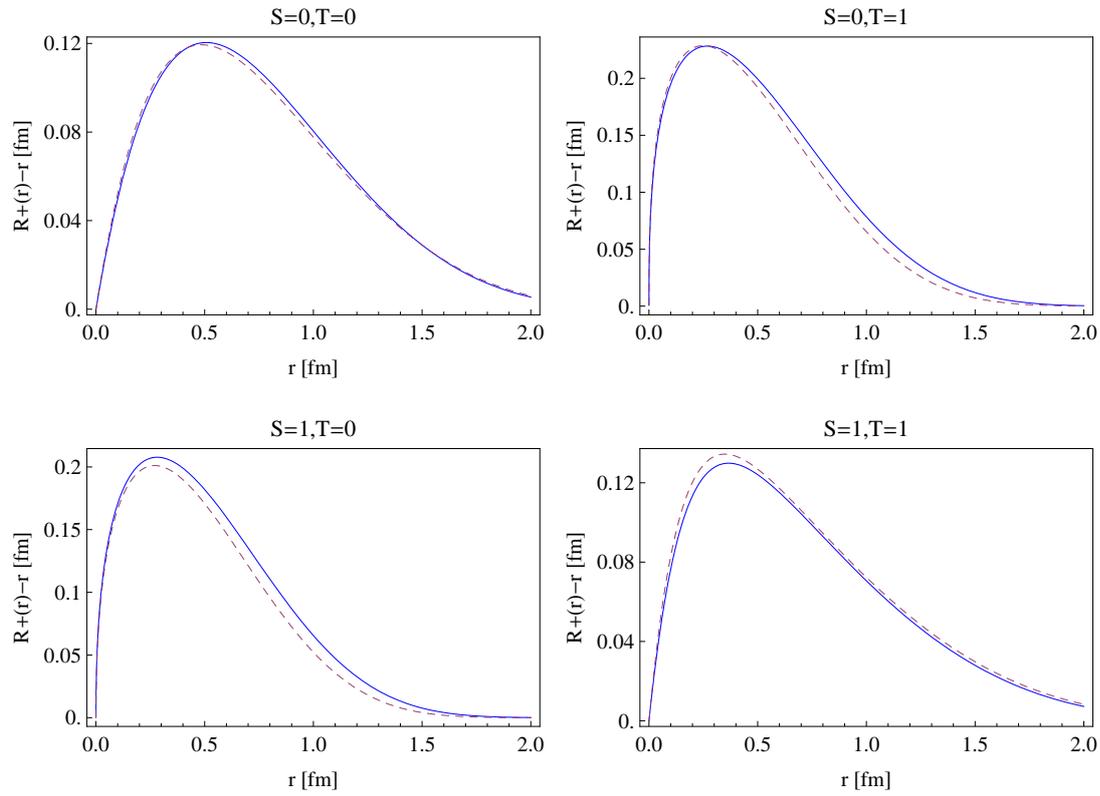


Abbildung 5: Vergleich der Zentralkorrelationsfunktionen in den verschiedenen Spin-Isospin-Kanälen. Gestrichelt: Zentralkorrelationsfunktionen aus [5]. Durchgezogen: Zentralkorrelationsfunktionen aus Kapitel 4.2.

Die Parameter der Tensorkorrelationsfunktion aus [5] sind in Tabelle 4 dargestellt. Hier gilt für den Reichweitenparameter $I_{\vartheta} = 0.09 \text{ fm}^3$ in beiden Kanälen.

S	T	α [fm]	β [fm]	γ [fm]
1	0	536.67	1.2608	1000.0
1	1	-0.0364	3.2925	0.5473

Tabelle 4: Parameter der Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$ aus [5].

Die Tensorkorrelationsfunktionen werden in Abbildung 6 verglichen. In beiden Kanälen haben die Tensorkorrelationsfunktionen aus Kapitel 4.2 eine etwas höhere Amplitude. Zusätzlich ist die Korrelationsfunktion aus Abschnitt 4.2 für $S = 1$ $T = 1$ im Vergleich zur entsprechenden Funktion aus [5] um etwa 0.25 fm nach außen verschoben. Aufgrund der komplexen Struktur der Tensorkorrelationen ist eine anschauliche Interpretation dieser Unterschiede nicht möglich.

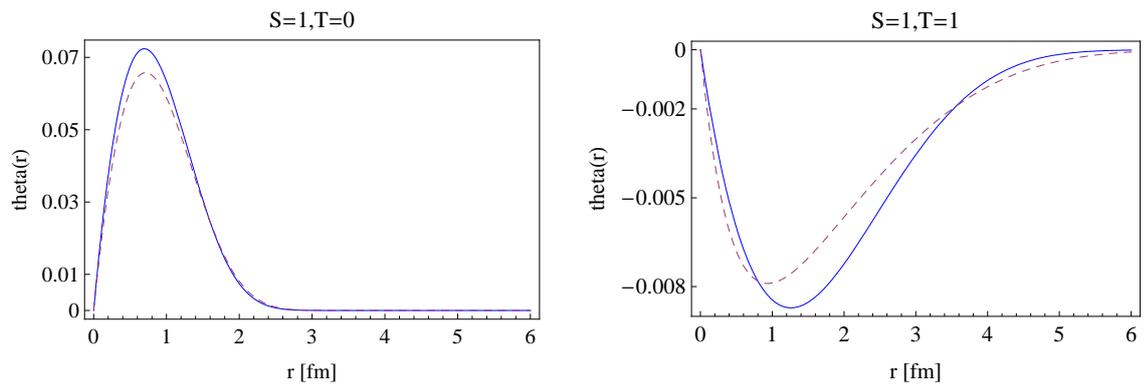


Abbildung 6: Vergleich der Tensorkorrelationsfunktionen. Gestrichelt: Tensorkorrelationsfunktionen aus [5]. Durchgezogen: Tensorkorrelationsfunktionen aus Kapitel 4.2.

5 Korrelatoroptimierung für das chirale N3LO Potential

5.1 Das N3LO Potential

Realistische Potentiale wie z.B. das Argonne V18 Potential, die auf (halb)phänomenologischem Weg konstruiert wurden, reproduzieren experimentelle Daten mit hoher Genauigkeit. Trotzdem weisen sie einige Defizite auf:

Während im Fall der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung die in Frage kommenden Operatoren und somit auch die Anzahl an Freiheitsgraden noch relativ klein sind, ist das bei einem Viel-Nukleonen-Potential nicht mehr der Fall. Die Konstruktion eines Drei- oder Mehr-Nukleonen-Potentials auf rein phänomenologischem Weg, ohne weitere theoretische Einschränkungen ist daher kaum möglich. Zudem ist es kaum möglich ein gegebenes Potential systematisch zu verbessern. Ein großes konzeptionelles Defizit der (halb)phänomenologischen Behandlung ist aber der nur schwache Bezug zur fundamentalen Theorie der QCD.

Eine alternative Möglichkeit zur Bestimmung der nuklearen Wechselwirkung bietet die Chirale Effektive Feldtheorie (χ EFT) [8, 9], welche auf der spontanen Brechung der chiralen Symmetrie der QCD basiert. Während die χ EFT zunächst zur Beschreibung niederenergetischer Reaktionen im Mesonen- und ein-Baryonen-Sektor angewendet wurde, schlug Weinberg eine Verallgemeinerung der Theorie auf den Bereich weniger Nukleonen vor.

Hierbei werden alle möglichen Beiträge zum N-Nukleonen-Potential in einer “Hierarchie der Kernkräfte” systematisch geordnet. Die einzelnen Beiträge enthalten unterschiedliche Pion-Austausch-Terme und Kontaktwechselwirkungen, die den phänomenologischen Teil beschreiben. Den dominanten Beitrag zum gesamten Potential bezeichnet man als “leading-order” (LO). Dieser enthält Zwei-Nukleon (2N) Kräfte, welche durch ein-Pion-Austausch (one-pion-exchange, OPE) generiert werden sowie zwei Zwei-Nukleon-Kontaktwechselwirkungen. Der nächsthöhere Beitrag in der Hierarchie der Kernkräfte wird als “next-to-leading-order” (NLO) bezeichnet. Er beinhaltet 2N-Kräfte, die aus dem führenden Zwei-Pion-Austausch (two-pion-exchange, TPE) resultieren und 7 unabhängige NN-Kontaktwechselwirkungen. Zusätzliche Korrekturen der TPE Beiträge sind in der NNLO enthalten. In dieser Ordnung erscheinen die ersten Drei-Nukleon-Kräfte. Die N³LO schließlich enthält neben weiteren Korrekturen zum 2N- und 3N-Sektor auch die führende Ordnung der 4N-Wechselwirkung.

