

Die Exponential-S-Methode in der Impulsdarstellung

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von

Markus Stauf
aus Stuttgart

2007

Tag der mündlichen Prüfung:	22.12.2006
Dekan:	Prof. Dr. N. Schopohl
1.Berichterstatter:	Prof. Dr. H. Müther
2.Berichterstatter:	Prof. Dr. Th. Gutsche

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Formalismus der Greenschen Funktionen	7
2.1	Vakuumentamplitude	7
2.2	Nomenklatur	8
2.3	Zeitentwicklungsoperator	10
2.4	Definition der Einteilchen-Greensfunktion	14
2.5	Berechnung der Greensfunktion	17
2.6	Wick'sche Theorem	18
2.7	Lehmann-Darstellung	19
2.8	Dyson-Gleichung	21
2.9	Brückner-Hartree-Fock	24
3	Die e^S-Methode	29
4	Lösung der e^S-Gleichungen	39
4.1	Lösung der $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen in der SUB 2-Näherung	39
4.2	Lösung der $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen in der SUB 3-Näherung	62

5	Ergebnisse	73
5.1	Energie und Radius der Atomkerne	73
5.2	Zwei-Teilchen Korrelationen	76
5.3	Ein-Teilchen Dichten	88
6	Zusammenfassung	96

Kapitel 1

Einleitung

Eines der wichtigen Ziele der theoretischen Kernphysik ist es, mit einer realistischen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung die experimentell meßbaren Observablen von Atomkernen wie Bindungsenergie und Radius vorherzusagen. Dabei versteht man unter einer realistischen Wechselwirkung ein Modell der NN-Wechselwirkung dessen Parameter an die Daten der freien NN-Streuung angepasst sind.

Historisch war der wichtigste Schritt zum besseren Verständnis der Atomkerne die Entdeckung des Schalenmodells. Unter Einbeziehung der Spin-Bahn-Wechselwirkung war es mit dem Schalenmodell erstmals möglich die magischen Zahlen durch den Schalenabschluß zu erklären und den Kernspin des Grundzustandes vorherzusagen. Das Schalenmodell ist jedoch eher eine empirische Beschreibung, als eine mikroskopisch fundierte Theorie.

Ein erster Schritt zur Verbesserung des Modells war es dann, das Hartree-Fock-Verfahren, das bei der Berechnung von Elektronenbindungsenergien in Atomen sehr erfolgreich war, auf die Kernphysik zu übertragen. Es zeigte sich jedoch schnell, dass die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung Eigenschaften, wie z. B. die starke Repulsion bei kurzen Nukleon-Nukleon-Abständen, hat, die einen reinen "mean-field"-Ansatz scheitern lassen. Denn eine Hartree-Fock-Rechnung mit einer realistischen NN-Wechselwirkung liefert ungebundene endliche Kerne [1],[2].

Eine konsistente Verbesserung von Hartree-Fock stellt das Brückner-Hartree-Fock-Verfahren dar. Hierbei wird die nackte Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung durch eine effektive ersetzt. Eine solche effektive Wechselwirkung,

auch G-Matrix genannt, erhält man aus der Lösung der Bethe-Goldstone-Gleichung. Die Bethe-Goldstone-Gleichung ist das Analogon der Lippmann-Schwinger-Gleichung in Materie. Die Nukleonen des Kerns können so aneinander in Zwischenzustände über der Fermienergie gestreut werden. Letztendlich wird dadurch das "hardcore"-Problem der nackten Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung beseitigt.

Mit der Brückner-Hartree-Fock-Theorie konnte man erstmals physikalisch sinnvolle Vorhersagen über den Radius und die Bindungsenergie von Kernen machen. Allerdings ist es nicht möglich Bindungsenergie und Radius simultan richtig zu berechnen. Für realistische Wechselwirkungen erhält man allenfalls eine der beiden Observablen korrekt. Die mit vielen verschiedenen realistischen Wechselwirkungen erzielten Observablen für Radius und Energie liegen auf der "Coester-Bande", die nicht durch den experimentell meßbaren Punkt richtiger Bindungsenergie und richtigem Radius führt, siehe Figur 26 in [1] für endliche Kerne und [3] für Kernmaterie.

Mit phänomenologischen Potentialen wie den Skyrme- und Gogny-Wechselwirkungen ist es möglich den Sättigungspunkt richtiger Energie und Dichte zu bestimmen. Beide Potentiale bestehen aus verschiedenen Operatoren die mit Potentialfunktionen und Parametern versehen werden: die Potentialfunktionen bei den Skyrme-Wechselwirkungen sind Deltafunktionen wobei die Reduktion eines ursprünglichen Drei-Teilchen-Potential-Terms zu einer dichteabhängigen Potentialfunktion führt. Bei der Gogny-Wechselwirkung wird eine endliche Reichweite der Wechselwirkung durch den Ansatz von Gaussfunktionen beschrieben. Damit ergibt sich auch eine Verbesserung bei der Beschreibung von Paar-Korrelationen.

Alle realistischen Wechselwirkungen bauen auf dem Ein-Boson-Austausch-Modell auf und werden im langreichweitigen Bereich durch eine Ein-Pion-Austausch-Wechselwirkung beschrieben. Sie unterscheiden sich aber in ihrer Behandlung der mittlereichweitigen Anziehung und der kurzreichweitigen Abstossung:

Beim Paris-Potential [4] wird der mittlereichweitige Beitrag zur Nukleon-Nukleon Streuamplitude durch Zwei-Pion-Austausch mit Hilfe von Dispersionstheorie behandelt, und benutzt dann eine lokale Potential-Darstellung mit Hilfe von statischen Yukawa-Funktionen. Der ω -Meson Austausch bei kurzen Abständen ist im Drei-Pion-Austausch enthalten und ein abstossender core wird eingeführt durch das abrupte Abschneiden dieser Teile beim Nukleonabstand von $r \sim 0.8$ fm. Bei kurzen Abständen ist diese Wechselwirkung durch einen konstanten (aber energieabhängigen) weichen Kern gegeben.

Die Bonn-Potentiale [5] bauen auf mehreren Ein-Boson-Austausch-Wechselwirkungen auf und berechnen die Zwei-Pion-Austausch-Wechselwirkung in Störungstheorie. Der Zwei-Pion-Austausch-Beitrag wird durch einen energieunabhängigen Austausch eines σ Mesons beschrieben. Formfaktoren (mit typischen Formfaktor Massen von 1 - 2 GeV) schneiden das Potential bei kurzen Abständen ab. Die kurzreichweitige Abstossung erfolgt durch ω -Meson Austausch.

Beim CD-Bonn Potential [6],[7] wird die Behandlung der Ein-Boson-Austausch-Amplituden verfeinert und eine Ladungsabhängigkeit des Potentials zugelassen. Die Boson-Austausch Potentiale sind am einfachsten in der Impulsdarstellung definiert und enthalten nicht-lokale Strukturen die von den kovarianten Amplituden herrühren.

Die Nijmegen Potentiale [8] bestehen aus mehreren Ein-Boson-Austausch-Wechselwirkungen (mit einer lokalen und einer nichtlokalen Version) in der die Wechselwirkungsparameter der schwereren Mesonen von den Streuwellen abhängen. Bei sehr kurzen Abständen werden die Potentiale durch Exponentialfaktoren regularisiert.

Die lokalen Argonne-Potentiale [9] bestehen aus der Ein-Pion-Austausch-Wechselwirkung regularisiert bei kurzen Abständen und einer phänomenologischen Parametrisierung durch 14 Operatoren und entsprechenden Potentialfunktionen (Argonne v14) bei mittleren und kurzen Abständen. Die Potentialfunktionen im kurzreichweitigen Bereich bis $r \sim 0.5$ fm sind Woods-Saxon-Funktionen.

Auf die auch mit Greenschen Funktionen herleitbare Hartree-Fock-Theorie und ihre Verbesserung, die Brückner-Hartree-Fock-Theorie wird in Kapitel 2 eingegangen.

Da die Brückner-Hartree-Fock-Theorie auch keine befriedigenden Ergebnisse liefert, ist man natürlich darum bemüht, Verbesserungen zu finden. Eine mögliche Verbesserung ist es, komplizierte Beiträge zur Selbstenergie durch Diagramme höherer Ordnung mitzunehmen.

In dieser Arbeit soll aber ein anderer Ansatz, nämlich die e^S -Methode (oder coupled cluster method) untersucht werden. Hierbei macht man sich zu Nutze, daß man die exakte Vielteilchenwellenfunktion in Abhängigkeit einer unkorrelierten Wellenfunktion wie etwa einer Slaterdeterminante mit Oszillatorfunktionen darstellen kann. Dadurch wird das Vielteilchenproblem auf die Bestimmung der Transformation zwischen unkorrelierter und exakter Wellenfunktion verlagert. Dadurch ist zunächst nichts gewonnen. Es ist jedoch möglich bestimmte, physikalisch sinnvolle Vereinfachungen zu machen und zu einer Näherungslösung des Vielteilchenproblems zu gelangen. Insbeson-

dere existiert eine Näherungslösung der e^S -Methode, die weitestgehend mit der Brückner-Hartree-Fock-Theorie übereinstimmt, so daß man hoffen kann durch Verfeinerungen immer bessere Resultate zu erzielen, da man weiß, dass die e^S -Methode ohne Näherungen der exakten Lösung des Vielteilchenproblems entspricht.

Die Theorie der e^S -Methode wird in Kapitel 3 erläutert.

In Kapitel 4 wird dargelegt, wie man die sich ergebenden nichtlinearen Gleichungen numerisch lösen kann.

Kapitel 5 ist den Ergebnissen der verschiedenen Näherungen gewidmet, eine Zusammenfassung findet sich in Kapitel 6.

Kapitel 2

Formalismus der Greenschen Funktionen

In diesem Kapitel soll eine kleine Übersicht über verschiedene Methoden der Vielteilchentheorie, die in der Kernphysik angewendet werden, gegeben werden, insbesondere möchte ich in diesem Kapitel die Greensfunktion und die Vakuumamplitude behandeln. Beide haben eine Reihenentwicklung (dargestellt durch Diagramme) und erlauben es die Grundzustandsenergie näherungsweise zu bestimmen. Ein Beispiel wird die Hartree-Fock-Näherung sein, sowie die Brückner-Hartree-Fock-Näherung, wo eine bestimmte Klasse von Diagrammen, die Leiterdiagramme, bis zur unendlichen Ordnung aufsummiert wird.

2.1 Vakuumamplitude

Definition:

Nehmen wir an, dass das Vielteilchensystem zur Zeit $t=0$ im Grundzustand Φ_0 ist. Wenn es keine Wechselwirkung der Teilchen untereinander gibt, ist die Vielteilchenwellenfunktion zur Zeit t $\Phi_0 e^{-i\omega_0 t}$, wobei $\hbar\omega_0$ die Grundzustandsenergie des nicht wechselwirkenden Vielteilchensystems ist. Wenn zur Zeit $t=0$ die Wechselwirkung der Teilchen untereinander eingeschaltet wird, macht das Vielteilchensystem Übergänge zu allen möglichen angeregten Zuständen. Wir fragen nun nach der Wahrscheinlichkeitsamplitude=Vakuumamplitude, dass das Vielteilchensystem zur Zeit t im (zeitent-

wickelten) Grundzustand $\Phi_0 e^{-i\omega_0 t}$ ist:

$$\text{Vakuumentwicklung} = \langle \Phi_0 e^{-i\omega_0 t} | \Psi(t) \rangle \quad (2.1)$$

$\Psi(t)$ ist die exakte Wellenfunktion zur Zeit t und ergibt sich aus Φ_0 durch Anwendung des Zeitentwicklungsoperators:

$$\Psi(t) = \hat{U}(t) \Phi_0 \quad (2.2)$$

Die Reihenentwicklung für den Zeitentwicklungsoperator ergibt (nach Umformungen, Einzelheiten später) eine Reihenentwicklung für die Vakuumentwicklung und die Grundzustandsenergie E_0 des wechselwirkenden Vielteilchensystems.

2.2 Nomenklatur

Haben wir ein N -Teilchensystem bei dem die Teilchen untereinander durch 2-Körperkräfte wechselwirken, so haben wir einen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_2 = \hat{T}_{\text{kin}} + \hat{V}_2 = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \hat{V}_2 \quad (2.3)$$

$$\hat{V}_2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{V}_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \quad (2.4)$$

Ziel ist es nun ein Einteilchenpotential $\hat{U} = \sum_{i=1}^N \hat{U}(\vec{r}_i)$ zu finden, so dass die Lösung zu $\hat{H}_0 + \hat{U} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r}_i)$ bekannt ist:

$$\left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r}_i) \right) \varphi_k(\vec{r}_i) = \epsilon_k \varphi_k(\vec{r}_i) \quad (2.5)$$

und $\hat{V}_2 - \hat{U} = \hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{v}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ als kleine Störung betrachtet werden kann.

Die Vielteilchenzustände zu $\hat{H}_0 + \hat{U}$ sind dann die Slaterdeterminanten

$$\Phi = \begin{vmatrix} \varphi_{k_1}(\vec{r}_1) & \varphi_{k_1}(\vec{r}_2) & \cdots & \varphi_{k_1}(\vec{r}_N) \\ \varphi_{k_2}(\vec{r}_1) & \varphi_{k_2}(\vec{r}_2) & \cdots & \varphi_{k_2}(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{k_N}(\vec{r}_1) & \varphi_{k_N}(\vec{r}_2) & \cdots & \varphi_{k_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.6)$$

weil somit die totale Wellenfunktion antisymmetrisch ist, wie nach dem Pauliprinzip verlangt wird.

Man kann die Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ nach dem vollständigen System der Slaterdeterminanten entwickeln, bzw. nach allen möglichen Konfigurationen $|a_1 b_2 c_3 d_4 \dots\rangle$. $a=1$ wenn der erste Zustand besetzt ist, $a=0$ wenn der erste Zustand nicht besetzt ist. $b=1$ wenn der zweite Zustand besetzt ist, $b=0$ wenn der zweite Zustand nicht besetzt ist, usw. Die Operatoren kann man sich in diesem Konfigurationsbild so vorstellen, daß sie eine Anfangskonfiguration in eine Linearkombination aller möglichen Konfigurationen überführen.

Mit den Fermionerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren a_i^\dagger, a_i :

$$a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (1 - n_i) \Theta_i |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (2.7)$$

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i \Theta_i |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (2.8)$$

$$\Theta_i = (-1)^{\sum_{j < i} n_j} \quad (2.9)$$

ergibt sich für \hat{H} :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{\infty} \epsilon_i a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|v|kl\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.10)$$

$$= \hat{H}_0 + \hat{U} + \hat{V} \quad (2.11)$$

Der Phasenfaktor Θ_i folgt aus dem Pauliprinzip. Bei uns numerieren k_1, \dots, k_n in Gleichung (2.6) und i, j, k, l in Gleichung (2.10) die Einteilchenniveaus geordnet nach den Energien

$$\epsilon_{k_1} < \epsilon_{k_2} < \dots < \epsilon_{k_n}.$$

Die Ortsdarstellung der Besetzungsdarstellung sind die Slaterdeterminanten. Die erzeugten Zustände werden hierbei der Reihenfolge nach von unten nach oben aufgefüllt.