5.2 Ergebnisse der Energieminimierung

Analog zu Abschnitt 4.2 werden nun die optimalen Parameter der Korrelationsfunktionen $R_+(r)$ sowie $\vartheta(r)$ für das N3LO Potential bestimmt. Auch hier gilt: $I_{R_+} = 0.1 \text{ fm}^4$ in den Kanälen $S = 0, T = 0$ und $S = 1, T = 1$. Für I_ϑ wurden im Kanal $S = 1, T = 0$ die Werte 0.06 fm^3 und 0.09 fm^3 gewählt. Für $S = 1, T = 1$ gilt $I_\vartheta = 0.09 \text{ fm}^3$. Da die Bestimmung der Parameter für Tensor- und Zentralkorrelationsfunktion simultan erfolgt, hängen die Parameter der Zentralkorrelationsfunktion ebenfalls von der Wahl von I_ϑ ab. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 6 und 7 aufgelistet.

S	T	Parametrisierung	$I_\vartheta [\text{fm}^3]$	$\alpha [\text{fm}]$	$\beta [\text{fm}]$	$\gamma [\text{fm}]$	η
0	0	II	-	0.651	1.518	1.349	-
0	1	I	-	1.545	1.362	-	0.965
1	0	I	0.09	2.123	1.421	-	0.748
1	0	I	0.06	2.105	1.421	-	0.750
1	1	II	0.09	0.224	2.357	3.070	

Tabelle 6: Parameter der Zentralkorrelationsfunktion $R_+(r)$ für die verschiedenen Spin-Isospin-Kanäle.

S	T	$I_\vartheta [\text{fm}^3]$	α	$\beta [\text{fm}]$	$\gamma [\text{fm}]$
1	0	0.09	131.153	1.793	999.850
1	0	0.06	163.639	1.675	1425.420
1	1	0.09	-0.048	3.262	1.898

Tabelle 7: Parameter der Tensorkorrelationsfunktion $\vartheta(r)$.

Wie in Abschnitt 4.2 für das Argonne V18 Potential, werden in den folgenden Abbildungen nun die optimalen Zentral- und Tensorkorrelationsfunktionen für das N3LO Potential in den verschiedenen Spin-Isospin-Kanälen geplottet (links). Rechts sieht man wieder den Vergleich der unkorrelierten LS-gekoppelten Eigenzustände des sphärischen harmonischen Oszillators in Ortsdarstellung (gestrichelt) mit den jeweiligen korrelierten Wellenfunktionen (durchgezogen).

Die Zentralkorrelationsfunktion im Kanal $S = 0, T = 0$ (Abbildung 7) hat ein Maximum von ungefähr 0.055 fm bei $r \approx 0.8 \text{ fm}$. Dieser Wert ist nur etwa halb so groß wie das Maximum der Zentralkorrelationsfunktion des Argonne V18 Potentials im entsprechenden Kanal aus Kapitel 4.2. Die Reichweite dagegen ist hier sehr viel größer. Erst bei einem Abstand von $r \approx 2.8 \text{ fm}$ ist die Funktion fast komplett auf Null abgefallen. Die resultierende korrelierte Wellenfunktion verläuft nur schwach unterhalb der unkorrelierten Wellenfunktion.

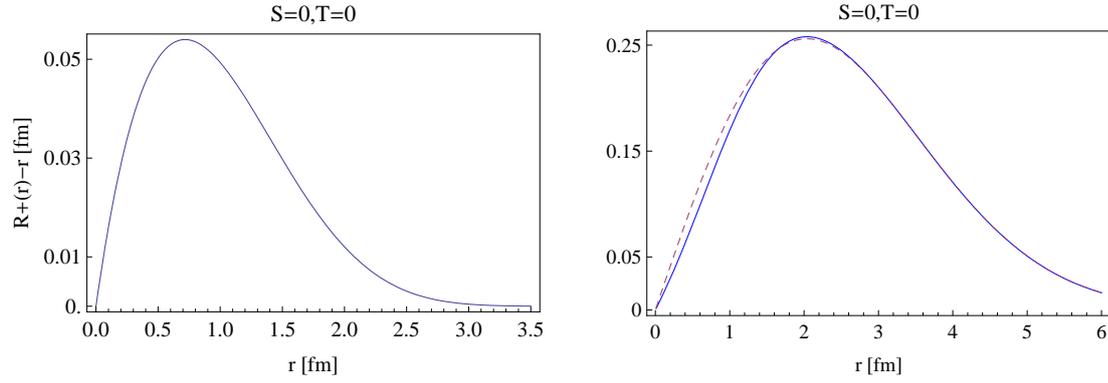


Abbildung 7: Links: Zentralkorrelationsfunktion für $S = 0, T = 0$.
 Rechts: Wellenfunktion $\langle r(1,0)10|0(1,0)10 \rangle$ (gestrichelt) und $\langle r(1,0)10|C_r|0(1,0)10 \rangle$ (durchgezogen).

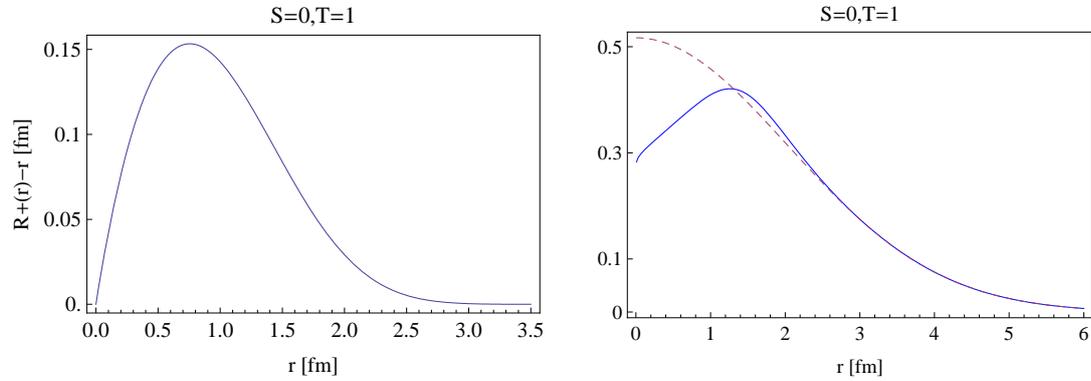


Abbildung 8: Links: Zentralkorrelationsfunktion für $S = 0, T = 1$.
 Rechts: Wellenfunktion $\langle r(0,0)01|0(0,0)01 \rangle$ (gestrichelt) und $\langle r(0,0)01|C_r|0(0,0)01 \rangle$ (durchgezogen).

Die Zentralkorrelationsfunktion des N3LO Potentials im Kanal $S = 0, T = 1$ (Abbildung 8) hat einen geringeren Maximalwert als die entsprechende Korrelationsfunktion des Argonne V18 Potentials. Das Maximum liegt bei einem Abstand von $r \approx 0.8$ fm und die Funktion ist bei $r \approx 2.6$ fm nahezu komplett auf Null abgefallen. Der Zentralkorrelator kann daher weniger Dichte aus dem Zentralbereich schieben als der Zentralkorrelator des AV18 Potentials, hat aber eine größere Reichweite. Beides lässt sich an der korrelierten Wellenfunktion erkennen, die im Zentralbereich nicht komplett unterdrückt wurde, aber über eine höhere Distanz unterhalb der unkorrelierten Wellenfunktion verläuft.

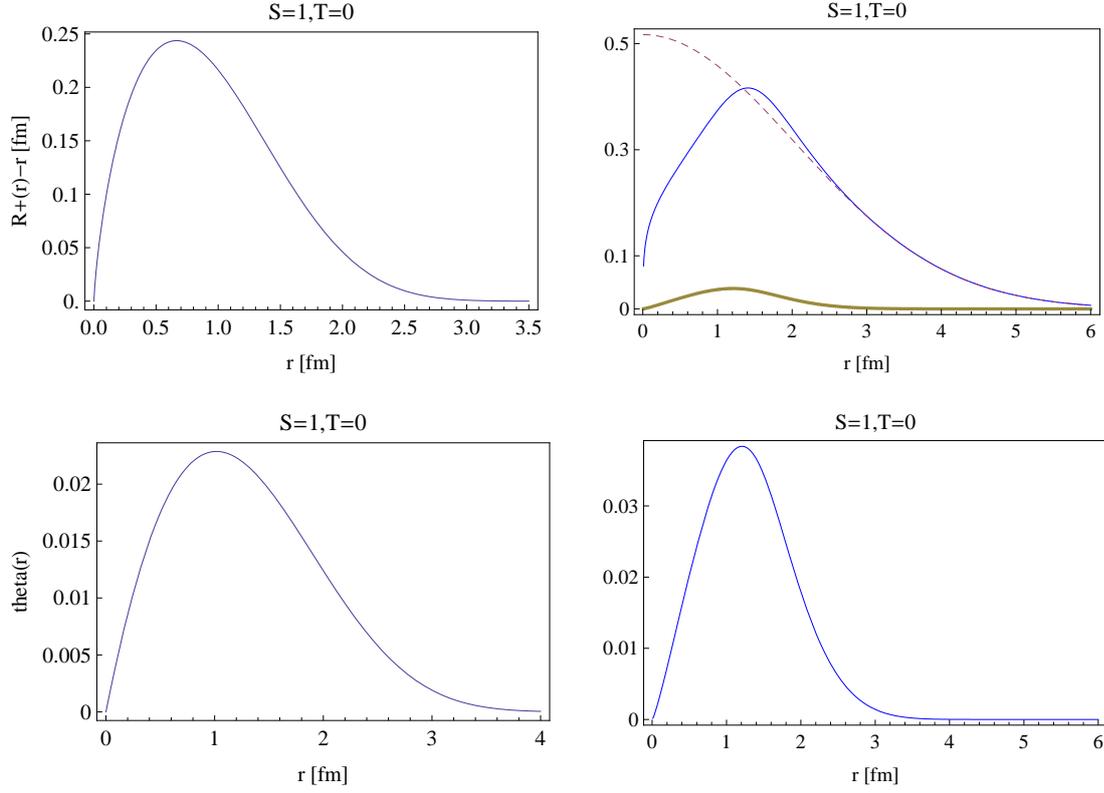


Abbildung 9: Links: Zentral- und Tensorkorrelationsfunktion für $S = 1, T = 0$ mit $I_\vartheta = 0.09 \text{ fm}^3$. Rechts, oben: Wellenfunktion $\langle r(0,1)10|0(0,1)10 \rangle$ (gestrichelt), $\langle r(0,1)10|C_\Omega C_r|0(0,1)10 \rangle$ (durchgezogen) und $\langle r(2,1)10|C_\Omega C_r|0(0,1)10 \rangle$ (fett). Rechts, unten: Wellenfunktion $\langle r(2,1)10|C_\Omega C_r|0(0,1)10 \rangle$.

Die Zentralkorrelationsfunktion für $S = 1, T = 0$ mit $I_\vartheta = 0.09 \text{ fm}^3$ (Abbildung 9) ist mit einem Maximalwert von etwa 0.25 fm etwas höher als die Zentralkorrelationsfunktion des AV18 Potentials. Außerdem liegt das Maximum bei einem etwas größeren Abstand und die Funktion fällt erst bei $r \approx 2.6 \text{ fm}$ auf Null ab. Die Wellenfunktion wird daher insgesamt stärker und über einen längeren Bereich nach außen geschoben. Nur bei sehr kleinen Abständen wird weniger Dichte nach außen geschoben, was daran liegt, dass das Maximum der Korrelationsfunktion bei einem etwas höheren Abstand liegt. Auch hier wird durch den Tensorkorrelator ein Zustand $|0(2,1)10\rangle$ zusätzlich zum Zustand $|0(0,1)10\rangle$ beigemischt. Die entsprechende Wellenfunktion ist allerdings im Vergleich zur Wellenfunktion des Zustandes $|0(0,1)10\rangle$ minimal.

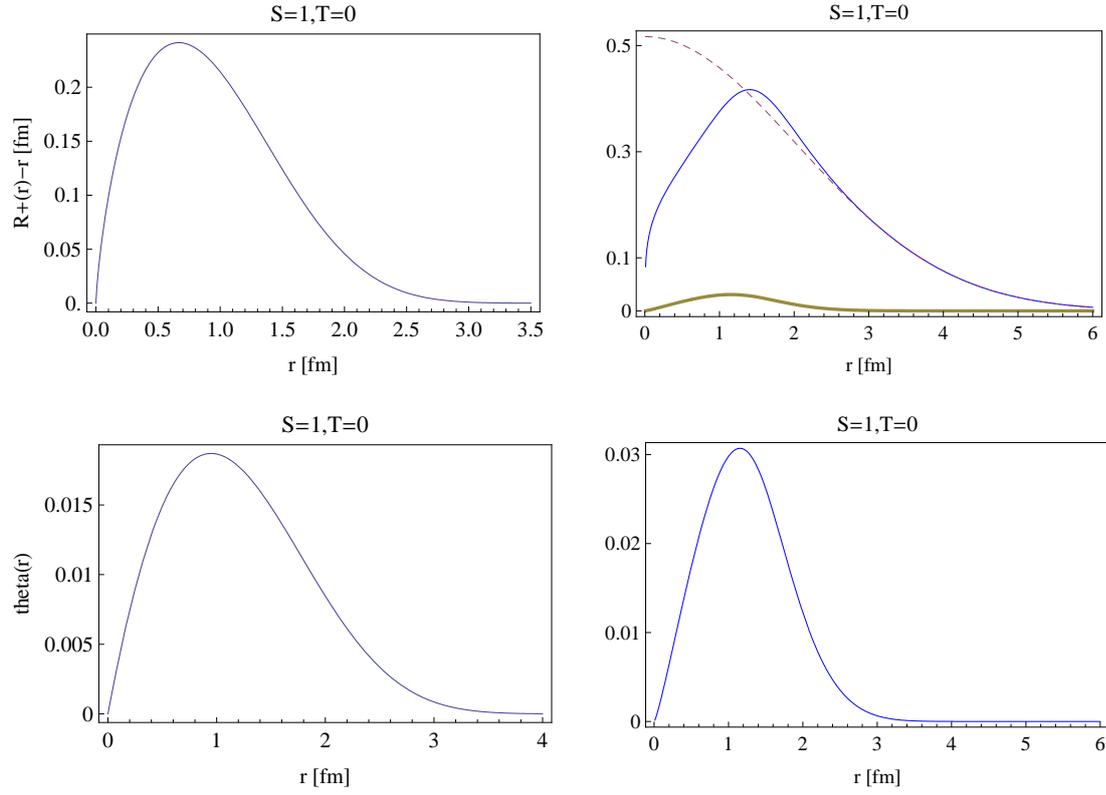


Abbildung 10: Links: Zentral- und Tensorkorrelationsfunktion für $S = 1, T = 0$ mit $I_\vartheta = 0.06 \text{ fm}^3$.
 Rechts, oben: Wellenfunktion $\langle r(0,1)10|0(0,1)10 \rangle$ (gestrichelt), $\langle r(0,1)10|C_\Omega C_r|0(0,1)10 \rangle$ (durchgezogen) und $\langle r(2,1)10|C_\Omega C_r|0(0,1)10 \rangle$ (fett).
 Rechts, unten: Wellenfunktion $\langle r(2,1)10|C_\Omega C_r|0(0,1)10 \rangle$.

Für den Reichweitenparameter $I_\vartheta = 0.06 \text{ fm}^3$ unterscheidet sich die Zentralkorrelationsfunktion im Kanal $S = 1, T = 0$ (Abbildung 10) kaum von der Zentralkorrelationsfunktion für $I_\vartheta = 0.09 \text{ fm}^3$. Die entsprechende Tensorkorrelationsfunktion ist für $I_\vartheta = 0.06 \text{ fm}^3$ allerdings niedriger und hat eine geringfügig kürzere Reichweite. Dies äußert sich in der Wellenfunktion des beigemischten Zustandes mit $L = 2$, der für $I_\vartheta = 0.06 \text{ fm}^3$ ein kleineres Maximum hat.