Beispiel: $a_3^\dagger a_1^\dagger |0\rangle$ erzeugt aus dem Vakuum, zwei Teilchen, eins im untersten Zustand und eins im dritten Zustand von unten; die Ortsdarstellung lautet:

$$\Phi_{31}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{vmatrix} \varphi_3(\vec{r}_1) & \varphi_3(\vec{r}_2) \\ \varphi_1(\vec{r}_1) & \varphi_1(\vec{r}_2) \end{vmatrix} = -\Phi_{13}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Wie in der Ortsdarstellung $\Phi_{13}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\Phi_{31}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ gilt, gilt $a_3^\dagger a_1^\dagger |0\rangle = -a_1^\dagger a_3^\dagger |0\rangle$

Allgemein gelten die Antikommutatorrelationen

$$\{a_\mu, a_\nu^\dagger\} = a_\mu a_\nu^\dagger + a_\nu^\dagger a_\mu = \delta_{\mu\nu} \quad (2.12)$$

$$\{a_\mu, a_\nu\} = \{a_\mu^\dagger, a_\nu^\dagger\} = 0 \quad (2.13)$$

für die Fermionerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

2.3 Zeitentwicklungsoperator

Man startet die Herleitung der Störungsentwicklung für den Zeitentwicklungsoperator mit der zeitabhängigen Schrödingergleichung ($\hbar=1$) im normalen Schrödingerbild;

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle^s = \hat{H}^s |\Psi(t)\rangle^s = (\hat{H}_0^s + \hat{H}_1^s(t)) |\Psi(t)\rangle^s \quad (2.14)$$

$$\hat{H}_0^s = \sum_{i=1}^N \hat{H}_0^s(i) = \sum_{i=1}^N -\frac{1}{2m} \nabla_i^2 + U(\vec{r}_i) \quad (2.15)$$

in der der Hamiltonoperator \hat{H}_0^s als zeitunabhängig angenommen wurde. (Anmerkung: wenn im weiteren Operatoren, kets, bras usw. ohne Index auftauchen ist das Schrödingerbild gemeint). Die Eigenfunktionen zu \hat{H}_0^s sind bereits bekannt. Der Zeitentwicklungsoperator den man zu berechnen gedenkt, ist der Operator, der beschreibt, wie sich der Zustand $|\Psi(t)\rangle^s$ im Laufe der Zeit aus dem Zustand $|\Psi(t_0)\rangle^s$ ergibt.

$$|\Psi(t)\rangle^s = \hat{U}^s(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle^s \quad (2.16)$$

wobei

$$\hat{U}^s(t, t_0) = e^{-i\hat{H}^s(t-t_0)} \quad (2.17)$$

ist.

Zur Vereinfachung der Mathematik führt man nun den Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild ein. Das Wechselwirkungsbild ist definiert über:

$$\hat{O}^I(t) = e^{i\hat{H}_0^s t} \hat{O}^s e^{-i\hat{H}_0^s t} \quad (2.18)$$

für einen beliebigen Operator \hat{O}^s im normalen Schrödingerbild und

$$|\Psi(t)\rangle^I = e^{i\hat{H}_0^s t} |\Psi(t)\rangle^s \quad (2.19)$$

für einen beliebigen Zustandsvektor $|\Psi(t)\rangle^s$ im normalen Schrödingerbild. Die Matrixelemente von quantenmechanischen Operatoren sollen natürlich unabhängig sein von dem Bild in dem sie berechnet werden, was sich auch ergibt:

$${}^I\langle\Psi(t)|\hat{O}^I(t)|\Psi(t)\rangle^I = {}^s\langle\Psi(t)|e^{-i\hat{H}_0^s t}\hat{O}^I(t)e^{i\hat{H}_0^s t}|\Psi(t)\rangle^s \quad (2.20)$$

$$= {}^s\langle\Psi(t)|e^{-i\hat{H}_0^s t}e^{i\hat{H}_0^s t}\hat{O}^s e^{-i\hat{H}_0^s t}e^{i\hat{H}_0^s t}|\Psi(t)\rangle^s \quad (2.21)$$

$$= {}^s\langle\Psi(t)|\hat{O}^s|\Psi(t)\rangle^s \quad (2.22)$$

Durch diese Transformation entfällt in (2.14) die Abhängigkeit von \hat{H}_0^I und man erhält

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle^I = \hat{H}_1^I(t)|\Psi(t)\rangle^I \quad (2.23)$$

wobei der Index I für Interaction-Picture steht. Aus Gleichung (2.16) wird dann

$$|\Psi(t)\rangle^I = \hat{U}^I(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle^I \quad (2.24)$$

Setzt man (2.24) in (2.23) ein, so erhält man eine Differentialgleichung für den Zeitentwicklungsoperator \hat{U}^I , nämlich

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^I(t, t_0) = \hat{H}_1^I(t)\hat{U}^I(t, t_0) \quad (2.25)$$

Diese Differentialgleichung ist äquivalent zu der Integralgleichung

$$\hat{U}^I(t, t_0) = \hat{U}^I(t_0, t_0) - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}_1^I(t_1)\hat{U}^I(t_1, t_0) \quad (2.26)$$

die man durch Iteration lösen kann, wenn man beachtet, dass $\hat{U}^I(t_0, t_0) = 1$ ist:

$$\hat{U}^I(t, t_0) = 1 - \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}_1^I(t_1) + i^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}_1^I(t_1)\hat{H}_1^I(t_2) + \dots \quad (2.27)$$

Mit der Definition des Zeitordnungsoperators T kann man dieses Ergebnis für \hat{U}^I kompakter angeben.

In zweiter Quantisierung werden die quantenmechanischen Operatoren durch Zustandserzeugungs- und -vernichtungsoperatoren dargestellt. T ist

ein Operator, dessen Wirkung es ist, die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von links nach rechts nach den Zeiten zu ordnen, zu denen sie wirken. Der Operator der als erstes ein Teilchen erzeugt oder vernichtet, steht dann ganz rechts, derjenige, der als letzter an der Reihe ist, ganz links. Beim Vertauschen von je zwei Operatoren muß dann mit einem Faktor (-1) multipliziert werden, der sich aus den Antikommutatorrelationen, die für Fermionen gelten ergibt. Also

$$T(\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)) = \begin{cases} \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) & , \quad t_1 \geq t_2 \\ (-1)^m \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1) & , \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (2.28)$$

mit m = Zahl der Vertauschungen der Fermionerzeugungsoperatoren und Fermionvernichtungsoperatoren in $\hat{H}(t_1)$, $\hat{H}(t_2)$ um $\hat{H}(t_1)$ und $\hat{H}(t_2)$ in die zeitgeordnete Reihenfolge zu bringen. Für \hat{U}^I ergibt sich also:

$$\hat{U}^I(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T\{\hat{H}_1^I(t_1) \dots \hat{H}_1^I(t_n)\} \quad (2.29)$$

Die Gleichung (2.29) kann man rein formal umschreiben in

$$\hat{U}^I(t, t_0) = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left(\int_{t_0}^t dt \hat{H}_1^I(t) \right)^n \quad (2.30)$$

$$= T e^{(-i \int_{t_0}^t dt \hat{H}_1^I(t))} \quad (2.31)$$

Setzt man in die Vakuumamplitude $R(t - t_0)$

$$R(t - t_0) = e^{i\omega_0(t-t_0)} \langle \Phi_0 | \hat{U}(t - t_0) | \Phi_0 \rangle \quad (2.32)$$

$$= e^{i\omega_0(t-t_0)} \langle \Phi_0 | e^{-i\hat{H}_0 t} e^{+i\hat{H}_0 t} \hat{U}(t - t_0) e^{-i\hat{H}_0 t} e^{+i\hat{H}_0 t} | \Phi_0 \rangle \quad (2.33)$$

$$= \langle \Phi_0 | \hat{U}^I(t - t_0) | \Phi_0 \rangle^I \quad (2.34)$$

die Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators ein, so folgt eine Reihenentwicklung für die Vakuumamplitude $R(t - t_0)$:

$$R(t - t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n \langle \Phi_0 | T\{\hat{H}_1^I(t_1) \dots \hat{H}_1^I(t_n)\} | \Phi_0 \rangle^I \quad (2.35)$$

Man kann jeden Term in der Reihenentwicklung für $R(t - t_0)$ graphisch darstellen und dann ausrechnen mit bestimmten Übersetzungsregeln.

Mit dem "linked cluster theorem"

$$E_0 = \omega_0 + \lim_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)} i \frac{d}{dt} \sum \left\{ \begin{array}{l} \text{alle linked Graphen von der} \\ \text{Reihenentwicklung von } R(t - t_0) \end{array} \right\} \quad (2.36)$$

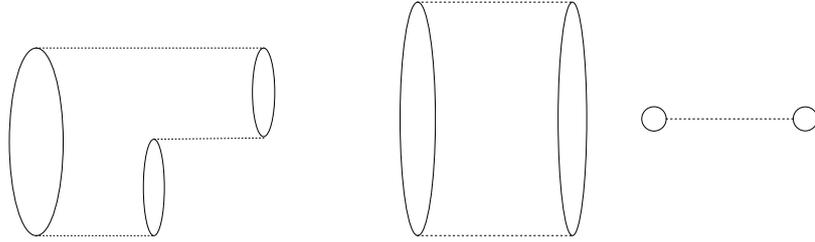


Abbildung 2.1: Die linke Hälfte zeigt ein linked Diagramm dritter Ordnung. Die rechte Seite zeigt ein unlinked Diagramm.

(wobei η infinitesimal, aber so daß $\eta \times \infty = \infty$)

bekommt man die Grundzustandsenergie E_0 des wechselwirkenden Vielteilchensystems. Die graphische Reihenentwicklung ist in [10] Kapitel 5 dargestellt.

Linked Graphen sind Graphen die an einem Stück verbunden sind. Unlinked Graphen sind Graphen die aus zwei oder mehr unverbundenen einzelnen intern linked Graphen bestehen. Beispiel für ein linked Diagramm dritter Ordnung ist in Abbildung 2.1 linke Hälfte dargestellt, während die rechte Seite ein unlinked Diagramm zeigt.

Nimmt man bei einem Vielteilchensystem nur die ersten zwei gelinkten Terme der Vakuumamplitude (siehe Abbildung 2.2) zur Berechnung von E_0 , so ergibt sich die Hartree-Fock-Energie $E_{0(HF)}$:

$$E_{0(HF)} = \omega_0 + \frac{1}{2} \sum_{k,l < F} (V_{klkl} - V_{lkkl}) \quad (2.37)$$

$$= \sum_{k < F} \varepsilon_k + \frac{1}{2} \sum_{k,l < F} (V_{klkl} - V_{lkkl}) \quad (2.38)$$

F=Fermikante



Abbildung 2.2: Die ersten beiden verbundenen Terme der Vakuumamplitude ergeben die Hartree-Fock-Energie $E_{0(HF)}$.

$$\hat{H}_0(i)\varphi_k(\vec{r}_i) = \varepsilon_k\varphi_k(\vec{r}_i) \quad (2.39)$$

wobei

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{H}_0(i) = \sum_{i=1}^N -\frac{(\hbar)^2}{2m} \nabla_i^2 + \hat{U}(\vec{r}_i) \quad (2.40)$$

N=Zahl der Teilchen

$$V_{klmn} = \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \varphi_k^*(\vec{r})\varphi_l^*(\vec{r}')\hat{v}(\vec{r},\vec{r}')\varphi_m(\vec{r})\varphi_n(\vec{r}') \quad (2.41)$$

2.4 Definition der Einteilchen-Greensfunktion

Bevor wir die Einteilchen-Greensfunktion definieren müssen wir die Begriffsbildung klären: Abbildung 2.3 zeigt den Grundzustand eines nichtwechselwirkenden Fermisystems in bekannter Darstellung, (die ε_i sind die Einteilchenenergien von \hat{H}_0 , ε_F ist die Fermienergie, die p_i sind die Einteilchenzustände von \hat{H}_0).

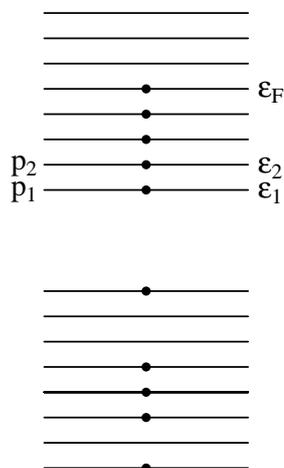


Abbildung 2.3: Der obere Teil ist der Grundzustand eines nichtwechselwirkenden Vielteilchensystems in bekannter Darstellung, der untere Teil ist der angeregte Zustand eines nichtwechselwirkenden Vielteilchensystems in bekannter Darstellung.

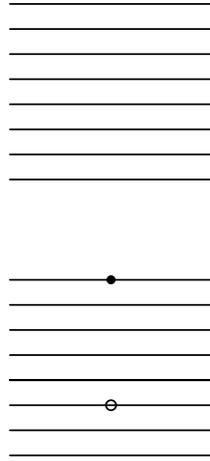


Abbildung 2.4: Der obere Teil ist der Grundzustand eines nichtwechselwirkenden Vielteilchensystems im Teilchen-Loch-Bild, der untere Teil zeigt einen angeregten Zustand eines nichtwechselwirkenden Vielteilchensystems im Teilchen-Loch-Bild: der Punkt stellt einen besetzten Zustand (oberhalb der Fermikante) und der offene Kreis stellt einen unbesetzten Zustand (unterhalb der Fermikante) dar.

Im Teilchen-Loch-Bild sind im Grundzustand keine Teilchen vorhanden, d. h. keine Zustände besetzt die Energien größer als ε_F haben. Im Teilchen-Loch-Bild sind im Grundzustand keine Löcher vorhanden, d.h es gibt keine freien Zustände, die Energien kleiner als ε_F haben. Das ist im oberen Teil von Abbildung 2.4 graphisch dargestellt. Ein angeregter Zustand im Teilchen-Loch-Bild besteht aus einem besetzten Zustand oberhalb der Fermikante=Teilchen (in Abbildung 2.4 ist das durch einen Punkt dargestellt) und einem freien Zustand unterhalb der Fermikante=Loch (in Abbildung 2.4 ist das durch einen offenen Kreis dargestellt). Das ist im unteren Teil von Abbildung 2.4 graphisch dargestellt.

Weil die Erzeugung eines Loches p_n bedeutet, daß dem System die Energie ε_{p_n} entzogen wird und weil die Wellenfunktion des Loches, die gleiche ist wie die des entfernten Teilchens

$$\Psi(\vec{r}, t)^{\text{Loch}} = \varphi_{p_n}(\vec{r})e^{-iE(t-t_0)} = \varphi_{p_n}(\vec{r})e^{-i(-\varepsilon_{p_n})(t-t_0)} = \varphi_{p_n}(\vec{r})e^{-i(\varepsilon_{p_n})(t_0-t)} \quad (2.42)$$

kann man ein Loch als ein in der Zeit zurücklaufendes Teilchen beschreiben. Man definiert nun einen retardierten Propagator bzw. Greensfunktion für Teilchen (im Teilchen-Lochbild) $iG^+(k_2, k_1, t_2, t_1)$, [$t_2 > t_1$], als die Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass wenn zur Zeit t_1 ein Teilchen im Zustand

$\varphi_{k_1}(\vec{r})$ dem wechselwirkenden Vielteilchensystem hinzugefügt wird, dass das System zur Zeit t_2 im Grundzustand plus ein Teilchen im Zustand $\varphi_{k_2}(\vec{r})$ ist. Genauso definiert man einen avancierten Propagator oder Greensfunktion für Löcher (im Teilchen-Lochbild) $iG^-(k_2, k_1, t_2, t_1)$, [$t_2 < t_1$], als (-1)mal der Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass wenn zur Zeit t_2 ein Teilchen im Zustand $\varphi_{k_2}(\vec{r})$ dem wechselwirkenden Vielteilchensystem im Grundzustand entfernt wird (d. h. ein Loch im Zustand $\varphi_{k_2}(\vec{r})$ wird hinzugefügt), dass das System dann zur Zeit t_1 im Grundzustand minus einem Teilchen im Zustand $\varphi_{k_1}(\vec{r})$ ist, (d.h ein Loch im Zustand $\varphi_{k_1}(\vec{r})$ wird hinzugefügt).