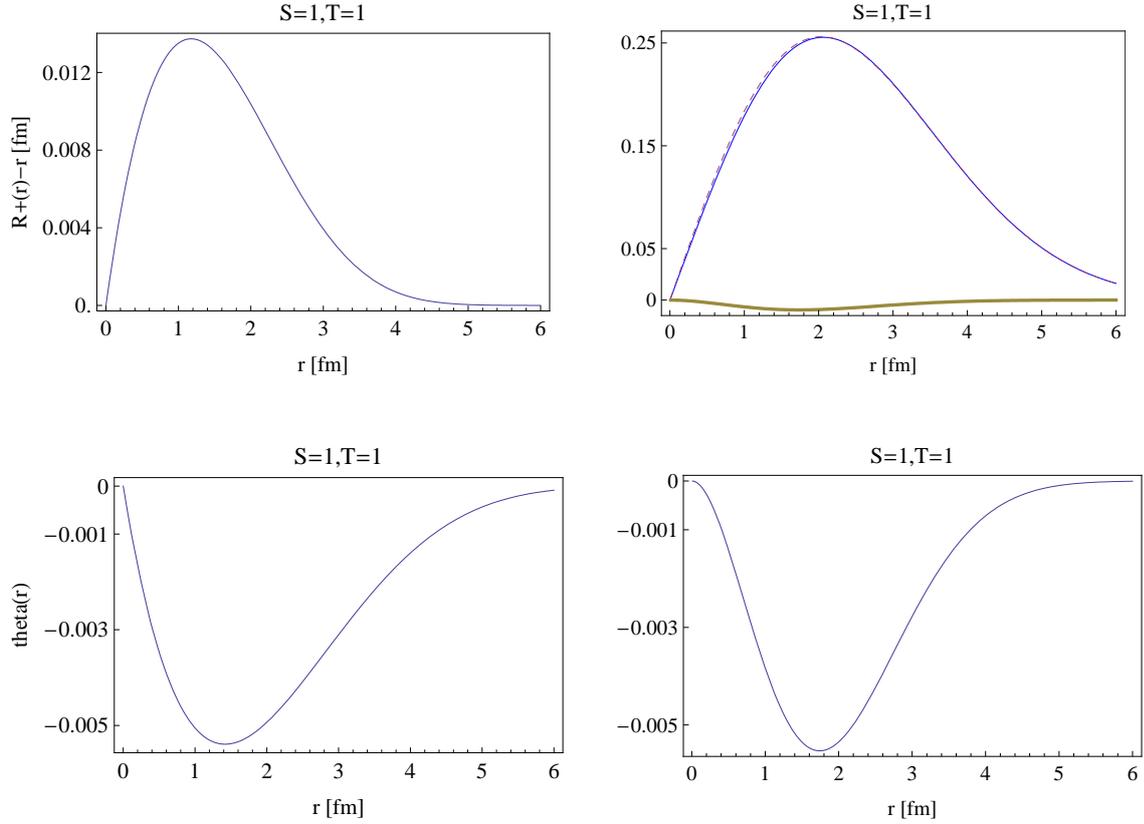


Abbildung 11: Links: Zentral- und Tensorkorrelationsfunktion für $S = 1, T = 1$.
 Rechts, oben: Wellenfunktion $\langle r(1,1)21|0(1,1)21 \rangle$ (gestrichelt), $\langle r(1,1)21|C_\Omega C_r|0(1,1)21 \rangle$ (durchgezogen) und $\langle r(3,1)21|C_\Omega C_r|0(1,1)21 \rangle$ (fett).
 Rechts, unten: Wellenfunktion $\langle r(3,1)21|C_\Omega C_r|0(1,1)21 \rangle$.

Im Vergleich zur Zentralkorrelationsfunktion des AV18 Potentials im Kanal $S = 1, T = 1$, ist die Zentralkorrelationsfunktion des N3LO Potentials (Abbildung 11) im entsprechenden Kanal viel niedriger. Ihr Maximalwert beträgt nur ungefähr 0.014 fm. Dies hat zur Folge, dass die korrelierte Wellenfunktion fast identisch mit der ursprünglichen Wellenfunktion ist. Auch die Tensorkorrelationsfunktion hat nur einen sehr geringen Maximalwert. Die Wellenfunktion des beigemischte Zustandes ist daher sehr niedrig im Vergleich zur ursprünglichen Wellenfunktion.

In Abbildung 12 ist der Vergleich der Zentralkorrelationsfunktionen des Argonne V18 Potentials (gestrichelt) mit den Zentralkorrelationsfunktionen des N3LO Potentials (durchgezogen) nochmals zusammengefasst. Die Maxima der N3LO-Korrelationsfunktionen sind in allen Kanälen bei größeren Abständen als die entsprechenden Funktionen des Argonne V18 Potentials. Außerdem haben sie eine höhere Reichweite. Erst bei Abständen zwischen $r = 2.5$ fm und $r = 3$ fm sind die Funktionen komplett abgefallen, während die AV18 Korrelationsfunktionen in den Kanälen $S = 0, T = 1$ und $S = 1, T = 1$ bereits zwischen $r = 1.5$ fm und $r = 2$ fm und in den Kanälen $S = 0, T = 0$ sowie $S = 1, T = 1$ zwischen $r = 2$ fm und

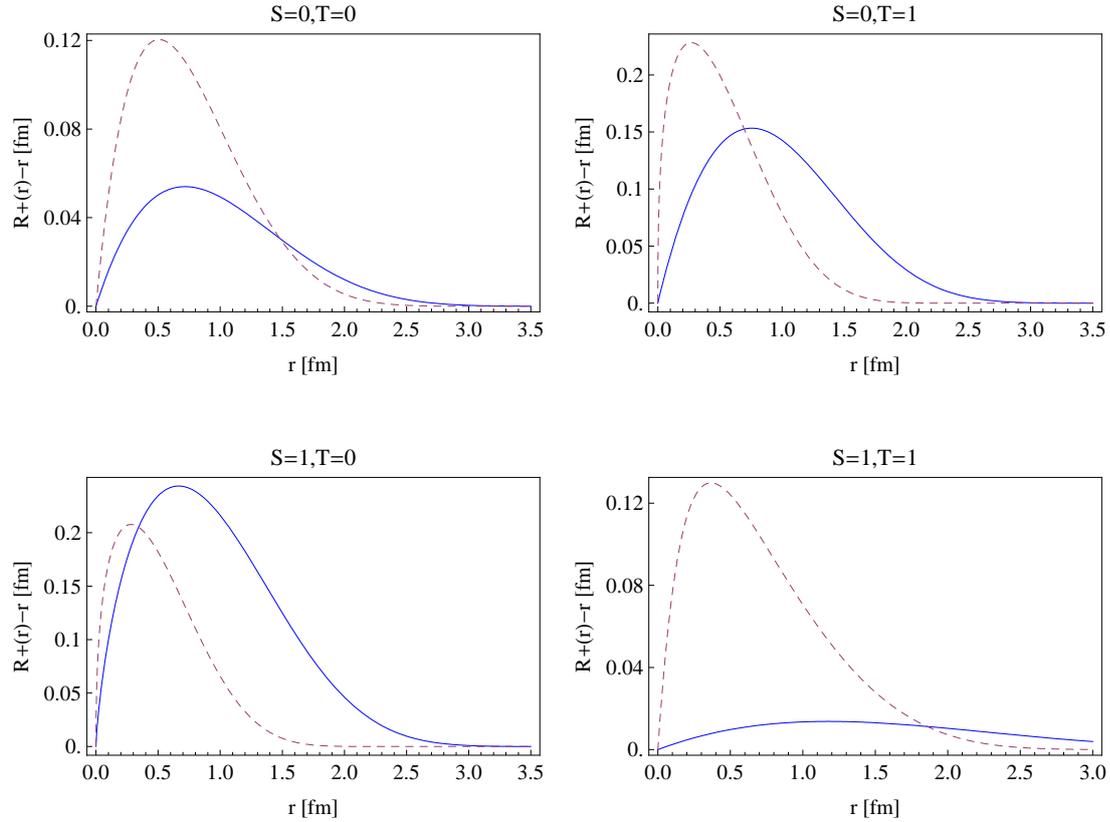


Abbildung 12: Vergleich der Zentralkorrelationsfunktionen in den verschiedenen Spin-Isospin-Kanälen. Gestrichelt: Zentralkorrelationsfunktionen für das Argonne $v18$ Potential (aus 4.2). Durchgezogen: Zentralkorrelationsfunktionen für das N3LO Potential (aus 5.2).

$r = 2.5$ fm auf Null abfallen. Die Maxima der AV18 Korrelationsfunktionen sind in allen Kanälen außer $S = 1, T = 0$ wesentlich höher.

Die Unterschiede lassen sich durch die viel schwächere, kurzreichweitige Abstoßung des N3LO Potentials im Vergleich zum AV18 Potential erklären. Die Sättigungseigenschaften werden im N3LO Potential hauptsächlich durch Impulsabhängigkeiten erzeugt, während das AV18 Potential als lokales Potential wenig Impulsabhängigkeiten besitzt. Dies hat zur Folge, dass die Teilchendichte bei kleinen Abständen für das AV18 Potential viel stärker unterdrückt werden muss als für das N3LO Potential.

Der Vergleich der Tensorkorrelationsfunktionen ist in Abbildung 13 gezeigt. Die Tensorkorrelationsfunktionen des AV18 Potentials haben in beiden Fällen eine viel größere Amplitude. Eine Analyse dieses Unterschiedes geht über den Rahmen dieser Arbeit hinaus.

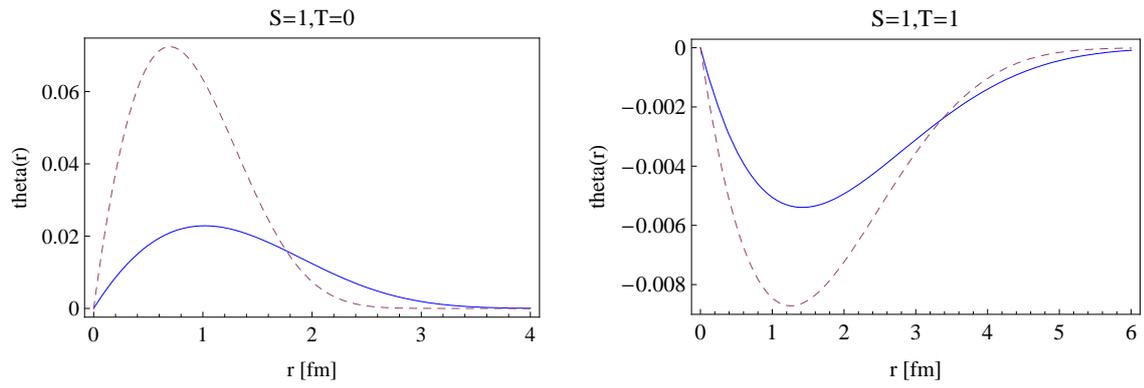


Abbildung 13: Vergleich der Tensorkorrelationsfunktionen für $I_\vartheta = 0.09 \text{ fm}^3$
 Gestrichelt: Tensorkorrelationsfunktionen für das Argonne V18 Potential (aus 4.2).
 Durchgezogen: Tensorkorrelationsfunktionen für das N3LO Potential (aus 5.2).

6 Ausblick: No-Core Schalenmodell für ${}^3\text{H}$ und ${}^4\text{He}$

Das No-Core Schalenmodell (NCSM) [11, 15, 16] ist eine Methode, das nukleare Vielteilchenproblem „exakt“ numerisch zu lösen. Da die Lösung des Problems im kompletten Hilbertraum nicht möglich ist, beschränkt man sich beim NCSM auf einen endlichen Modellraum. Als Basis des Modellraumes verwendet man Vielteilchenslaterdeterminanten $|\phi_i\rangle$ aus harmonischen Oszillatorzuständen. Damit lässt sich ein allgemeiner Vielteilchenzustand $|\psi\rangle$ wie folgt darstellen:

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |\phi_i\rangle, \quad (69)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten C_i . Die Beschränkung des Modellraumes erfolgt durch Vorgabe einer maximalen Anregungsenergie $E_{max} = N_{max} \hbar\omega$ wobei ω die harmonische Oszillatorfrequenz beschreibt. Das Eigenwertproblem

$$\mathbf{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (70)$$

lässt sich durch einschieben einer Eins in der Basis $|\phi_i\rangle$ hinter dem Hamiltonoperator \mathbf{H} des A-Nukleonensystems und durch Multiplikation der Gleichung mit $\langle\phi_j|$ in ein Matrixeigenwertproblem umwandeln:

$$\sum_i \langle\phi_j| \mathbf{H} |\phi_i\rangle C_{ni} = E_n C_{ni}. \quad (71)$$

Die Energien E_n können nun durch Diagonalisierung der Matrix $H_{ji} = \langle\phi_j| \mathbf{H} |\phi_i\rangle$ bestimmt werden. Da die von der Wechselwirkung erzeugten kurzreichweitigen Korrelationen einen zu großen Modellraum erfordern würden, verwendet man effektive Potentiale, die durch Transformationsmethoden, wie z.B. UCOM, vordagonalisiert wurden.

Abbildung 14 zeigt die Ergebnisse von NCSM Berechnungen für die Kerne ${}^3\text{H}$ und ${}^4\text{He}$ mit dem, von P. Navrátil et al. entwickelten Code [11]. Input waren Zweiteilchenmatrixelemente des korrelierten chiralen N3LO Potentials, wobei zur Korrelation die optimierten Korrelationsfunktionen aus Kapitel 5.2 verwendet wurden. Im Kanal $S = 1$, $T = 0$ wurden die Korrelationsfunktionen mit $I_\vartheta = 0.09 \text{ fm}^3$ verwendet. Geplottet ist die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Modellraumgröße, ausgedrückt durch N_{max} , für drei verschiedene Werte der Oszillatorfrequenz ω . Für alle Oszillatorfrequenzen scheint die Energie mit zunehmendem N_{max} sowohl für ${}^3\text{H}$ als auch für ${}^4\text{He}$ gegen feste Werte zu konvergieren. Durch Fit von Exponentialfunktionen an die jeweils letzten Energiewerte lässt sich die Grundzustandsenergie abschätzen. Die Ergebnisse sind für die verschiedenen Werte von $\hbar\omega$ in Tabelle 8 dargestellt. Sie liegen in beiden Fällen leicht unterhalb der experimentell ermittelten Grundzustandsenergie. Der nächste Schritt wäre nun die Anpassung der Grundzustandsenergien an die experimentellen Werte durch Variation der Reichweitenparameter I_{R_+} und I_ϑ . Dies könnte Gegenstand zukünftiger Arbeiten sein.

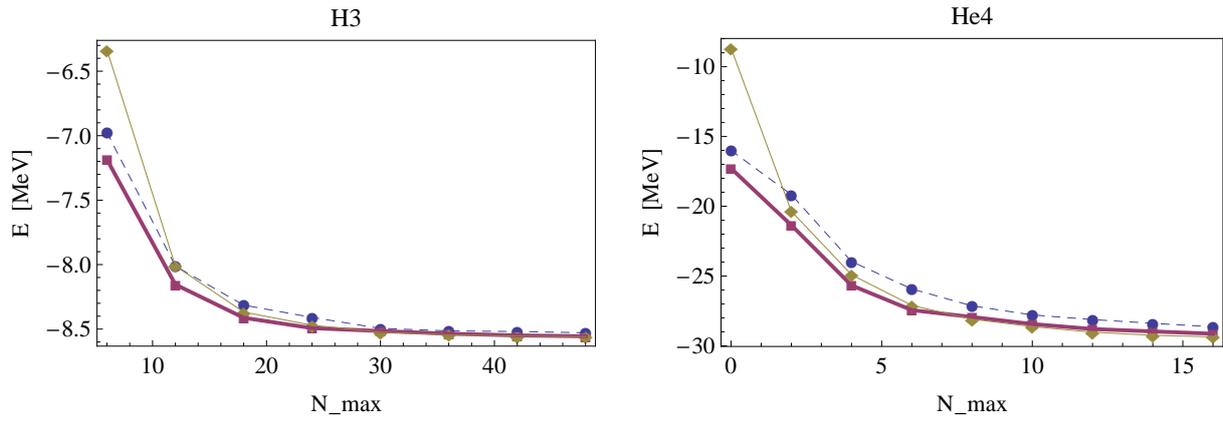


Abbildung 14: Grundzustandsenergien für ${}^3\text{H}$ (links) und ${}^4\text{He}$ (rechts) in Abhängigkeit von der Basisgröße für verschiedene Werte von $\hbar\omega$. Gestrichelt: $\hbar\omega = 20$ MeV, durchgezogen: $\hbar\omega = 30$ MeV, fett: $\hbar\omega = 40$ MeV. Die horizontale Linie gibt die Lage des experimentellen Wertes an.