Mit der mathematischen Definition des Propagators oder Greensfunktion

$$G(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i \frac{{}^H\langle \Psi_0 | T \{ \hat{a}_{k_2}^H(t_2) \hat{a}_{k_1}^{H\dagger}(t_1) \} | \Psi_0 \rangle^H}{{}^H\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle^H} \quad (2.43)$$

hat man sowohl G^+ als auch G^- . Die Definition des Propagators erfolgte im Heisenbergbild, d. h. $|\Psi_0\rangle^H = |\Psi_0(t=0)\rangle^H$ ist der im Heisenbergbild zeitunabhängige Grundzustand des wechselwirkenden Vielteilchensystems zur Zeit $t=0$.

$$\hat{a}_{k_1}^{H\dagger}(t_1) = \text{Erzeugungsoperator im Heisenbergbild} \quad (2.44)$$

$$= e^{i\hat{H}t_1} \hat{a}_{k_1}^\dagger e^{-i\hat{H}t_1} \quad (2.45)$$

$$\hat{a}_{k_2}^H(t_2) = \text{Vernichtungsoperator im Heisenbergbild} \quad (2.46)$$

$$= e^{i\hat{H}t_2} \hat{a}_{k_2} e^{-i\hat{H}t_2} \quad (2.47)$$

Betrachtet man z. B. $t_2 > t_1$ (${}^H\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle^H = 1$):

$$G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i {}^H\langle \Psi_0 | e^{i\hat{H}t_2} \hat{a}_{k_2} e^{-i\hat{H}t_2} e^{i\hat{H}t_1} \hat{a}_{k_1}^\dagger e^{-i\hat{H}t_1} | \Psi_0 \rangle^H \quad (2.48)$$

$$= \langle B | A \rangle \quad (2.49)$$

mit $\langle B |$ und $|A\rangle$ als:

$$\langle B | = \langle \Psi_0 | e^{i\hat{H}t_2} \hat{a}_{k_2} \quad (2.50)$$

$$|A\rangle = e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)} \hat{a}_{k_1}^\dagger e^{-i\hat{H}t_1} | \Psi_0 \rangle \quad (2.51)$$

(weil ${}^H\langle \Psi_0 | = \langle \Psi_0 |$ und $|\Psi_0\rangle^H = |\Psi_0\rangle$). $|A\rangle$ ist der Zustand des Systems zur Zeit t_2 , wenn zur Zeit t_1 ein Teilchen im Zustand ϕ_{k_1} addiert wurde. $|B\rangle = \hat{a}_{k_2}^\dagger e^{-i\hat{H}t_2} | \Psi_0 \rangle$ ist der Zustand des Systems zur Zeit t_2 , wenn zur Zeit t_2 ein Teilchen im Zustand ϕ_{k_2} addiert wurde.

2.5 Berechnung der Greensfunktion

Zur Berechnung der Greensfunktion brauchen wir den Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ zur Zeit $t = 0$. Schreiben wir den gesamten Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (2.52)$$

als $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{H}_0 + e^{-\varepsilon|t|} \hat{H}_1$ so wissen wir die Lösung für $|t| \rightarrow \infty : |\phi_0\rangle$. Die Wechselwirkung \hat{H}_1 wird wegen $\varepsilon \rightarrow 0$ adiabatisch eingeschaltet und zur Zeit $t = 0$ ist $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{H}_0 + e^{-\varepsilon|t|} \hat{H}_1$ exakt \hat{H} . Damit ist die Grundzustandslösung zur Zeit $t = 0$ das gesuchte $|\Psi_0\rangle$.

Das Theorem von Gell-Mann und Low besagt, dass falls die Grösse

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_{I\varepsilon}(0, -\infty) |\phi_0\rangle}{\langle \phi_0 | \hat{U}_{I\varepsilon}(0, -\infty) | \phi_0 \rangle}$$

in jeder Ordnung Störungstheorie existiert

$$|\Psi_0\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{U}_{I\varepsilon}(0, -\infty) |\phi_0\rangle \quad (2.53)$$

eine Lösung zu

$$\hat{H} |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle \quad (2.54)$$

ist, (E_0 ist die Grundzustandsenergie des wechselwirkenden Vielteilchensystems). Aus dem Zusammenhang zwischen Wechselwirkungsbild und Heisenbergbild, sowie dem angegebenen Theorem von Gell-Mann und Low, erhält man einen Zusammenhang zwischen dem Erwartungswert eines Operators im Heisenbergbild und demselben Erwartungswert im Wechselwirkungsbild.

$$\frac{\langle \Psi_0 | \hat{O}^H(t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \phi_0 | \hat{U}_{I\varepsilon}(\infty, t) \hat{O}^I(t) \hat{U}_{I\varepsilon}(t, -\infty) | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | \hat{U}_{I\varepsilon}(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle} \quad (2.55)$$

Eine Verallgemeinerung auf zeitgeordnete Produkte (siehe z. B. [11]) und Einsetzen der Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators liefert die Reihenentwicklung der Greensfunktion:

$$\begin{aligned} G(k_2, k_1, t - t') &= -i \frac{{}^H\langle \Psi_0 | T \{ \hat{a}_{k_2}^H(t) \hat{a}_{k_1}^{H\dagger}(t') \} | \Psi_0 \rangle^H}{{}^H\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle^H} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n e^{-i\varepsilon(|t_1| + \dots + |t_n|)} \\ &\quad \langle \phi_0 | T \{ \hat{H}_1^I(t_1) \dots \hat{H}_1^I(t_n) \hat{a}_{k_2}^I(t) \hat{a}_{k_1}^{I\dagger}(t') \} | \phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.56)$$

Zum Ausrechnen von zeitgeordneten Operatorprodukten benutzt man das Wick'sche Theorem.

2.6 Wick'sche Theorem

Zunächst einige Vorbetrachtungen und Vordefinitionen. Die Fermionerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren haben im Wechselwirkungsbild folgende Gestalt:

$$\hat{a}_j^I(t) = \hat{a}_j e^{-i\varepsilon_j t} \quad (2.57)$$

$$\hat{a}_j^{I\dagger}(t) = \hat{a}_j^\dagger e^{i\varepsilon_j t} \quad (2.58)$$

Im Grundzustand des nichtwechselwirkenden Vielteilchensystems (Hamiltonoperator= \hat{H}_0) sind alle Einteilchenzustände ε_i bis zur Fermienergie ε_F besetzt. Für Einteilchenzustände i oberhalb der Fermikante ($\varepsilon_i > \varepsilon_F$) erzeugt \hat{c}_i^\dagger ein Teilchen und vernichtet \hat{c}_i ein Teilchen im Teilchen-Lochbild. Für Einteilchenzustände j unterhalb der Fermikante ($\varepsilon_j < \varepsilon_F$) erzeugt \hat{c}_j ein Loch und vernichtet \hat{c}_j^\dagger ein Loch im Teilchen-Lochbild.

Das Normalprodukt von Teilchen- und Loch- Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist folgendermaßen definiert:

$$N(MNOP\dots) = (-1)^\gamma OP\dots MN\dots \quad (2.59)$$

Dabei werden alle (Teilchen- und Loch-) Erzeugungsoperatoren nach links gebracht (die Operatoren O,P) und alle (Teilchen- und Loch-) Vernichtungsoperatoren nach rechts gebracht (die Operatoren M,N). γ ist die Zahl der Vertauschungen um diese Reihenfolge zu erreichen. Die Kontraktion zweier Fermionen(-Erzeugungs- oder -Vernichtungs-)operatoren ist definiert mit dem Zeitordnungsoperator T als:

$$\overline{QP} = \langle \phi_0 | T(Q, P) - N(Q, P) | \phi_0 \rangle \quad (2.60)$$

$$= \langle \phi_0 | T(Q, P) | \phi_0 \rangle \quad (2.61)$$

weil im Grundzustand $|\phi_0\rangle$ keine Teilchen und keine Löcher vorhanden sind. Speziell ergibt sich im Wechselwirkungsbild

$$\overline{\hat{a}_j^I(t) \hat{a}_k^{I\dagger}(t')} = \begin{cases} \delta_{jk} e^{-i\varepsilon_j(t-t')}, & \varepsilon_j > \varepsilon_F \text{ und } t > t' \\ -\delta_{jk} e^{-i\varepsilon_j(t-t')}, & \varepsilon_j \leq \varepsilon_F \text{ und } t' > t \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.62)$$

Außer $\overline{\hat{a}_k^{I\dagger}(t') \hat{a}_j^I(t)} = -\overline{\hat{a}_j^I(t) \hat{a}_k^{I\dagger}(t')}$ sind alle Kontraktionen null. Mit der Definition des Normalproduktes von Kontraktionen:

$$N\{\overline{MN\dots RO P\dots}\} = (-)^\beta \overline{MO} N\{N\dots RP\dots\}. \quad (2.63)$$

wobei β die Zahl der Permutationen ist um M und O ganz nach links zu bringen, läßt sich das Wicksche Theorem formulieren:

$$\begin{aligned}
T\{UVW\dots XYZ\} &= N\{UVW\dots XYZ\} + N\{\overleftarrow{UV}W\dots XYZ\} \\
&+ \dots + N\{UVW\dots X\overleftarrow{YZ}\} + N\{\overleftarrow{UV}W\dots \overleftarrow{XY}\} \\
&+ \dots + N\{\overleftarrow{UVW}\overleftarrow{\dots}\overleftarrow{XYZ}\} + \dots
\end{aligned} \tag{2.64}$$

Das Wicksche Theorem kann man auch in Worten ausdrücken:

Das zeitgeordnete Produkt von Feldoperatoren ist gleich dem Normalprodukt, plus dem Normalprodukt mit einer Kontraktion auf alle möglichen Arten, plus dem Normalprodukt mit zwei Kontraktionen auf alle möglichen Arten, plus..., plus dem Normalprodukt in dem alle (möglichen) Kontraktionen auf alle möglichen Arten ausgeführt werden (=vollkontrahierten Terme).

Bei der Berechnung der Greensfunktion bzw. der Vakuumamplitude als Vakuumserwartungswerte von zeitgeordneten Operatoren (Gleichung(2.36) bzw. Gleichung(2.56)) spielen nach dem Wickschen Theorem, Gleichung (2.64), nur die nichtverschwindenden vollkontrahierten Terme eine Rolle. Mit den Feynman-Diagrammen kann man die vollkontrahierten Terme graphisch darstellen und mit Übersetzungsvorschriften ("den Feynmanregeln") analytisch ausrechnen. Mehr noch: Das Problem alle vollkontrahierten Terme zu finden, übersetzt sich in der Diagrammtechnik:

alle Feynmangraphen zu finden, was graphisch geschehen kann.

Bei der Greenschen Funktion heben sich die unlinked Graphen im Zähler mit $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle$ im Nenner auf, wodurch wie bei der Vakuumamplitude, nur die linked Graphen berücksichtigt werden müssen.

Diese linked Diagramm Entwicklungen sind wichtig, denn sie schliessen voneinander unabhängige Prozesse die nichts voneinander wissen aus.

2.7 Lehmann-Darstellung

Mit der Lehmann-Darstellung der Einteilchen-Greensfunktion kann man alle Energieeigenwerte E_n^{N-1}, E_n^{N+1} des $N - 1$ - und $N + 1$ -Teilchensystems in bezug auf die Grundzustandsenergie unseres N -Teilchensystems E_n^N ausrechnen. Die Lehmann-Darstellung kann man aus der Gleichung (2.56) bestimmen, wobei der Nenner eins gesetzt wurde, weil im Zähler nur noch linked

Diagramme berücksichtigt werden.

$$\begin{aligned}
G(k_2, k_1, t - t') &= -i^H \langle \Psi_0 | T \{ \hat{a}_{k_2}^H(t) \hat{a}_{k_1}^{H\dagger}(t') \} | \Psi_0 \rangle^H \\
&= -i \{ \Theta(t - t')^H \langle \Psi_0 | \hat{a}_{k_2}^H(t) \hat{a}_{k_1}^{H\dagger}(t') | \Psi_0 \rangle^H \\
&\quad - \Theta(t' - t)^H \langle \Psi_0 | \hat{a}_{k_1}^{H\dagger}(t') \hat{a}_{k_2}^H(t) | \Psi_0 \rangle^H \} \\
&= -i \{ \Theta(t - t') \langle \Psi_0 | e^{i\hat{H}t} \hat{a}_{k_2} e^{-i\hat{H}(t-t')} \hat{a}_{k_1}^\dagger e^{-i\hat{H}t'} | \Psi_0 \rangle \\
&\quad - \Theta(t' - t) \langle \Psi_0 | e^{i\hat{H}t'} \hat{a}_{k_1}^\dagger e^{-i\hat{H}(t'-t)} \hat{a}_{k_2} e^{-i\hat{H}t} | \Psi_0 \rangle \} \quad (2.65) \\
&= -i \{ \Theta(t - t') e^{iE_0^N(t-t')} \langle \Psi_0 | \hat{a}_{k_2} e^{-i\hat{H}(t-t')} \hat{a}_{k_1}^\dagger | \Psi_0 \rangle \\
&\quad - \Theta(t' - t) e^{iE_0^N(t'-t)} \langle \Psi_0 | \hat{a}_{k_1}^\dagger e^{-i\hat{H}(t'-t)} \hat{a}_{k_2} | \Psi_0 \rangle \}
\end{aligned}$$

Die Stufenfunktion $\Theta(t)$ ist definiert durch:

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.66)$$

Dazu muß man in Gleichung (2.65) die Vollständigkeitsrelation (des Fockraums) einschieben:

$$1 = |0\rangle \langle 0| + \sum_n |\psi_n^1\rangle \langle \psi_n^1| + \cdots + \sum_n |\psi_n^N\rangle \langle \psi_n^N| + \cdots \quad (2.67)$$

wobei in $|\Psi_n^N\rangle$ n dem n 'ten Eigenzustand von H und N der Teilchenzahl entspricht; $|0\rangle$ ist der Vakuumzustand ohne Teilchen. Desweiteren benötigt man die Integraldarstellung der Stufenfunktion.

$$\Theta(\pm t) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \mp \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega \pm i\eta}. \quad (2.68)$$

Hat man diese beiden Formeln in Gleichung (2.65) eingesetzt und führt die Fouriertransformation über $(t-t')$ durch:

$$G(k_2, k_1, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int d(t - t') e^{i\omega(t-t')} G(k_2, k_1, t - t') \quad (2.69)$$

so erhält man die Lehmann-Darstellung der Greensfunktion (für ein System mit diskretem Spektrum)

$$\begin{aligned}
G(k_2, k_1, \omega) &= \sum_n \frac{\langle \psi_0^N | \hat{a}_{k_2} | \psi_n^{N+1} \rangle \langle \psi_n^{N+1} | \hat{a}_{k_1}^\dagger | \psi_0^N \rangle}{\omega - (E_n^{N+1} - E_0^N) + i\eta} + \\
&+ \sum_m \frac{\langle \psi_0^N | \hat{a}_{k_1}^\dagger | \psi_m^{N-1} \rangle \langle \psi_m^{N-1} | \hat{a}_{k_2} | \psi_0^N \rangle}{\omega - (E_0^N - E_m^{N-1}) - i\eta}. \quad (2.70)
\end{aligned}$$

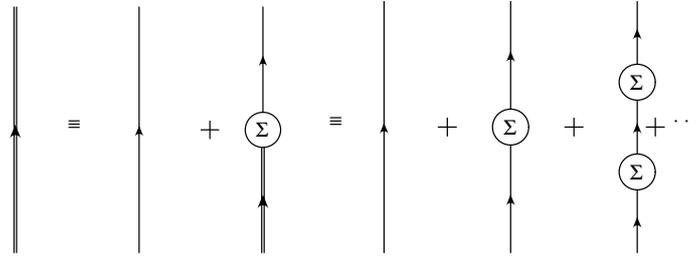


Abbildung 2.5: Anmerkung: der Einfachpfeil steht für die freie Greensfunktion eines nichtwechselwirkenden Vielteilchensystems. Der Doppelpfeil steht für die Greensfunktion eines wechselwirkenden Vielteilchensystems. Die Summe Σ steht für eine (unendliche) Summe über irreduzible Diagramme, weshalb Σ irreduzible Selbstenergie heißt.