$\hbar\omega$ [MeV]	Energie ${}^3\text{H}$ [MeV]	Energie ${}^4\text{He}$ [MeV]
20	-8.532	-29.346
30	-8.562	-29.375
40	-8.562	-29.514
experimenteller Wert	-8.482	-28.296

Tabelle 8: Abgeschätzte Grundzustandsenergien für ${}^3\text{H}$ und ${}^4\text{He}$ für die verschiedenen Werte von $\hbar\omega$ und experimentelle Werte aus [14].

7 Zusammenfassung

Wie in der Einleitung beschrieben, bestehen die Hauptprobleme der theoretischen Kernphysik in der Bestimmung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung sowie der Lösung des quantenmechanischen Vielteilchenproblems. Realistische Potentiale wie das hier verwendete Argonne V18 Potential können unter Verwendung von Symmetrieeigenschaften und experimentellen Daten konstruiert werden. Eine Alternative, theoretisch besser fundierte Methode bietet die chirale effektive Feldtheorie, welcher das in Kapitel 5 verwendeten N3LO Potential entstammt. Die bei der Lösung des Vielteilchenproblems für schwere Kerne verwendeten Mean-Field-Verfahren schränken den Vielteilchenhilbertraum auf Modellräume ein, in denen von der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung erzeugte, kurzreichweitige Korrelationen nicht beschrieben werden können. In Kapitel 2 wurde die Methode der unitären Korrelatoren präsentiert. Bei dieser Methode werden die kurzreichweitigen Zentral- und Tensorkorrelationen durch unitäre Transformationen behandelt, welche je nach Problemstellung auf den Vielteilchenzustand oder den betrachteten Operator angewendet werden können. In Kapitel 3 wurde beschrieben, wie die Parameter der Korrelationsfunktionen $R_+(r)$ und $\vartheta(r)$ mittels Energieminimierung im Zweiteilchenraum bestimmt werden können. Dazu wurden Ausdrücke für Matrixelemente der Korrelatoren in harmonischer Oszillatordarstellung hergeleitet. Diese wurden dann verwendet um die diagonalen Matrixelemente eines korrelierten Potentials sowie der korrelierten kinetischen Energie zu bestimmen. Das in Kapitel 3 beschriebene Verfahren wurde anschließend dazu verwendet, die optimalen Korrelationsfunktionen für das Argonne V18 Potential sowie für das chirale N3LO Potential zu bestimmen. Der Vergleich zeigte, dass die Zentralkorrelationsfunktionen für das N3LO Potential in allen Spin-Isospin-Kanälen eine größere Reichweite haben als die entsprechenden Korrelationsfunktionen des AV18 Potentials. Außerdem liegen die Maxima der N3LO Zentralkorrelationsfunktionen in allen Kanälen bei größeren Abständen. Als Grund hierfür wurde die schwächere kurzreichweitige Abstoßung des N3LO Potentials im Vergleich zum AV18 Potential genannt, was auf die starken Impulsabhängigkeiten des N3LO Potentials zurückzuführen ist. Die Amplituden der AV18 Tensorkorrelationsfunktionen sind größer als die der N3LO Tensorkorrelationsfunktionen. Hierfür konnte jedoch in dieser Arbeit keine anschauliche Erklärung gefunden werden. In Kapitel 6 wurden die optimalen Korrelationsfunktionen des N3LO Potentials verwendet um No-Core Schalenmodell Berechnungen für ${}^3\text{H}$ und ${}^4\text{He}$ mit dem N3LO Potential durchzuführen. Die resultierenden Grundzustandsenergien liegen leicht unterhalb der experimentellen Werte. Durch Variation der Reichweitenparameter I_{R_+} und I_ϑ müsste man nun die berechneten Energien an die experimentellen Werte anpassen, was Gegenstand zukünftiger Arbeiten sein könnte.

A Mathematica-Code

Energieminimierung im Kanal $S=0, T=0, L=1, J=1$

```
(*Matrix des unkorrelierten AV18-Potentials, E=20 MeV, S=0, T=0, L1=1, L2=1, J=1*)
VMat0011 =
  Drop[Drop[Import["av18_120\\av18_hwhO020_JLLSTMT111000.meho", "Table"], 6], -2];
VMat0011 = Take[VMat0011, 120, 120];

(*Konstanten*)
EE = 20; (*Energie in MeV*);
hbarC = 197.326968; (*in MeVfm *)
mN = 938.91897; (*Nukleonenmasse in MeV*)
nu = mN EE / (hbarC^2 4); (*nu in 1/fm^2*)

(*Ortsdarstellung der HO-Eigenfunktionen*)
norm[n_, l_] = Sqrt[Sqrt[2 nu^3 / Pi] (2^(n + 2 l + 3) n! nu^l) / ((2 n + 2 l + 1)!!)];
phi[n_, l_, r_] = norm[n, l] r^l Exp[-nu r^2] LaguerreL[n, l + 1 / 2, 2 nu r^2];

(*Matrix der unkorrelierten kinetischen Energie mit L1=1, L2=1*)
TMat0011 = Table[-hbarC^2 / mN norm[n1, l1] norm[n2, l2] / (nu Sqrt[2 nu])
  (Gamma[n1 + 5 / 2] / n1! ((-1 / 2 n1 - 5 / 8) KroneckerDelta[n1, n2] -
  1 / 4 n1 KroneckerDelta[n1 - 1, n2]) +
  Gamma[n2 + 5 / 2] / n2! ((-1 / 4 n2 KroneckerDelta[n1, n2 - 1])),
  {n1, 0, Length[VMat0011] - 1}, {n2, 0, Length[VMat0011] - 1}];

(*Modul zur Bestimmung des Energieerwartungswertes*)
M[alpha_, beta_, gamma_] := Module[{ME},

  (*Parametrisierung der Korrelationsfunktion R+ *)
  RpII[r_] = r + alpha (1 - Exp[-(r / gamma)]) Exp[-Exp[r / beta]];
  RRpII[r_] = RpII[r] / r Sqrt[D[RpII[r], r]];

  (*Integrand für die Matrixelemente des Korrelators*)
  hoInt[r_, n1_] = r^2 RRpII[r] Conjugate[phi[n1, 1, RpII[r]]] phi[0, 1, r];

  (*Liste der Korrelatormatrixelemente*)
  homList = Table[NIntegrate[Hold[hoInt[r, n1]], {r, 0, 10},
    MaxRecursion -> 16, AccuracyGoal -> 7], {n1, 0, Length[VMat0011] - 1}];

  (*Energieerwartungswert*)
  ME = homList.(TMat0011 + VMat0011).homList;
  Return[ME];
]
```