Die Energieeigenwerte E_n^{N-1} , E_n^{N+1} des $(N-1)$ - und $(N+1)$ - Teilchensystems in bezug auf die Grundzustandsenergie E_0 unseres N -Teilchensystems sind also die Pole der Greensfunktion.

2.8 Dyson-Gleichung

Man kann die graphische Darstellung der Reihenentwicklung der Greensfunktion, siehe Abbildung (2.5), als iterative Lösung einer Gleichung, der Dysongleichung, erhalten.

Die Selbstenergie besteht nur aus Diagrammen ohne ein- und auslaufende Linien, die zwischen Teilchen oder Lochlinien eingefügt werden können. Die irreduzible Selbstenergie nimmt nur die Selbstenergiegraphen, die man nicht durch Zerschneiden einer G^0 -Linie in andere Selbstenergiegraphen aufteilt. In Abbildung (2.6) sind Selbstenergiegraphen dargestellt. Die Bilder sind aus [10] S. 152. Mit der anschaulichen Definition der Greenschen Funktion können wir G^+ bestimmen (G^- geht genauso). Wir betrachten es eindimensional, für ein N -Teilchensystem ergibt sich dasselbe. Wir kennen die Lösung zu:

$$\hat{H}_0 \varphi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \varphi_k(\vec{r})$$

mit

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})$$

Die Wellenfunktion zur Zeit t_1 sei $\varphi_{k_1}(\vec{r})$; zur Zeit t_2 ist sie dann $\Psi(\vec{r}, t_2) = \varphi_{k_1}(\vec{r})e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2-t_1)}$. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude, daß das Teilchen zum Zeitpunkt t_2 im Zustand $\varphi_{k_2}(\vec{r})$ ist, ist gerade die Komponente von $\Psi(\vec{r}, t_2)$ entlang von $\varphi_{k_2}(\vec{r})$:

$$\int d^3\vec{r}\Psi(\vec{r}, t_2)\varphi_{k_2}^*(\vec{r}) = e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2-t_1)} \int d^3\vec{r}\varphi_{k_1}(\vec{r})\varphi_{k_2}^*(\vec{r})$$

$$\int d^3\vec{r}\Psi(\vec{r}, t_2)\varphi_{k_2}^*(\vec{r}) = e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2-t_1)}\delta_{k_2k_1}$$

Also ergibt sich für $G_0^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = G_0^+(k_2, t_2 - t_1)$:

$$G_0^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i\Theta(t_2 - t_1)e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2-t_1)}\delta_{k_2k_1}$$

$$= \begin{cases} -ie^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2-t_1)}\delta_{k_2k_1} & \text{für } t_2 > t_1 \\ 0 & \text{für } t_2 \leq t_1 \end{cases} \quad (2.71)$$

Schreibt man den freien Propagator in der Lehmanndarstellung, so erhält man

$$G_0(k, \omega) = \frac{\Theta(k - F)}{\omega - \varepsilon_k + i\eta} + \frac{\Theta(F - k)}{\omega - \varepsilon_k - i\eta} \quad (2.72)$$

wobei in Gleichung (2.72) F den letzten besetzten Einteilchenzustand bezeichnet. Im (k, ω) -Raum ist die Dysongleichung in Abbildung (2.7) dargestellt, bzw. in Formeln:

$$G(k, \omega) = G_0(k, \omega) + G(k, \omega) \sum(k, \omega)G_0(k, \omega) \quad (2.73)$$

Nach Umformung ergibt sich:

$$G(k, \omega) = (G_0(k, \omega)^{-1} - \sum(k, \omega))^{-1}$$

$$= (\omega - \varepsilon_k - \sum(k, \omega) + i\delta_k)^{-1} \quad (2.74)$$

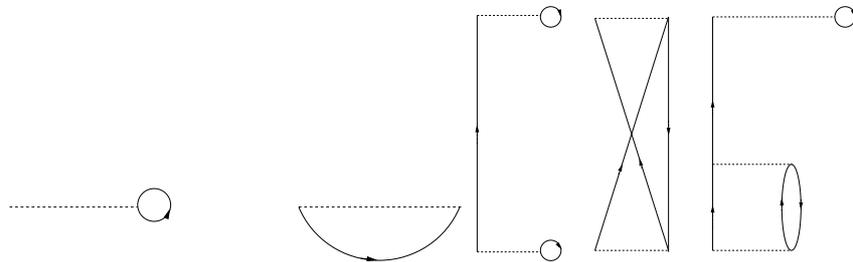


Abbildung 2.6: Die Bilder 1,2,4 sind irreduzible Selbstenergiegraphen. Die Bilder 3,5 sind (wie 1,2,4) Selbstenergiegraphen, aber keine irreduziblen Selbstenergiegraphen.

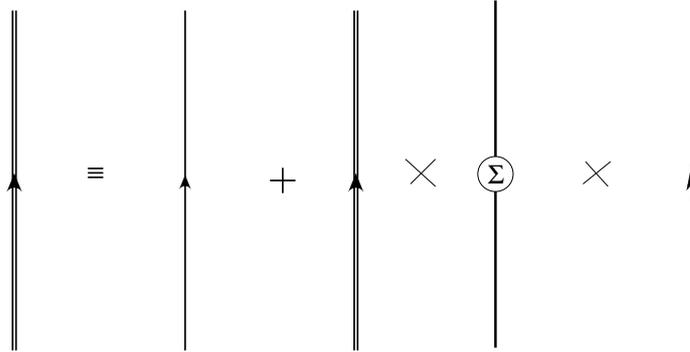


Abbildung 2.7: Die Dyson-Gleichung im (Impuls,Frequenz)-Raum: der Doppelpfeil stellt die Greensfunktion $G(k, \omega)$ dar, der Einfachpfeil stellt die freie Greensfunktion $G_0(k, \omega)$ dar und $\Sigma(k, \omega)$ ist die irreduzible Selbstenergie für den Impuls k und die Frequenz ω .

Mit

$$\begin{aligned} \delta &= \eta \quad \text{für } k > F \\ \delta &= -\eta \quad \text{für } k \leq F \end{aligned} \tag{2.75}$$

An dieser Beziehung kann man die physikalische Bedeutung der Dysongleichung ablesen. Neben dem sonst üblichen Energienenner $\omega - \varepsilon_k$, der nur die freie Propagation eines Teilchens unter Einfluß des Hamiltonoperators \hat{H}_0 der kinetischen Energie und des Einteilchenpotentials $U(\vec{r})$ beschreibt hat man noch den Term $\Sigma(k, \omega)$, der zusätzlich mitgenommen wird und als potentielle Energie eines effektiven Potentials aufgefaßt werden muß, das die Zweiteilchenwechselwirkung $v(\vec{r}, \vec{r}')$ berücksichtigt. Dieses effektive Potential wirkt auf ein Teilchen mit Energie ω im Einteilchenzustand φ_k . Bemerkenswert hierbei ist das dieses Potential explizit energieabhängig ist.

Bei der Hartree-Fock-Näherung nimmt man nur die ersten zwei Feynmangraphen von der irreduziblen Selbstenergie (siehe Abbildung 2.8).



Abbildung 2.8: Die Selbstenergie in der Hartree-Fock-Näherung.

Berechnung dieses Graphen mit den Feynmanregeln (siehe [10]) liefert für $G(k, \omega)$:

$$G(k, \omega) = (\omega - \varepsilon_k - \sum_{l < F} (V_{klkl} - V_{lkkl}) + i\delta_k)^{-1} \quad (2.76)$$

mit

$$\sum_{l < F} V_{klkl} = \int d^3 \vec{r} \varphi_k^*(\vec{r}) \left\{ \sum_{l < F} \int d^3 \vec{r}' |\varphi_l(\vec{r}')|^2 v(\vec{r}, \vec{r}') \right\} \varphi_k(\vec{r}) \quad (2.77)$$

$$\sum_{l < F} V_{lkkl} = \int d^3 \vec{r} \varphi_k^*(\vec{r}) \sum_{l < F} \int d^3 \vec{r}' \varphi_l^*(\vec{r}') \varphi_l(\vec{r}) v(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_k(\vec{r}') \quad (2.78)$$

$\varepsilon_k^{HF} = \varepsilon_k + \sum_{l < F} V_{klkl} - V_{lkkl}$ ist die Hartree-Fock-Energie.

Diese Hartree-Fock-Energie bekommt man aus folgender Gleichung, der "Hartree-Fock-Gleichung" (durch Multiplikation von links mit $\varphi_k^*(\vec{r})$ und Integration über den ganzen Raum):

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\hbar^2}{2m} + U(\vec{r}) + \sum_{l < F} \int d^3 \vec{r}' |\varphi_l(\vec{r}')|^2 v(\vec{r}, \vec{r}') \right] \varphi_k(\vec{r}) \\ & - \sum_{l < F} \int d^3 \vec{r}' \varphi_l^*(\vec{r}') \varphi_l(\vec{r}) v(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_k(\vec{r}') = \varepsilon_k^{HF} \varphi_k(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.79)$$

Das Hartree-Fock-Potential ist das effektive Potential und ist ein nichtlokaler Operator:

$$\begin{aligned} \hat{v}_{HF} \varphi_k(\vec{r}) = & \left\{ \sum_{l < F} \int d^3 \vec{r}' |\varphi_l(\vec{r}')|^2 v(\vec{r}, \vec{r}') \right\} \varphi_k(\vec{r}) \\ & - \sum_{l < F} \int d^3 \vec{r}' \varphi_l^*(\vec{r}') \varphi_l(\vec{r}) v(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_k(\vec{r}') \end{aligned} \quad (2.80)$$

2.9 Brückner-Hartree-Fock

Für ein hardcore Potential $v(\vec{r}, \vec{r}')$, d. h. für ein Potential das für Abstände r kleiner als ein Radius r_{core} unendlich ist, divergieren die Matrixelemente V_{klkl} bzw. V_{lkkl} . Die Lösung ist, dass man die Reihenentwicklung der Grundzustandsenergie E_0 nach Potenzen von $v(\vec{r}, \vec{r}')$ durch eine andere Reihenentwicklung ersetzt.

Nuclear matter ist ein System geringer Dichte, d. h. die Reichweite a der Wechselwirkung $v(\vec{r}, \vec{r}')$ ist klein gegenüber dem mittleren Teilchenabstand r_0 : $a \ll r_0$

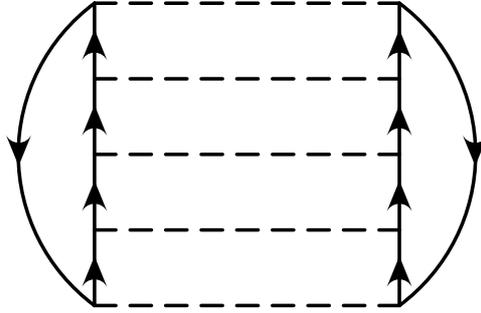


Abbildung 2.9: Ein Teilchenleiterdiagramm.

In einem solchen System geringer Dichte nehmen in jeder Ordnung Störungstheorie die Beiträge der einzelnen Graphen stark mit der Zahl der Lochlinien ab, weil mit jeder Lochlinie ein Faktor $(\frac{a}{r_0})^3$ verbunden ist. Nach [12] ergibt sich für $(\frac{a}{r_0})^3 \approx 0,14$. Die geringstmögliche Zahl von Lochlinien, nämlich 2, haben dabei stets die Teilchenleitern, wie in Abbildung(2.9) gezeigt.

Bei der Brückner-Hartree-Fock-Methode werden zu einem bestimmten $v(\vec{r}, \vec{r}')$ -Feynmandiagramm nun alle anderen Feynmandiagramme addiert wo v (entspricht $---$ in den Abbildungen) durch Teilchen-Leitern (entspricht \sim in den Abbildungen) ersetzt wurde, die in Abbildung (2.10) dargestellt sind. Diese unendliche Summe von v -Feynmangraphen, definiert nun ein einziges Feynmandiagramm wo v durch G ersetzt wurde. In Abbildung (2.11) ist diese unendliche Reihe angedeutet; und deren iterative Darstellung.

Man erhält nun eine Reihenentwicklung der Grundzustandsenergie E_0 indem v durch G ersetzt wurde.

In den (folgenden) Abbildungen ist die Verbindungslinie zwischen zwei Wechselwirkungen, die angezogene Greensfunktion (2.76).

Summiere ich in Abbildung (2.12) über alle Teilchen-Leitern so erhalte ich Abbildung (2.13). Abbildung (2.13) enthält bereits alle Diagramme der Summe über alle Teilchen-Leitern, insbesondere den Beitrag von (2.12). Ein Diagramm, wie (2.14), das (2.12) entspricht, wobei wir V durch G ersetzt haben führt also zu einer Doppelzählung und darf deshalb nicht berücksichtigt wer-

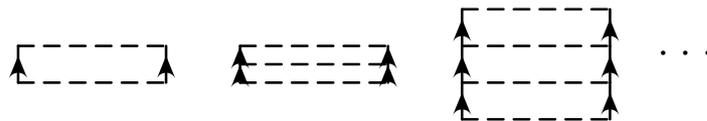


Abbildung 2.10: Verschiedene Teilchenleiterdiagramme.

$$\begin{aligned}
 & \text{wavy line} = \text{dashed line} + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots \\
 & = \text{dashed line} + \text{diagram 1}
 \end{aligned}$$

Abbildung 2.11: Im oberen Teil der Abbildung ist die Definition von G als unendliche Summe von v -Feynmandiagrammen dargestellt. Im unteren Teil der Abbildung ist die iterative Lösung dieser Gleichung dargestellt.

den.

Die Terme 1. Ordnung in der G -Matrix-Entwicklung der Grundzustandsenergie sind die Hartree-Fock-Terme und haben zwei Lochlinien, siehe Abbildung (2.15). Die Terme höherer Ordnung haben mindestens drei Lochlinien, so daß die zwei Hartree-Fock-Terme schon eine gute Näherung darstellen. Die diagrammatische Entwicklung der G -Matrix in Abbildung (2.11) kann man als Operatorentwicklung schreiben:

$$G(W) = v - v\left(\frac{Q}{e}\right)v + v\left(\frac{Q}{e}\right)v\left(\frac{Q}{e}\right)v - + \dots \quad (2.81)$$

$\langle ab|G(W)|cd\rangle$ sind dann die G -Matrixelemente.