Energieminimierung im Kanal S=0, T=1, L=0, J=0

```
(*Matrix des unkorrelierten AV18-Potentials, E=20 MeV, S=0, T=1, L1=0, L2=0, J=0*)
VMat0100 =
  Drop[Drop[Import["av18_120\\av18_hwhO020_JLLSTMT000010.meho", "Table"], 6] - 2];
VMat0100 = Take[VMat0100, 120, 120];

(*Konstanten*)
EE = 20; (*Energie in MeV*);
hbarC = 197.326968; (*in MeVfm *)
mN = 938.91897; (*Nukleonenmasse in MeV*)
nu = mN EE / (hbarC^2 4) (*nu in 1/fm^2*);

(*Ortsdarstellung der HO-Eigenfunktionen*)
norm[n_, l_] = Sqrt[Sqrt[2 nu^3 / Pi] (2^(n + 2 l + 3) n! nu^l) / ((2 n + 2 l + 1)!!)];
phi[n_, l_, r_] = norm[n, l] r^l Exp[-nu r^2] LaguerreL[n, l + 1/2, 2 nu r^2];

(*Matrix der unkorrelierten Kinetischen Energie mit L1=0, L2=0 *)
TMat0100 = Table[-hbarC^2 / mN norm[n1, 0] norm[n2, 0] / Sqrt[2 nu]
  (Gamma[n1 + 3/2] / n1! ((-1/2 n1 - 3/4) KroneckerDelta[n1, n2 - 1] -
  (n1 + 3/4) KroneckerDelta[n1, n2] - n1/2 KroneckerDelta[n1 - 1, n2])),
  {n1, 0, Length[VMat0100] - 1}, {n2, 0, Length[VMat0100] - 1}];

(*Modul zur Bestimmung des Energieerwartungswertes*)
M[alpha_, beta_, eta_] := Module[{ME},

  (*Parametrisierung der Korrelationsfunktion R+ *)
  RpI[r_] = r + alpha (r / beta)^eta Exp[-Exp[r / beta]];
  RRpI[r_] = RpI[r] / r Sqrt[D[RpI[r], r]];

  (*Integrand für die Matrixelemente des Korrelators*)
  hoInt[r_, n1_] = r^2 RRpI[r] Conjugate[phi[n1, 0, RpI[r]]] phi[0, 0, r];

  (*Liste der Korrelatormatrixelemente*)
  homList = Table[NIntegrate[Hold[hoInt[r, n1]], {r, 0, 10},
    MaxRecursion -> 16, AccuracyGoal -> 7], {n1, 0, Length[VMat0100] - 1}];

  (*Energieerwartungswert*)
  ME = homList.(TMat0100 + VMat0100).homList;
  Return[ME];
]
```

Energieminimierung im Kanal $S = 1, T = 0, L = 0, J = 1$

```
(*Matrizen des unkorrelierten AV18-Potentials, E=20 MeV,
S=1, T=0, J=1 für die verschiedenen Werte von L1 und L2*)
(*L1=0, L2=0*)
VMat1000 =
  Drop[Drop[Import["av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT100100.meho", "Table"], 6], -2];
VMat1000 = Take[VMat1000, 120, 120];

(*L1=0, L2=2*)
VMat1002 =
  Drop[Drop[Import["av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT102100.meho", "Table"], 6], -2];
VMat1002 = Take[VMat1002, 120, 120];

(*L1=2, L2=2*)
VMat1022 =
  Drop[Drop[Import["av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT122100.meho", "Table"], 6], -2];
VMat1022 = Take[VMat1022, 120, 120];

(*Konstanten*)
EE = 20; (*Energie in MeV*);
hbarC = 197.326968; (*in MeVfm *)
mN = 938.91897; (*Nukleonmasse in MeV*)
nu = mN EE / (hbarC^2 4) (*nu in 1/fm^2*);

(*Ortsdarstellung der HO-Eigenfunktionen*)
norm[n_, l_] = Sqrt[Sqrt[2 nu^3 / Pi] (2^(n + 2 l + 3) n! nu^l) / ((2 n + 2 l + 1)!!)];
phi[n_, l_, r_] = norm[n, l] r^l Exp[-nu r^2] LaguerreL[n, l + 1 / 2, 2 nu r^2];

(*Matrizen der unkorrelierten kinetischen Energie*)
(*L1=0 L2=0*)
TMat1000 = Table[-hbarC^2 / mN norm[n1, 0] norm[n2, 0] / Sqrt[2 nu]
  (Gamma[n1 + 3 / 2] / n1! ((-1 / 2 n1 - 3 / 4) KroneckerDelta[n1, n2 - 1] -
  (n1 + 3 / 4) KroneckerDelta[n1, n2] - n1 / 2 KroneckerDelta[n1 - 1, n2]),
  {n1, 0, Length[VMat1000] - 1}, {n2, 0, Length[VMat1000] - 1}];

(*L1=2 L2=2*)
TMat1022 = Table[-hbarC^2 norm[n1, 2] norm[n2, 2] / (nu^2 Sqrt[2 nu])
  (1 / 8 Gamma[n1 + 7 / 2] / n1!
  ((-2 n1 - 7 / 2) KroneckerDelta[n1, n2] - n1 KroneckerDelta[n1 - 1, n2]) -
  1 / 8 Gamma[n2 + 7 / 2] / n2! (n2 KroneckerDelta[n1, n2 - 1])),
  {n1, 0, Length[VMat1000] - 1}, {n2, 0, Length[VMat1000] - 1}];
```

```

(*Modul zur Bestimmung des Energieerwartungswertes*)
M[alpha_, beta_, eta_, alpha1_, beta1_, gamma1_] := Module[{ME},

  (*Parametrisierung der Korrelationsfunktion R+ *)
  RpI[r_] = r + alpha (r / beta) ^ eta Exp[-Exp[r / beta]];
  RRpI[r_] = RpI[r] / r Sqrt[D[RpI[r], r]];

  (*Parametrisierung der Tensor Korrelationsfunktion theta*)
  theta[r_] = alpha1 (1 - Exp[-r / gamma1]) Exp[-Exp[r / beta1]];
  thetaJ[J_, r_] = 3 Sqrt[J (J + 1)] theta[r];

  (*Integranden für Matrixelemente der Korrelatoren*)
  (*L1=0, L2=0*)
  hoInt00[r_, n1_] =
    r^2 RRpI[r] Conjugate[phi[n1, 0, RpI[r]]] phi[0, 0, r] Cos[thetaJ[1, RpI[r]]];

  (*L1=2, L2=0*)
  hoInt20[r_, n1_] =
    r^2 RRpI[r] Conjugate[phi[n1, 2, RpI[r]]] phi[0, 0, r] Sin[thetaJ[1, RpI[r]]];

  (*Listen der Korrelatormatrixelemente*)
  homList00 = Table[NIntegrate[Hold[hoInt00[r, n1]], {r, 0, 10},
    MaxRecursion -> 16, AccuracyGoal -> 7], {n1, 0, Length[VMat1000] - 1}];
  homList20 = Table[NIntegrate[Hold[hoInt20[r, n1]], {r, 0, 10},
    MaxRecursion -> 16, AccuracyGoal -> 7], {n1, 0, Length[VMat1000] - 1}];

  (*Energieerwartungswert*)
  ME = homList00.TMat1000.homList00 + homList00.VMat1000.homList00 +
    homList00.VMat1002.homList20 + homList20.Transpose[VMat1002].homList00 +
    homList20.VMat1022.homList20 + homList20.TMat1022.homList20;

  Return[ME];
]

```

Energieminimierung im Kanal $S = 1, T = 1, L = 0, J = 0, 1, 2$

```
(*Matrizen des unkorrelierten AV18-Potentials, E=20 MeV,
S=1, T=1, für die verschiedenen Werte von L1, L2 und J*)

(*J=0, L1=1, L2=1*)
VMat01111 =
  Drop[Drop[Import["av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT011110.meho", "Table"], 6], -2];
VMat01111 = Take[VMat01111, 120, 120];

(*J=1, L1=1, L2=1*)
VMat11111 =
  Drop[Drop[Import["2av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT111110.meho", "Table"], 6], -2];
VMat11111 = Take[VMat11111, 120, 120];

(*J=2, L1=1, L2=1*)
VMat21111 =
  Drop[Drop[Import["2av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT211110.meho", "Table"], 6], -2];
VMat21111 = Take[VMat21111, 120, 120];

(*J=2, L1=1, L2=3*)
VMat21113 =
  Drop[Drop[Import["2av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT213110.meho", "Table"], 6], -2];
VMat21113 = Take[VMat21113, 120, 120];

(*J=2, L1=3, L2=3*)
VMat21133 =
  Drop[Drop[Import["2av18_120\\av18_hwHO020_JLLSTMT233110.meho", "Table"], 6], -2];
VMat21133 = Take[VMat21133, 120, 120];

(*Konstanten*)
EE = 20; (*Energie in MeV*);
hbarC = 197.326968; (*in MeVfm *);
mN = 938.91897; (*Nukleonenmasse in MeV*);
nu = mN EE / (hbarC^2 4) (*nu in 1/fm^2*);

(*Ortsdarstellung der HO-Eigenfunktionen*)
norm[n_, l_] = Sqrt[Sqrt[2 nu^3 / Pi] (2^(n + 2 l + 3) n! nu^l) / ((2 n + 2 l + 1)!)];
phi[n_, l_, r_] = norm[n, l] r^l Exp[-nu r^2] LaguerreL[n, l + 1 / 2, 2 nu r^2];

(*Matrizen der unkorrelierten kinetischen Energie *)
(*L1=1, L2=1*)
TMat1111 = Table[-hbarC^2 / mN norm[n1, 1] norm[n2, 1] / (nu Sqrt[2 nu])
  (Gamma[n1 + 5 / 2] / n1! ((-1 / 2 n1 - 5 / 8) KroneckerDelta[n1, n2] -
  1 / 4 n1 KroneckerDelta[n1 - 1, n2]) +
  Gamma[n2 + 5 / 2] / n2! (-1 / 4 n2 KroneckerDelta[n1, n2 - 1])),
  {n1, 0, Length[VMat01111] - 1}, {n2, 0, Length[VMat01111] - 1}];
```

```

(*L1=3, L2=3*)
TMat1133 = Table[hbarC^2 / mN 1 / (4 nu^3 Sqrt[2 nu]) norm[n1, 3] norm[n2, 3]
  (Gamma[n1 + 9 / 2] / n1! ((1 / 2 n1 + 9 / 8) KroneckerDelta[n1, n2] +
    1 / 4 n1 KroneckerDelta[n1 - 1, n2]) +
  Gamma[n2 + 9 / 2] / n2! (1 / 4 n2 KroneckerDelta[n2 - 1, n1]))
  , {n1, 0, Length[VMat01111] - 1}, {n2, 0, Length[VMat01111] - 1}];

(*Modul zur Bestimmung des Energieerwartungswertes*)
M[alpha_, beta_, gamma_, alphas_, betas_, gammas_] := Module[{ME},

  (*Parametrisierung der Korrelationsfunktion R+ *)
  RpII[r_] = r + alpha (1 - Exp[-r / gamma]) Exp[-Exp[r / beta]];
  RRpII[r_] = RpII[r] / r Sqrt[D[RpII[r], r]];

  (*Parametrisierung der Tensorkorrelationsfunktion theta*)
  theta[r_] = alphas (1 - Exp[-r / gammas]) Exp[-Exp[r / betas]];
  thetaJ[J_, r_] = 3 Sqrt[J (J + 1)] theta[r];

  (*Integranden für die Matrixelemente der Korrelatoren*)
  (*J=0/1, L1=1, L2=1*)
  hoInt011[r_, n1_] = r^2 RRpII[r] Conjugate[phi[n1, 1, RpII[r]]] phi[0, 1, r];

  (*J=2, L1=1, L2=1*)
  hoInt211[r_, n1_] =
    r^2 RRpII[r] Conjugate[phi[n1, 1, RpII[r]]] phi[0, 1, r] Cos[thetaJ[2, RpII[r]]];

  (*J=3, L1=3, L2=1*)
  hoInt231[r_, n1_] =
    r^2 RRpII[r] Conjugate[phi[n1, 3, RpII[r]]] phi[0, 1, r] Sin[thetaJ[2, RpII[r]]];

  (*Listen der Korrelatormatrixelemente*)
  homList011 = Table[NIntegrate[Hold[hoInt011[r, n1]], {r, 0, 10},
    MaxRecursion -> 16, AccuracyGoal -> 7], {n1, 0, Length[VMat01111] - 1}];
  homList211 = Table[NIntegrate[Hold[hoInt211[r, n1]], {r, 0, 10},
    MaxRecursion -> 16, AccuracyGoal -> 7], {n1, 0, Length[VMat01111] - 1}];
  homList231 = Table[NIntegrate[Hold[hoInt231[r, n1]], {r, 0, 10},
    MaxRecursion -> 16, AccuracyGoal -> 7], {n1, 0, Length[VMat01111] - 1}];

  (*Energieerwartungswert*)
  ME = 1 / 9 (homList011.(TMat1111 + VMat01111).homList011) +
    3 / 9 (homList011.(TMat1111 + VMat11111).homList011) +
    5 / 9 (homList211.(TMat1111 + VMat21111).homList211 +
    homList211.VMat21113.homList231 + homList231.Transpose[VMat21113].homList211 +
    homList231.(TMat1133 + VMat21133).homList231);

  Return[ME];
]

```

Literatur

- [1] R. Roth. Theoretische Kernphysik, Vorlesungsskript WS 2006/07
- [2] R. Roth. Die Methode der unitären Korrelatoren und ihre Anwendung auf kurzreichweitig abstoßende Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen, Diplomarbeit, TH Darmstadt, 1997
- [3] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, and J. Schnack. A unitary correlation operator method, Nucl. Phys. A 632, 61 (1998)
- [4] R. Roth, T. Neff, H. Hergert, and H. Feldmeier. Nuclear Structure based on Correlated Realistic Nucleon-Nucleon Potentials, Nucl. Phys. A 745, 3 (2004)
- [5] R. Roth, H. Hergert, P. Papakonstantinou, T. Neff, and H. Feldmeier. Matrix elements and few-body calculations within the unitary correlation operator method, Phys. Rev. C 72, 034002 (2005)
- [6] A. Zapp. Kernstruktur mit effektiven Dreiteilchenpotentialen, Diplomarbeit, TU Darmstadt, 2006
- [7] R. B. Wiringa, V.G.J. Stoks, and R. Schiavilla. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking, Phys. Rev. C 51, 38 (1995)
- [8] U. G. Meißner. Modern theory of nuclear forces, Nucl. Phys. A 751, 149 (2005)
- [9] E. Epelbaum. Few-nucleon forces and systems in chiral effective field theory, Progress in Particle and Nuclear Physics 57, 654 (2006)
- [10] H. Hergert. Correlated NN-Interactions and Phenomenological Corrections for Nuclear Structure Calculations, Diplomarbeit, TU Darmstadt, 2004
- [11] P. Navratil, et al. Few-Nucleon Systems in A Translationally Invariant Harmonic Oscillator Basis, Phys. Rev. C 61, 044001 (2000)
- [12] S. C. Pieper. Quantum Monte Carlo Calculations of Light Nuclei, Nucl. Phys. A 751, 516 (2005)
- [13] R. Machleidt and I. Slaus. The Nucleon-Nucleon Interaction, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 27, R69 (2001)
- [14] G. Audi and A.H.Wapstra. The 1995 update to the atomic mass evaluation, Nucl. Phys. A 595, 409 (1995)
- [15] B.Barrett, et al. Ab Initio Calculations of Light Nuclei, Nucl. Phys. News 13 (2003)
- [16] S.Reinhardt. Comparison and Connection of the Similarity Renormalization Group and the Unitary Correlation Operator Method, Diplomarbeit, TU Darmstadt (2008)

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Robert Roth für die hervorragende Betreuung bedanken. Er hat mich mit viel Geduld durch diese Arbeit begleitet und hat damit nicht zuletzt entscheidend dazu beigetragen, dass mir die Arbeit an diesem Thema sehr viel Spaß gemacht hat.

Ich danke Dr Heiko Hergert für das Korrekturlesen dieser Arbeit und für die Hilfe bei den unterschiedlichsten Problemen. Außerdem möchte ich mich bei Sabine Reinhardt bedanken, die immer ein offenes Ohr für meine Fragen hatte.

Ich danke meinem Kommilitonen Joachim, der mir bei vielen technischen sowie physikalischen Problemen oft eine große Hilfe war.

Ein ganz besonderer Dank geht an meine Eltern Christel Wagner und Bruno Wagner für ihre moralische und finanzielle Unterstützung vor und während meines Studiums.

Vielen Dank an Saranya für ihr Verständnis und ihre Geduld und dafür, dass sie mein Leben außerhalb der Uni so schön macht.

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

Ort

Datum

Unterschrift