Q ist der Pauli-Operator und wirkt auf den Produktzustand $|cd\rangle$ zweier Einteilchenzustände $|c\rangle$, $|d\rangle$ folgendermaßen:

$$Q|cd\rangle = \begin{cases} |cd\rangle & \text{wenn } |c\rangle \text{ und } |d\rangle \text{ Zustände oberhalb der Fermikante} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.82)$$

Der Energienenner e ist die Differenz von der kinetischen Energie der beiden in Zwischenzustände oberhalb der Fermi-Energie gestreuten Nukleonen minus ihrer Startenergie W , die gleich der Summe der Ein-Teilchenenergien $\varepsilon_{k_1}^{BHF}$ von Teilchen 1 und $\varepsilon_{k_2}^{BHF}$ von Teilchen 2 ist.

In der Brückner-Hartree-Fock Theorie wird nun das Einteilchenpotential \hat{U} das die Einteilchenenergien ε_k^{BHF} bestimmt, Gleichung (2.5), durch die G -

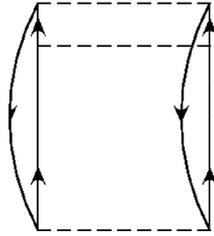


Abbildung 2.12: Ein Diagramm über das in Abbildung (2.13) summiert wird.

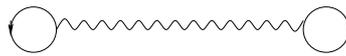


Abbildung 2.13: Eine Summation über alle Teilchen-Leitern von Abbildung (2.12) ergibt das dargestellte Diagramm.

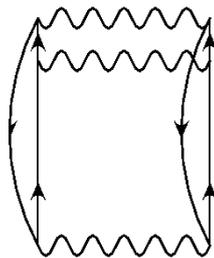


Abbildung 2.14: Diese Abbildung entspricht Abbildung (2.12), wobei wir V durch G ersetzt haben. Diese Abbildung entspricht der Summation über alle Teilchen-Leitern von Abbildung (2.12) und darf deshalb nicht noch extra berücksichtigt werden.

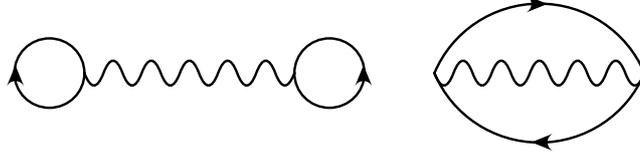


Abbildung 2.15: Die Hartree-Fock-Terme der Grundzustandsenergie.

Matrix bestimmt. Eine typische Wahl ist:

$$\langle \alpha | \hat{U} | \beta \rangle = \begin{cases} \sum_{\nu \leq F} \langle \alpha \nu | \frac{1}{2}(G(W_{\alpha\nu}) + G(W_{\beta\nu})) | \beta \nu \rangle & , \quad \alpha, \beta \leq F \\ \sum_{\nu \leq F} \langle \alpha \nu | G(W_{\alpha\nu}) | \beta \nu \rangle & , \quad \alpha \leq F, \beta > F \\ 0 & , \quad \alpha, \beta > F \end{cases} \quad (2.83)$$

Gleichung (2.81) erhält man als iterative Lösung der Bethe-Goldstone-Gleichung:

$$G(W) = v - v \left(\frac{Q}{e} \right) G(W) \quad (2.84)$$

Definiert man die korrelierte Wellenfunktion Ψ_{rs} durch die unkorrelierte Produktwellenfunktion:

$$\varphi_{rs}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_r(\vec{r}_1) \varphi_s(\vec{r}_2) = |cd\rangle \quad (2.85)$$

folgendermaßen:

$$\Psi_{rs} = \varphi_{rs} - \frac{Q}{e} G \varphi_{rs} \quad (2.86)$$

so folgt

$$v \Psi_{rs} = G \varphi_{rs} \quad (2.87)$$

und

$$\Psi_{rs} = \varphi_{rs} - \frac{Q}{e} v \Psi_{rs} \quad (2.88)$$

Die Auswertung von Gleichung (2.88) für die korrelierte Wellenfunktion zeigt, siehe z. B. [12], dass sie für ein realistisches Nukleon-Nukleon-Potential, für kleine Abstände der Nukleonen geringer ist als die unkorrelierte Wellenfunktion und im Kern-Bereich verschwindet; dafür ist sie natürlich für größere Abstände der Nukleonen größer als die unkorrelierte Wellenfunktion, aber für genügend große r gleicht sie der unkorrelierten Wellenfunktion (=healing property). Damit werden dann nach Gleichung (2.87) die G -Matrixelemente sogar für hardcore-Potentiale endlich und die Brückner-Hartree-Fock-Näherung der Grundzustandsenergie liefert eine endliche Energie.

Kapitel 3

Die e^S -Methode

Bei der sogenannten "Exponential S"-Methode wird die korrelierte Wellenfunktion Ψ relativ zu einer Slaterdeterminante ϕ als Referenzzustand dargestellt. Wir benutzen folgende Notation: ν bezeichnet besetzte Einteilchenniveaus. ρ bezeichnet die anderen Einteilchenniveaus. α, β bezeichnen alle Einteilchenniveaus dieses Referenzzustandes.

Ausgangspunkt ist die Schrödingergleichung für die Grundzustandsenergie E des Grundzustandes $|\Psi\rangle$:

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (3.1)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\alpha,\beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2} \langle \alpha_1 \alpha_2 | v | \beta_1 \beta_2 \rangle \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\beta_2} \hat{a}_{\beta_1} \\ &= \hat{T} + \hat{V} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Schreibt man $|\Psi\rangle$ als Entwicklung nach Slaterdeterminanten, nach Entwicklung einer Grundzustandsslaterdeterminante ϕ und allen möglichen n-Teilchen n-Loch Slaterdeterminanten

$$|\phi_{\rho_1 \dots \rho_n}(\nu_1 \dots \nu_n)\rangle = \hat{a}_{\rho_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\rho_n}^\dagger \hat{a}_{\nu_n} \dots \hat{a}_{\nu_1} |\phi\rangle \quad (3.3)$$

so macht man den Ansatz

$$|\Psi\rangle = e^{\hat{S}} |\phi\rangle \quad (3.4)$$

mit

$$\hat{S} = \sum_{n=1}^N \hat{S}_n \quad (3.5)$$

$$\hat{S}_n = \frac{1}{(n!)^2} \sum_{\rho_1 \cdots \rho_n, \nu_1 \cdots \nu_n} \hat{a}_{\rho_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{\rho_n}^\dagger \langle \rho_1 \cdots \rho_n | \hat{S}_n | \nu_1 \cdots \nu_n \rangle_A \hat{a}_{\nu_n} \cdots \hat{a}_{\nu_1} \quad (3.6)$$

$$| \nu_1 \cdots \nu_n \rangle_A = \sum_{\text{alle Permutationen P von } |\nu_1 \cdots \nu_n \rangle} (-1)^P | \nu_1 \cdots \nu_n \rangle \quad (3.7)$$

Die Amplituden \hat{S}_n beschreiben jeweils n-Teilchen n-Loch Amplituden relativ zum Referenzzustand ϕ , die kausal verknüpft sind. In der Darstellung der Diagramme bedeutet das, dass diese Amplituden durch vernetzte Anwendungen der Wechselwirkung entstehen, die sich in 'linked diagrams' ausdrückt. Für $n = 2$ gibt es aber neben 2 Teilchen - 2 Loch Anregungen, bei denen die 2 Nukleonen z.B. durch eine Wechselwirkung zwischen diesen Nukleonen angeregt worden sind, auch unverbundene 2 Teilchen - 2 Loch Anregungen, bei den zwei vollkommen getrennte Ereignisse zu jeweils einer 1 Teilchen - 1 Loch Anregung geführt hat. Solche unverbundenen Anregungen werden bei diesem Ansatz in der Entwicklung

$$e^{\hat{S}_1} |\phi\rangle = \{1 + \hat{S}_1 + \frac{1}{2!} \hat{S}_1 \hat{S}_1 + \cdots\} |\phi\rangle \quad (3.8)$$

durch den Term 2.Ordnung in \hat{S}_1 dargestellt.

Insbesondere bei einem System unendlicher Ausdehnung (Kernmaterie) dominieren natürlich die unverbundenen Terme. Deshalb ist es für die Vielteilchen-Theorie wichtig Ausdrücke für die linked cluster zu gewinnen.

Setzt man diesen Ansatz für den Eigenzustand $|\Psi\rangle$ des Hamiltonoperators in die Schrödingergleichung ein so ergibt sich

$$\hat{H} |\Psi\rangle = \hat{H} e^{\hat{S}} |\phi\rangle = E e^{\hat{S}} |\phi\rangle \quad (3.9)$$

Im nächsten Schritt multiplizieren wir die Gleichung mit $e^{-\hat{S}}$

$$e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{\hat{S}} |\phi\rangle = E \underbrace{e^{-\hat{S}} e^{\hat{S}}}_{=1} |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (3.10)$$

Diese Form der Schrödingergleichung multiplizieren wir von links mit dem Bra-Zustand $\langle \phi |$ und erhalten

$$\langle \phi | e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{\hat{S}} |\phi\rangle = \langle \phi | \hat{H} e^{\hat{S}} |\phi\rangle = E. \quad (3.11)$$

Die erste Gleichung gilt, da bei der Entwicklung des Bra-Zustandes

$$\langle \phi | e^{-\hat{S}} = \{e^{-\hat{S}^\dagger} |\phi\rangle\}^\dagger = \{[1 - \hat{S}^\dagger + \cdots] |\phi\rangle\}^\dagger = \langle \phi | \quad (3.12)$$

Der Operator \hat{S}^\dagger angewendet auf $|\phi\rangle$ (und auch alle höheren Potenzen von \hat{S}^\dagger) versucht Nukleonen im unbesetzten Zustand ρ zu vernichten bzw. Nukleonen im besetzten Zustand ν zu erzeugen. Multiplizieren wir die Schrödingergleichung (3.10) von links mit dem Bra-Zustand $\langle\phi_{\rho(\nu)}|$ für Einteilchen - Einloch Anregungen relativ zu $\langle\phi|$ (siehe 3.3) so ergibt sich

$$\langle\phi_{\rho(\nu)}| e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{\hat{S}} |\phi\rangle = E \langle\phi_{\rho(\nu)}|\phi\rangle = 0 \quad (3.13)$$

Ganz entsprechend gilt auch

$$\langle\phi_{\rho_1\rho_2(\nu_1\nu_2)}| e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{\hat{S}} |\phi\rangle = E \langle\phi_{\rho_1\rho_2(\nu_1\nu_2)}|\phi\rangle = 0 \quad (3.14)$$

Mit

$$e^{-\hat{S}} \hat{T} e^{\hat{S}} = \hat{T} + [\hat{T}, \hat{S}] + \frac{1}{2!} [[\hat{T}, \hat{S}], \hat{S}] \quad (3.15)$$

und

$$e^{-\hat{S}} \hat{v} e^{\hat{S}} = \hat{v} + [\hat{v}, \hat{S}] + \frac{1}{2!} [[\hat{v}, \hat{S}], \hat{S}] + \frac{1}{3!} [[[[\hat{v}, \hat{S}], \hat{S}], \hat{S}], \hat{S}] + \frac{1}{4!} [[[[[[\hat{v}, \hat{S}], \hat{S}], \hat{S}], \hat{S}], \hat{S}], \hat{S}] \quad (3.16)$$

weil \hat{v} ein Zweiteilchenpotential ist, folgt eine allgemeine Gesetzmäßigkeit.

Dazu ein Beispiel:

$$\begin{aligned} [\hat{T}, \hat{S}_1] &= \sum_{\alpha,\beta,\rho,\nu} \langle\alpha|\hat{T}|\beta\rangle \langle\rho|\hat{S}_1|\nu\rangle [\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta, \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\nu] \\ &= \sum_{\alpha,\beta,\rho,\nu} \langle\alpha|\hat{T}|\beta\rangle \langle\rho|\hat{S}_1|\nu\rangle (\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\nu - \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\nu \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta) \\ &= \sum_{\alpha,\nu} \left\{ \sum_\rho \langle\alpha|\hat{T}|\rho\rangle \langle\rho|\hat{S}_1|\nu\rangle \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\nu \right\} - \sum_{\beta,\rho} \left\{ \sum_\nu \langle\nu|\hat{T}|\beta\rangle \langle\rho|\hat{S}_1|\nu\rangle \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\beta \right\} \end{aligned}$$

weil $\hat{a}_\beta \hat{a}_\rho^\dagger = \delta_{\beta\rho} - \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\beta$ und $\hat{a}_\nu \hat{a}_\alpha^\dagger = \delta_{\nu\alpha} - \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\nu$; außerdem heben sich zwei Terme auf weil $\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}_\nu = \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\nu \hat{a}_\beta$ ist. Graphisch gesehen, verlässt im ersten Term eine Teilchenlinie \hat{S}_1 und mündet in \hat{T} , also ein Link zwischen \hat{T} und \hat{S}_1 . Im zweiten Term verlässt eine Lochlinie \hat{T} und mündet in \hat{S}_1 , also ein Link zwischen \hat{T} und \hat{S}_1 .

Allgemein ergibt sich, siehe [14]

$$e^{-\hat{S}} \hat{T} e^{\hat{S}} = \hat{T} + \{\hat{T} \hat{S}\}_L + \frac{1}{2!} \{\hat{T} \hat{S} \hat{S}\}_L \quad (3.17)$$

und

$$e^{-\hat{S}} \hat{v} e^{\hat{S}} = \hat{v} + \{\hat{v} \hat{S}\}_L + \frac{1}{2!} \{\hat{v} \hat{S} \hat{S}\}_L + \frac{1}{3!} \{\hat{v} \hat{S} \hat{S} \hat{S}\}_L + \frac{1}{4!} \{\hat{v} \hat{S} \hat{S} \hat{S} \hat{S}\}_L \quad (3.18)$$

wobei $\{ABC \dots\}_L$ bedeutet:

Nimm die Summe über alle möglichen Links zwischen den Operatoren $\hat{A}\hat{B}\hat{C} \dots$, so daß wenigstens ein Link zwischen \hat{A} und \hat{B} , wenigstens ein Link zwischen dem Produkt $\hat{A}\hat{B}$ und \hat{C} , wenigstens ein Link zwischen dem Produkt $\hat{A}\hat{B}\hat{C}$ und \hat{D} und so weiter. Die $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen bestehen also nur aus linked Diagrammen, insbesondere ist die diagrammatische Entwicklung der Energie eine Entwicklung nach linked Diagrammen.

Abbildung (3.1) und Abbildung (3.2) sind [13] entnommen. Abbildung (3.1) zeigt die graphischen Bestandteile von $\langle \phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1} \{ \hat{v} \hat{S}_2 \hat{S}_2 \}_L | \phi \rangle$. Im oberen Teil sind die Teilchenlinien ρ und die Lochlinien ν dargestellt. Im mittleren Teil ist \hat{v} dargestellt. Im unteren Teil ist \hat{S}_2 dargestellt.

Abbildung (3.2) zeigt die graphische Darstellung, der resultierenden Diagramme von $\langle \phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1} \{ \hat{v} \hat{S}_2 \hat{S}_2 \}_L | \phi \rangle$.

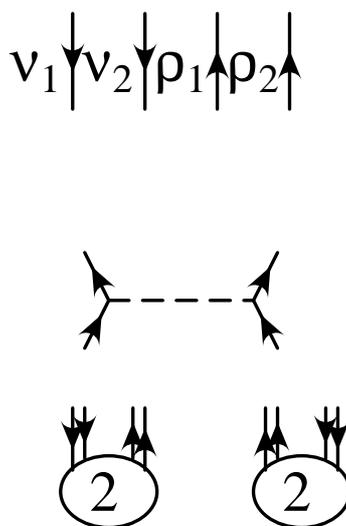


Abbildung 3.1: Diese Abbildung zeigt die graphischen Bestandteile von $\langle \phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1} \{ \hat{v} \hat{S}_2 \hat{S}_2 \}_L | \phi \rangle$. Im oberen Teil sind die Teilchenlinien ρ und die Lochlinien ν dargestellt. Im mittleren Teil ist \hat{v} dargestellt. Im unteren Teil ist \hat{S}_2 dargestellt.

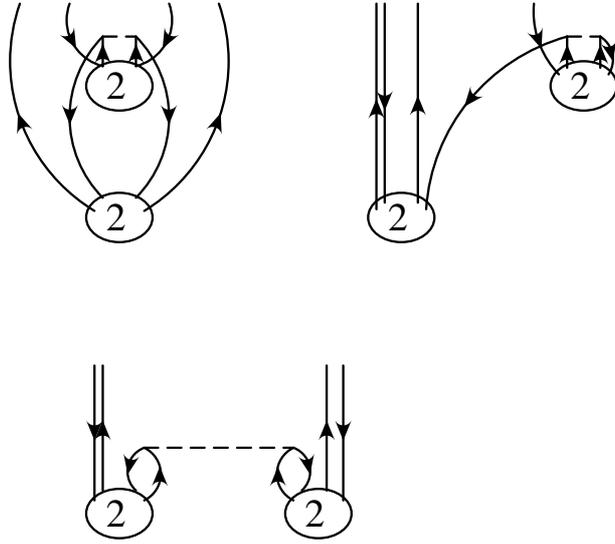


Abbildung 3.2: Diese Abbildung zeigt die graphische Darstellung, der resultierenden Diagramme von $\langle \phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1} \{ \hat{v} \hat{S}_2 \hat{S}_2 \}_L | \phi \rangle$.

Zur weiteren Diskussion definieren wir die n -Teilchen Untersystemamplituden $\langle x_1 \cdots x_n | \hat{\Psi}_n | \nu_1 \cdots \nu_n \rangle_A$:

$$\langle x_1 \cdots x_n | \hat{\Psi}_n | \nu_1 \cdots \nu_n \rangle_A = \langle \phi | \hat{a}_{\nu_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{\nu_n}^\dagger \hat{a}(x_n) \cdots \hat{a}(x_1) | \Psi \rangle \quad (3.19)$$

Die n -Teilchen Untersystemamplituden sind die Amplituden daß $N - n$ Teilchen in den Schalenmodellzuständen ν_{n+1}, \dots, ν_N sind:

$$\begin{aligned} &= \int dx'_1 \cdots dx'_N \langle x'_1 \cdots x'_N | \Psi \rangle \delta(x_1 - x'_1) \cdots \delta(x_n - x'_n) \langle x'_{n+1} | \nu_{n+1} \rangle \cdots \langle x'_N | \nu_N \rangle \\ &= \int dx'_{n+1} \cdots dx'_N \langle x_1 \cdots x_n x'_{n+1} \cdots x'_N | \Psi \rangle \langle x'_{n+1} | \nu_{n+1} \rangle \cdots \langle x'_N | \nu_N \rangle \end{aligned}$$

(Anmerkung: $\langle x_1 \cdots x_N | \hat{\Psi}_N | \nu_1 \cdots \nu_N \rangle_A = \langle x_1 \cdots x_N | \Psi \rangle$)

$\langle x_1 \cdots x_n | \hat{\Psi}_n | \nu_1 \cdots \nu_n \rangle_A$ ist eine n -Teilchen Funktion, die man erhält durch die Projektion der exakten Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ auf die Slaterdeterminante, bei der in ϕ nur die Zustände $\nu_{n+1} \cdots \nu_N$ besetzt gehalten sind. Das bedeutet das diese Funktion 0-Teilchen 0-Loch, 1-Teilchen 1-Loch bis maximal n -Teilchen n -Loch Komponenten enthält.

Es ist klar, weil die $\hat{\Psi}_n$ Teilchen Loch Anregungen bis maximal n -Teilchen n -Loch-Anregungen beschreiben, dass in den Relationen zu den \hat{S}_i , \hat{S}_i bis maximal \hat{S}_n vorkommen können. Setzt man in die Definition der $\hat{\Psi}_n | \Psi \rangle$ als

$e^{\hat{S}}|\phi\rangle$ ein, so folgen die Relationen zwischen den $\hat{\Psi}_n$ und \hat{S}_n :

$$\langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle = \langle x_1 | \nu_1 \rangle + \langle x_1 | \hat{S}_1 | \nu_1 \rangle \quad (3.20)$$

für $n = 1$, wobei

$$\langle x_1 | \hat{S}_1 | \nu_1 \rangle = \sum_{\rho_1} \langle x_1 | \rho_1 \rangle \langle \rho_1 | \hat{S}_1 | \nu_1 \rangle \quad (3.21)$$

Daraus folgt folgende Interpretation von \hat{S}_1 :

$\langle x_1 | \hat{S}_1 | \nu_1 \rangle$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass $N - 1$ Teilchen in den Modellzuständen $|\nu_2\rangle, \dots, |\nu_N\rangle$ sind und daß das übriggebliebene Teilchen nicht im Modellzustand $|\nu_1\rangle$ ist, sondern in normal unbesetzten Zuständen $|\rho\rangle$. Die Interpretation der \hat{S}_n für $n > 1$ sind entsprechend:

Gleichung für $n = 2$:

$$\langle x_1 x_2 | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 \rangle_A = A_\nu [\langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle x_2 | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle] + \langle x_1 x_2 | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 \rangle_A \quad (3.22)$$

($A_\nu[\]$ antisymmetrisiert den Klammerausdruck $[\]$ gegenüber A Vertauschungen der ν -Indizes.) \hat{S}_2 ist der Teil von $\hat{\Psi}_2$, der nicht durch 1-Teilchen- Unter-systemwellenfunktionen beschreibbar ist.

Gleichung für $n = 3$:

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 x_3 | \hat{\Psi}_3 | \nu_1 \nu_2 \nu_3 \rangle_A &= A_\nu [\langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle x_2 | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle \langle x_3 | \hat{\Psi}_1 | \nu_3 \rangle] \\ &+ A_\nu S_{\nu x} [\langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle x_2 x_3 | \hat{S}_2 | \nu_2 \nu_3 \rangle_A] \\ &+ \langle x_1 x_2 x_3 | \hat{S}_3 | \nu_1 \nu_2 \nu_3 \rangle_A \end{aligned} \quad (3.23)$$

Mit $S_{\nu x}[\] = \sum$ über alle Permutationen der Paare $(\nu_i x_i)[\]$

$\hat{\Psi}_3$, die Wellenfunktion von 3 Teilchen aus den N Nukleonen, wurde also aufgespalten in einen

-Term1, der einer Slaterdeterminante entspricht, wobei die Einteilchenwellenfunktion sich wegen der Amplitude \hat{S}_1 durchaus von der Basisfunktion ν_i unterscheiden kann.

- einen Term2, in den nicht weiter reduzierbare 2 Teilchenkorrelationen, beschrieben durch die Amplituden \hat{S}_2 berücksichtigt werden und einen

-Term3, der durch die Amplitude \hat{S}_3 nicht weiter reduzierbare 3-Teilchen Korrelationen enthält.

Wegen dieser Interpretation der \hat{S}_n als nicht weiter reduzierbare, verbundene Teilchen-Loch Korrelationen heißen die \hat{S}_n Korrelationsamplituden. Für Systeme geringer Dichte (Potentialreichweite zwischen zwei Teilchen \ll mittlerer Abstand zwischen zwei Teilchen), wie z.B. den Atomkern, sollten also höhere \hat{S}_n vernachlässigbar sein.

, siehe [14].

Sie haben folgende allgemeingültige Gestalt:

Sie sind gekoppelt. Wenn wir uns auf Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen beschränken (wie in den obigen Gleichungen) dann benötigen wir in der $[S_n] = 0$ Gleichung, die uns die \hat{S}_n liefern soll ($[S_1] = 0$ Gleichung: Gleichung (3.13), $[S_2] = 0$ Gleichung: Gleichung (3.14)), die Kenntnis von \hat{S}_{n+1} und \hat{S}_{n+2} . Bei Drei-Teilchen-Wechselwirkungen würden wir zusätzlich noch \hat{S}_{n+3} benötigen. In der SUB n -Näherung zur Lösung der $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen werden alle \hat{S}_i mit $i > n$ als null angenommen.

Im folgenden wird die SUB2-Näherung besprochen.

Die Einteilchengleichung aus [15] bekommt man indem man in den allgemein gültigen Gleichungen (2.54), (2.55) aus [14] die $\hat{\chi}_3, \hat{\chi}_4$ und \hat{S}_3 Terme null setzt. Setzt man in der $[S_1] = 0$ Gleichung $\hat{S}_2 = 0$, so erhält man die Hartree-Fock-Gleichung. Setzt man in der $[S_2] = 0$ Gleichung den Term $\frac{1}{2} \sum_{\nu, \nu'} \langle x_1 x_2 | \hat{S}_2 | \nu \nu' \rangle_A \langle \nu \nu' | \hat{V} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 \rangle_A$, der hole-hole Leitern aufsummiert null, so erhält man die Bethe-Goldstone-Gleichung (2.84). In [16] ist das explizit aufgeführt, wobei sich die G-Matrix als $\hat{V} \hat{\chi}_2 (= \hat{V} \hat{\Psi}_2)$ ergibt. Die $h_{\nu\nu_1}$ in den Gleichungen $[\hat{S}_1] = [\hat{S}_2] = 0$ sind die Energien der Lochzustände:

$$h_{\nu\nu_1} = \langle \nu | \hat{T} \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle + \sum_{\nu'} \langle \nu \nu' | \hat{V} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu' \rangle_A \quad (3.26)$$

mit dem effektiven Potential

$$\langle \nu \nu' | \hat{V}_{\text{eff}} | \nu_1 \nu' \rangle_A = \langle \nu \nu' | \hat{V} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu' \rangle_A \quad (3.27)$$

während die Energie der Teilchenzustände nur die kinetische Energie ist.

Um den Einfluss der Dreiteilchenamplituden $\hat{\chi}_3$ auf die Energie (durch die $[S_1] = 0$ und die $[S_2] = 0$ Gleichung) zu berechnen müssen wir die Gleichung für $\hat{\chi}_3$ (aus [17]) lösen:

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 x_3 | \hat{\chi}_3^{12} | \nu_1 \nu_2 \nu_3 \rangle &= A_\nu [\langle x_3 x_1 | \hat{S}_2 | \nu_3 \nu_1 \rangle \langle x_2 | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle \\ &+ \langle x_2 x_3 | \hat{S}_2 | \nu_2 \nu_3 \rangle \langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle] \\ &+ \sum_{y_i} \langle x_1 x_2 x_3 | \frac{\hat{Q}_3}{\hat{e}_3} | y_2 y_3 y_1 \rangle \langle y_1 y_2 y_3 | \hat{G}_{12} \hat{\chi}_3^{12} | \nu_1 \nu_2 \nu_3 \rangle \\ &+ \sum_{y_i} \langle x_1 x_2 x_3 | \frac{\hat{Q}_3}{\hat{e}_3} | y_2 y_3 y_1 \rangle \langle y_3 y_1 y_2 | \hat{G}_{12} \hat{\chi}_3^{12} | \nu_1 \nu_2 \nu_3 \rangle \end{aligned} \quad (3.28)$$

. \hat{Q}_3 bezeichnet den Paulioperator für Drei-Teilchenzustände und der Energienenner \hat{e}_3 ist definiert als

$$\hat{e}_3 = \epsilon_{\nu_1} + \epsilon_{\nu_2} + \epsilon_{\nu_3} - (\hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{T}_3) \quad (3.29)$$

Die Lösung der Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) entspricht der Aufsummierung von Drei-Teilchen-Leitern, (siehe Abbildung 3.3), sowie die Bethe-Goldstone-Gleichung (2.84) der Aufsummierung von Zwei-Teilchen-Leitern entspricht, (siehe Abbildung 3.4).

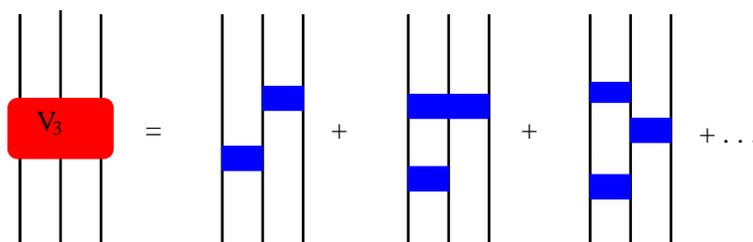


Abbildung 3.3: Die Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) summiert Drei-Teilchen-Leitern.

Andere Observable ausser der Energie, wie z. B. den Radius, kann man mit der Einteilchendichtematrix

$$\langle \alpha | \hat{D}_1 | \beta \rangle = \frac{\langle \phi | e^{\hat{S}^+} e^{\hat{S}} e^{-\hat{S}} \hat{a}_\beta^+ \hat{a}_\alpha e^{\hat{S}} | \phi \rangle}{\langle \phi | e^{\hat{S}^+} e^{\hat{S}} | \phi \rangle} \quad (3.30)$$

ausrechnen.

Dazu fügen wir zwischen $e^{\hat{S}}$ und $e^{-\hat{S}}$ die zusammen als Eins eingefügt wurden eine andere Eins

$$1 = |\phi\rangle \langle \phi| + \sum_{n=1}^A \frac{1}{n!^2} \hat{a}_{\rho_1}^+ \cdots \hat{a}_{\rho_n}^+ \hat{a}_{\nu_n} \cdots \hat{a}_{\nu_1} |\phi\rangle \langle \phi| \hat{a}_{\nu_1}^+ \cdots \hat{a}_{\nu_n}^+ \hat{a}_{\rho_n} \cdots \hat{a}_{\rho_1} \quad (3.31)$$

ein und erhalten ein gekoppeltes Gleichungssystem für \hat{D}_1 , in dem die n -Teilchen-Dichtematrizen $\langle \nu_1 \cdots \nu_n | \hat{D}_n | \rho_1 \cdots \rho_n \rangle$ auftreten:

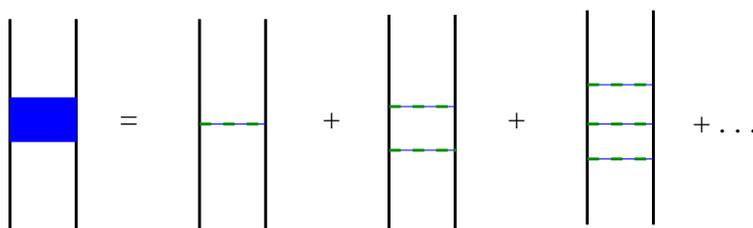


Abbildung 3.4: Die Bethe-Goldstone-Gleichung (2.84) summiert Zwei-Teilchen-Leitern.

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \hat{D}_1 | \beta \rangle &= \langle \phi | e^{-\hat{S}} \hat{a}_\beta^+ \hat{a}_\alpha e^{\hat{S}} | \phi \rangle \\
&+ \sum_{n=1, \rho_i, \nu_i}^A \frac{1}{n!^2} \langle \nu_1 \cdots \nu_n | \hat{D}_n | \rho_1 \cdots \rho_n \rangle \\
&\quad \langle \phi | \hat{a}_{\nu_1}^+ \cdots \hat{a}_{\nu_n}^+ \hat{a}_{\rho_n} \cdots \hat{a}_{\rho_1} e^{-\hat{S}} \hat{a}_\beta^+ \hat{a}_\alpha e^{\hat{S}} | \phi \rangle \quad (3.32)
\end{aligned}$$

Die Matrixelemente $\langle \phi | \hat{a}_{\nu_1}^+ \cdots \hat{a}_{\nu_n}^+ \hat{a}_{\rho_n} \cdots \hat{a}_{\rho_1} e^{-\hat{S}} \hat{a}_\beta^+ \hat{a}_\alpha e^{\hat{S}} | \phi \rangle$ können in einer Entwicklung analog zuden Gleichungen (3.15, 3.16) berechnet werden. Das Auftreten höherer $\hat{D}_n (n > 1)$ in der Einteilchendichtematrix bedeutet das sie iterativ gelöst werden muss [18].

Kapitel 4

Lösung der $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen

4.1 Lösung der $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen in der SUB 2-Näherung

Ich beschreibe zuerst die Lösung der $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen in der SUB 2-Näherung $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$.

Die Rechnungen wurden am Beispiel des Atomkerns von ^{16}O und ^{40}Ca durchgeführt. Als Wechselwirkungspotential V_{12} wurden das Argonne V14-Potential (siehe [22]) und Argonne V18 ([9]), Nijm1 ([23]), Nijm2 ([24]), Bonn A ([5]), Bonn C ([25]), CDBonn ([7]) verwendet. Zur Definition des unkorrelierten Referenzzustandes ϕ betrachten wir eine geeignete Basis von Eigenfunktionen zum harmonischen Oszillatorpotential

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega r^2$$

Für Atomkerne mit der Massenzahl A geben Greiner und Maruhn [26] die Faustformel für den Oszillatorparameter an

$$\hbar\omega \approx 41 \text{ MeV} A^{-\frac{1}{3}}. \quad (4.1)$$

Damit ist an jedem Kernrand $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ das gleiche Potential und es wird somit eine konstante Tiefe eines Potentialtopfes simuliert. Nimmt man $\hbar\omega$ mit dieser Formel (4.1) so ergibt sich für ^{16}O

$$\hbar\omega = 16.2$$

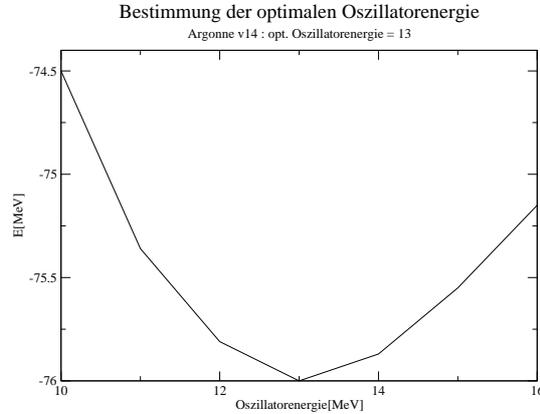


Abbildung 4.1: Bestimmung des optimalen Oszillatorparameters $\hbar\omega = 13$ für das Argonne V14-Potential in der SUB 2-Näherung.

Der Parameter $\hbar\omega$ der Oszillatorfunktionen wurde bei den meisten Potentialen als 14MeV genommen, weil dies für einen so leichten Atomkern wie ^{16}O besser geeignet ist. Beim Argonne V14- und beim CDBonn-Potential wurden das Energieminimum in Abhängigkeit von $\hbar\omega$ für die SUB 2-Näherung bestimmt:

$$\hbar\omega = 13$$

für das Argonne V14-Potential, siehe Abbildung (4.1) und

$$\hbar\omega = 17$$

für das beim CDBonn-Potential, siehe Abbildung (4.2).

Bei ^{40}Ca ergibt sich mit der Formel (4.1)

$$\hbar\omega = 12$$

Bei ^{40}Ca wurde

$$\hbar\omega = 10.5$$

genommen. Wenn wir ^{16}O betrachten, sind nur die ersten drei Oszillatorzustände besetzt:

$$0s_{\frac{1}{2}}, 0p_{\frac{3}{2}}, 0p_{\frac{1}{2}} \quad (4.2)$$

Wenn wir ^{40}Ca betrachten, sind die ersten sechs Oszillatorzustände besetzt:

$$0s_{\frac{1}{2}}, 0p_{\frac{3}{2}}, 0p_{\frac{1}{2}}, 0d_{\frac{5}{2}}, 1s_{\frac{1}{2}}, 0d_{\frac{3}{2}} \quad (4.3)$$

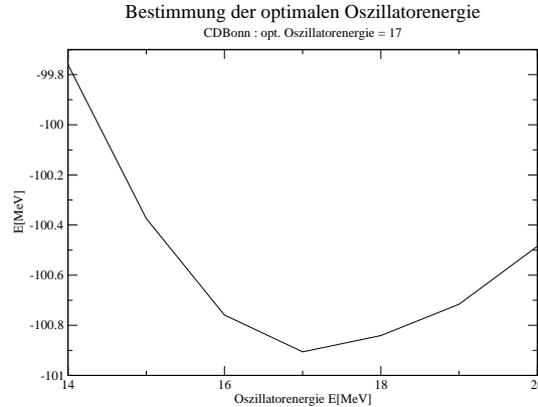


Abbildung 4.2: Bestimmung des optimalen Oszillatorparameters $\hbar\omega = 17$ für das CDBonn-Potential in der SUB 2-Näherung.

Bei Zweiteilchenzuständen die sich aus zwei (harmonischen Oszillator-) Einteilchenschalenmodellzuständen zusammensetzen hat man zwei Basiszustände, die durch die Clebsch-Gordan-Koeffizienten verbunden sind:

Für zwei Systeme mit den Drehimpulsen \vec{J}_1 und \vec{J}_2 lässt sich der Gesamtdrehimpuls schreiben als

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2. \quad (4.4)$$

Für die Basiszustände des Gesamtsystems hat man nun zwei Möglichkeiten :

- Man kann Eigenzustände zu den vier miteinander kommutierenden Operatoren \vec{J}_1^2 , \vec{J}_2^2 , J_{1z} und J_{2z} verwenden. Diese werden dargestellt durch

$$|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle. \quad (4.5)$$

- Man benützt simultane Eigenzustände zu den vier miteinander kommutierenden Operatoren \vec{J}_1^2 , \vec{J}_2^2 , \vec{J}^2 und J_z , dargestellt durch

$$|j_1 j_2; jm\rangle. \quad (4.6)$$

Damit hat man zwei Sätze von Basiszuständen, die das gleiche System beschreiben. Es gibt eine unitäre Transformation, die diese beiden Sätze miteinander verbindet:

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle, \quad (4.7)$$

wobei die Vollständigkeit

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2| = 1 \quad (4.8)$$

ausgenutzt wurde. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$ verschwinden, wenn nicht $m = m_1 + m_2$.

Bei der $[S_1] = 0$ -Gleichung für ^{16}O , Gleichung (3.13)

$$\sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{T} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle - \sum_{\nu} h_{\nu\nu_1} \langle \alpha | \hat{\Psi}_1 | \nu \rangle + \langle \alpha | U | \nu_1 \rangle + \sum_{\nu} \langle \alpha \nu | \hat{T}_2 \hat{S}_2 | \nu_1 \nu \rangle = 0 \quad (4.9)$$

benutzt man die Basis $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$, weil über $\nu = (n_{\nu}, l_{\nu}, j_{\nu}, m_{\nu}, \tau_{\nu})$ summiert wird. ($\varepsilon_{\nu\nu_1}$ in (3.13) wird nun als $h_{\nu\nu_1}$ bezeichnet, \hat{T}_2 ist der kinetische Energie Operator der nur auf den zweiten Zustand in $|\nu_1 \nu\rangle$, d.h. $|\nu\rangle$ wirkt.) Dabei tritt (die bei ^{16}O diagonale) Energiematrix

$$h_{\nu\nu_1} = \langle \nu | \hat{T} \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle + \sum_{\nu'}^A \langle \nu \nu' | V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu' \rangle \quad (4.10)$$

und das Einteilchenpotential

$$\langle n_{\alpha} l_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} \tau_{\alpha} | U | n_{\nu_1} l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} \rangle = \quad (4.11)$$

$$\sum_{\nu}^A \langle n_{\alpha} l_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} \tau_{\alpha} n_{\nu} l_{\nu} j_{\nu} m_{\nu} \tau_{\nu} | v_{12} \psi_2 | n_{\nu_1} l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} n_{\nu} l_{\nu} j_{\nu} m_{\nu} \tau_{\nu} \rangle$$

auf. Das Einteilchenpotential lässt sich mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten vereinfachen:

$$\begin{aligned} \langle n_{\alpha} l_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} \tau_{\alpha} | U | n_{\nu_1} l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} \rangle &= \sum_{n_{\nu}, l_{\nu}, j_{\nu}, m_{\nu}, \tau_{\nu}, J, M, T, M_T} \langle j_{\alpha} j_{\nu}; J M | j_{\alpha} j_{\nu}; m_{\alpha} m_{\nu} \rangle \\ &\times \langle j_{\nu_1} j_{\nu}; J M | j_{\nu_1} j_{\nu}; m_{\nu_1} m_{\nu} \rangle \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \tau_{\alpha} \tau_{\nu} | \frac{1}{2} \frac{1}{2}; T M_T \rangle \\ &\times \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \tau_{\nu_1} \tau_{\nu} | \frac{1}{2} \frac{1}{2}; T M_T \rangle \langle n_{\alpha} l_{\alpha} j_{\alpha} n_{\nu} l_{\nu} j_{\nu} J M T M_T | v_{12} \psi_2 | n_{\nu_1} l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_{\nu} l_{\nu} j_{\nu} J M T M_T \rangle. \end{aligned} \quad (4.12)$$

wobei die andere Vollständigkeitsrelation

$$\sum_j \sum_m |j_1 j_2 j m\rangle \langle j_1 j_2 j m| = 1 \quad (4.13)$$

ausgenutzt wurde. Mit Hilfe der zu den Clebsch-Gordan-Koeffizienten verwandten $3j$ -Symbole (siehe z. B. [20, 21]) und deren Orthogonalitätsrelationen kann man leicht zeigen, dass

$$\sum_{\tau_{\nu}, M_T} \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \tau_{\alpha} \tau_{\nu} | \frac{1}{2} \frac{1}{2}; T M_T \right\rangle \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \tau_{\nu_1} \tau_{\nu} | \frac{1}{2} \frac{1}{2}; T M_T \right\rangle = \frac{2T+1}{2 \times \frac{1}{2} + 1} \delta_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} \delta_{\tau_{\alpha} \tau_{\nu_1}} \quad (4.14)$$

und genauso

$$\sum_{m_\nu, M} \langle j_\alpha j_\nu; JM | j_\alpha j_\nu; m_\alpha m_\nu \rangle \langle j_{\nu_1} j_\nu; JM | j_{\nu_1} j_\nu; m_{\nu_1} m_\nu \rangle = \frac{2J+1}{2j_\alpha+1} \delta_{j_\alpha j_{\nu_1}} \delta_{m_\alpha m_{\nu_1}}. \quad (4.15)$$

Wegen der Diagonalität in den Drehimpulsquantenzahlen j , m und der Paritätserhaltung gilt für die besetzten Zustände (4.2) von ^{16}O und den besetzten Zuständen (4.3) von ^{40}Ca

$$(l_\alpha, j_\alpha, m_\alpha, \tau_\alpha) = (l_{\nu_1}, j_{\nu_1}, m_{\nu_1}, \tau_{\nu_1}). \quad (4.16)$$

Damit sind bei ^{40}Ca bei der Energiematrix zusätzlich zu den diagonalen Übergängen auch noch Übergänge zwischen $\nu = 0s_{\frac{1}{2}}$ und $\nu = 1s_{\frac{1}{2}}$ möglich.

Für ^{40}Ca wird Gleichung (4.9) folgendermassen modifiziert:

$$\sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{T} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle - \sum_{\nu} h_{\nu\nu_1} \langle \alpha | \hat{\Psi}_1 | \nu \rangle + \langle \alpha | U | \nu_1 \rangle + \sum_{\nu} \langle \alpha \nu | \hat{T}_2 \hat{S}_2 | \nu_1 \nu \rangle = 0 \quad (4.17)$$

Dieselben Argumente kann man auch auf die anderen Terme in der Einteilchengleichung aus [15] anwenden. Das Ergebnis ist, dass die Einteilchengleichung nur Anregungen

$$\langle n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} | \hat{S}_1 | n_{\nu_1} l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} \rangle \quad (4.18)$$

mit $n_\alpha = 0, 1, \dots$, so dass $\langle n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} |$ ein Teilchenzustand ist, erlaubt. Bei der $[S_2] = 0$ -Gleichung werden Zweiteilchen-Zustände im Schwerpunktsystem genommen, weil die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung unabhängig von der Schwerpunktskoordinate des wechselwirkenden Paares ist. Berücksichtigen wir im Moment nicht den Spin und den Isospin, so betrachten wir Zustände $|n_1 l_1 n_2 l_2 LM\rangle$, wo die Bahndrehimpulse von Teilchen 1 und Teilchen 2 zum Gesamtdrehimpuls \vec{L} koppeln, dessen Betrag L und dessen Projektion auf die z -Achse M ist. Diese $|n_1 l_1 n_2 l_2 LM\rangle$ -Zustände sind die Eigenzustände des 2-dimensionalen harmonischen Oszillator:

$$\left(\frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{r}_1^2 + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{r}_2^2 \right) \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | n_1 l_1 n_2 l_2 LM \rangle = \varepsilon \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | n_1 l_1 n_2 l_2 LM \rangle$$

$$\hat{H}_{os} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | n_1 l_1 n_2 l_2 LM \rangle = \varepsilon \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | n_1 l_1 n_2 l_2 LM \rangle$$

mit

$$\varepsilon = \hbar \omega \left(2n_1 + l_1 + \frac{3}{2} + 2n_2 + l_2 + \frac{3}{2} \right). \quad (4.19)$$

Der Vorteil des harmonischen Oszillators liegt darin, dass bei der Transformation auf Relativ- und Schwerpunktkoordinaten:

$$\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad (4.20)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (4.21)$$

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad (4.22)$$

$$\vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \quad (4.23)$$

der Hamiltonoperator wieder die Form eines harmonischen Oszillators hat:

$$\hat{H}_{os} = \frac{\vec{p}^2}{m} + \frac{1}{4}m\omega^2\vec{r}^2 + \frac{\vec{P}^2}{4m} + m\omega^2\vec{R}^2 \quad (4.24)$$

$$= \hat{H}_{osrel} + \hat{H}_{oscm}. \quad (4.25)$$

Der Hamiltonoperator $\hat{H}_{osrel} = \frac{\vec{p}^2}{m} + \frac{1}{4}m\omega^2\vec{r}^2$ der Relativkoordinaten ist ein harmonischer Oszillator mit der Masse $\frac{m}{2}$. Der Hamiltonoperator $\hat{H}_{oscm} = \frac{\vec{P}^2}{4m} + m\omega^2\vec{R}^2$ der Schwerpunktskoordinaten ist ein harmonischer Oszillator mit der Masse $2m$. Die Eigenzustände zu $\hat{H}_{osrel} + \hat{H}_{oscm}$ sind die $|nlN\Lambda LM\rangle$:

$$(\hat{H}_{osrel} + \hat{H}_{oscm}) |nlN\Lambda LM\rangle = E |nlN\Lambda LM\rangle \quad (4.26)$$

$$E = \hbar\omega \left(2N + \Lambda + \frac{3}{2} + 2n + l + \frac{3}{2} \right). \quad (4.27)$$

Der Übergang zwischen diesen beiden Basissystemen wird mit Hilfe der Moshinskyklammern $\langle nlN\Lambda L | n_1 l_1 n_2 l_2 L \rangle$ vollzogen:

$$|nlN\Lambda LM\rangle = \sum_{n_1, n_2, l_1, l_2} \langle nlN\Lambda L | n_1 l_1 n_2 l_2 L \rangle |n_1 l_1 n_2 l_2 LM\rangle. \quad (4.28)$$

Die Transformation ist unabhängig von M . Wegen des Drehimpulserhaltungssatzes $\vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{l} + \vec{\Lambda} = \vec{L}$ haben beide Zustände das gleiche L . Wegen des Energieerhaltungssatzes $2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 = 2n + l + 2N + \Lambda$ gibt es noch eine weitere Beziehung zwischen den Quantenzahlen.

Die Transformation in den Ortsraum geschieht mit Hilfe des radialen Anteils $\langle rl | nl \rangle$ der Oszillatorfunktion $= R_{nl}(r)$

$$\langle rlN\Lambda LM | = \sum_n \langle rl | nl \rangle \langle nlN\Lambda LM | \quad (4.29)$$

Der Übergang von der Darstellung im Ortsraum zur Impulsdarstellung in der z.B. die Bonn-Potentiale gegeben sind, geschieht nun folgendermassen:

Da die Zweiteilchenkorrelationsfunktion $S_{2Ql}(r)$ (Q steht für die anderen Quantenzahlen ausser der Bahndrehimpulsquantenzahl l) für grosse Relativabstände r gegen 0 geht, entwickeln wir diese Funktion in einem vollständigen Orthogonalsystem von Funktionen in einer sphärischen Box mit Radius r_{Box} .

Ein geeignetes Funktionensystem für Funktionen mit Drehimpulsquantenzahl l sind die sphärischen Besselfunktionen

$$\langle r|k_{\alpha}l\rangle = N_{\alpha l}j_l(k_{\alpha}r). \quad (4.30)$$

Die Wellenzahlen k_{α} sind so bestimmt, dass

$$j_l(k_{\alpha}r_{Box}) = 0 \quad (4.31)$$

und die Normierungskonstanten

$$N_{\alpha l} = \begin{cases} \frac{\alpha\pi\sqrt{2}}{\sqrt{r_{Box}^3}} & l = 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{r_{Box}^3 j_{l-1}(k_{\alpha}r_{Box})}} & l > 0 \end{cases} \quad (4.32)$$

sind so gewählt, dass

$$\langle k_{\alpha}l|k_{\beta}l\rangle = \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\alpha l} j_l(k_{\alpha}r) N_{\beta l} j_l(k_{\beta}r) = \delta_{\alpha\beta} \quad (4.33)$$

die Funktionen in der Box orthonormiert sind. Damit erhalten wir die Entwicklung

$$S_{2Ql}(r) = \sum_{\alpha=1}^{N_{dim}} c_{\alpha} N_{\alpha l} j_l(k_{\alpha}r) \quad (4.34)$$

und die Funktion $S_{2Ql}(r)$ wird durch N_{dim} Entwicklungskoeffizienten c_{α} charakterisiert. Bei der Wahl dieser Entwicklung muss also beachtet werden, dass r_{Box} gross genug ist, so dass die Annahme $S_{2Ql}(r) = 0$ für $r > r_{Box}$ gerechtfertigt ist. Ausserdem sollte N_{dim} so gewählt sein, dass die Fouriertransformierte dieser Funktion $S_{2Ql}(k)$ sicher 0 ist für Wellenzahlen k_{α} , die grösser sind als die maximale Wellenzahl $k_{N_{dim}}$, die in der Entwicklung (4.34) berücksichtigt wird.

Die folgenden Abbildungen von der korrelierten Zweiteilchen-Wellenfunktion $\langle rNL(ls)jJT|\hat{\Psi}_2|\nu_1\nu_2JT\rangle_A$, Gleichung (3.22), (für ^{16}O in der SUB 2-Näherung) und der unkorrelierten harmonischen Oszillatorfunktion $R_{nl}(r)$ zeigen wie groß N_{dim} und r_{Box} gewählt werden müssen. Abbildung (4.3) bis Abbildung (4.6) ist für $J = 0$ und $T = 1$ und für die Quantenzahlen: $N = 0, L = 0, {}^{2s+1}l_j = {}^1S_0, \nu_1 = 0s_{\frac{1}{2}}, \nu_2 = 0s_{\frac{1}{2}}$. Abbildung (4.3) stellt

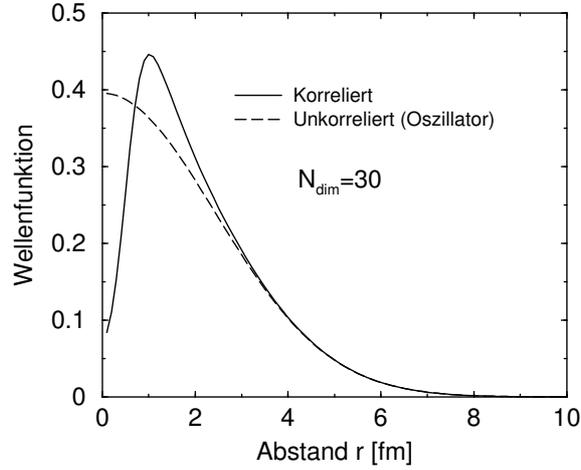


Abbildung 4.3: Diese Abbildung zeigt die korrelierte Zweiteilchen-Wellenfunktion $\langle rNL(ls)jJT | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ für $J = 0$ und $T = 1$ und für die Quantenzahlen: $N = 0, L = 0, {}^{2s+1}l_j = {}^1S_0, \nu_1 = 0s_{\frac{1}{2}}, \nu_2 = 0s_{\frac{1}{2}}$ und die unkorrelierte Oszillatorfunktion $R_{n=0,l=0}$. Die Abbildung zeigt dass $\langle rNL(ls)jJT | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ ab $r \approx 8 fm$ null ist und deshalb $r_{Box} = 10 fm$ vollkommen ausreicht.

die korrelierte $\langle rNL(ls)jJT | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ -Funktion und die unkorrelierte Oszillatorfunktion $R_{n=0,l=0}$ dar. Abbildung (4.3) zeigt, dass $r_{Box} = 10 fm$ vollkommen ausreicht, weil $\langle rNL(ls)jJT | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ ab $r \approx 8 fm$ null ist.

Die korrelierte Wellenfunktion in Abbildung (4.3) zeigt einen typischen charakteristischen Verlauf:

- im abstossenden kurzreichweitigen Nukleon-Nukleon Wechselwirkungsbereich ist die korrelierte Wellenfunktion gegenüber der unkorrelierten Oszillatorfunktion unterdrückt.
- im anziehenden mittelreichweitigen Nukleon-Nukleon Wechselwirkungsbereich ist die korrelierte gegenüber der unkorrelierten Wellenfunktion verstärkt.
- für grosse Abstände nähert sich die korrelierte Wellenfunktion der unkorrelierten Oszillatorfunktion an.

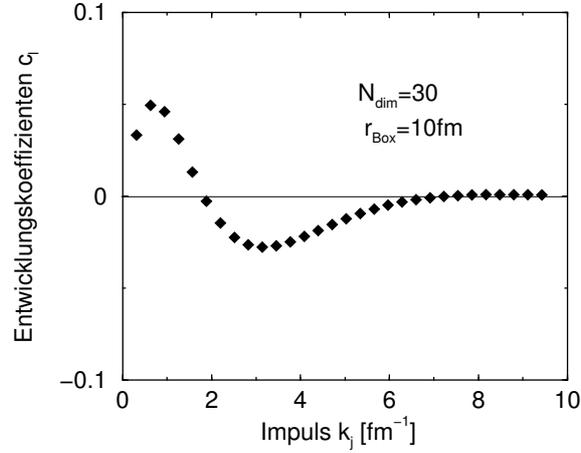


Abbildung 4.4: Diese Abbildung zeigt die Koeffizienten c_l von Gleichung (4.35) für die Quantenzahlen: $N = 0, L = 0, {}^{2s+1}j = {}^1S_0, \nu_1 = 0s_{\frac{1}{2}}, \nu_2 = 0s_{\frac{1}{2}}$ und $J = 0$ und $T = 1$. Die Koeffizienten c_l sind ab $l = 20$ sehr klein und deswegen reicht $N_{dim} = 30$ vollkommen aus.

In Abbildung (4.4) sind die Koeffizienten c_l von

$$\langle rNL(ls)jJT | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A = \sum_l c_l j_l(k_l r) \quad (4.35)$$

dargestellt. Man sieht daß $N_{dim} = 30$ vollkommen ausreicht, weil die Koeffizienten c_l ab $l = 20$ sehr klein sind.

Abbildung (4.5) stellt die $\langle rNL(ls)jJT | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$, die mit $N_{dim} = 30, N_{dim} = 20, N_{dim} = 10$ ausgerechnet wurden, gegenüber. Die $\langle rNL(ls)jJT | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ die mit $N_{dim} = 30, N_{dim} = 20$ ausgerechnet wurden sind nicht zu unterscheiden. $N_{dim} = 20$ reicht also vollkommen aus, $N_{dim} = 10$ dagegen nicht, weil sich eine andere Kurve ergibt.

Wählt man r_{Box} größer, so muß man N_{dim} größer wählen, wie Abbildung (4.6) zeigt: Die Entwicklungskoeffizienten c_l sind bei $r_{Box} = 15 fm$ und $N_{dim} = 40$ bei $l = 20$ noch nicht vernachlässigbar.

Durch diese Diskretisierung des Ansatzes für $S_{2Ql}(r)$ geht die Bestimmungsgleichung für $S_{2Ql}(r)$ in ein Gleichungssystem zur Bestimmung der c_α über.

Die Potentialmatrixelemente sind diagonal in den Betragsquantenzahlen J und T des Gesamtdrehimpulses \vec{J} und des Gesamtsospins \vec{T} und unabhängig

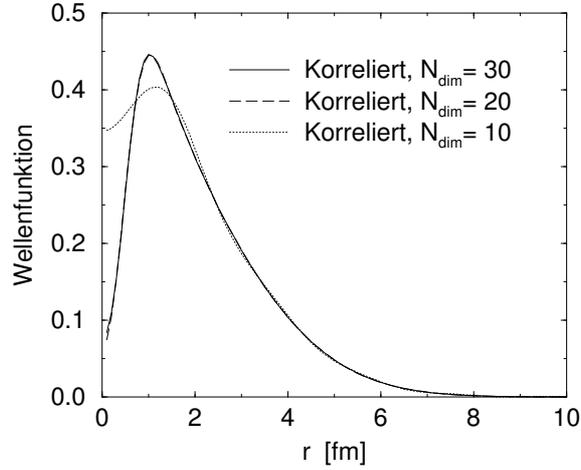


Abbildung 4.5: Diese Abbildung zeigt die korrelierte Zweiteilchen-Wellenfunktion $\langle rNL(ls)jJT | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ für $J = 0$ und $T = 1$ und für die Quantenzahlen: $N = 0, L = 0, {}^{2s+1}l_j = {}^1S_0, \nu_1 = 0s_{\frac{1}{2}}, \nu_2 = 0s_{\frac{1}{2}}$ und für $N_{dim} = 30, N_{dim} = 20, N_{dim} = 10$. Die beiden Kurven mit $N_{dim} = 20$ und $N_{dim} = 30$ sind nicht zu unterscheiden und zeigen das $N_{dim} = 20$ vollkommen ausreicht. $N_{dim} = 10$ reicht dagegen nicht aus, weil sich eine andere Kurve ergibt.

von deren Projektionen M und M_T auf die z-Achse. Der Übergang von der $|n_1 n_2 (l_1 s_1) j_1 (l_2 s_2) j_2 J M T M_t\rangle$ -Basis in eine Schwerpunktsbasis findet nun folgendermassen statt: Die Umwandlung von der Drehimpulskopplung

$$\vec{j}_1 = \vec{l}_1 + \vec{s}_1 \quad (4.36)$$

$$\vec{j}_2 = \vec{l}_2 + \vec{s}_2 \quad (4.37)$$

$$\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2 \quad (4.38)$$

in die Drehimpulskopplung

$$\vec{\lambda} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 \quad (4.39)$$

$$\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \quad (4.40)$$

$$\vec{J} = \vec{\lambda} + \vec{s} \quad (4.41)$$

geschieht durch die 9j-Symbole:

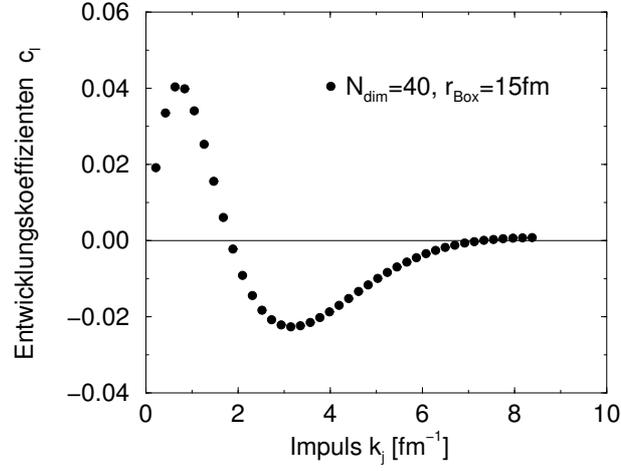


Abbildung 4.6: Diese Abbildung zeigt die Koeffizienten c_l von Gleichung (4.35) für die Quantenzahlen: $N = 0, L = 0, {}^{2s+1}l_j = {}^1S_0, \nu_1 = 0s_{\frac{1}{2}}, \nu_2 = 0s_{\frac{1}{2}}$ und $J = 0$ und $T = 1$. Die Koeffizienten c_l sind für $r_{Box} = 15fm$ bestimmt worden. Verglichen mit den Koeffizienten c_l von Abbildung (4.4) die für $r_{Box} = 10fm$ bestimmt wurden sind die c_l nun für $l = 20$ noch nicht vernachlässigbar.

$$\begin{aligned}
& |n_1 n_2 (l_1 l_2) \lambda (s_1 s_2) s J M T M_t \rangle \\
&= \sum_{j_1, j_2} \langle (l_1 l_2) \lambda (s_1 s_2) s J | (l_1 s_1) j_1 (l_2 s_2) j_2 J \rangle \\
&\quad \times |n_1 n_2 (l_1 s_1) j_1 (l_2 s_2) j_2 J M T M_t \rangle
\end{aligned} \tag{4.42}$$

mit

$$\begin{aligned}
& \langle (l_1 l_2) \lambda (s_1 s_2) s J | (l_1 s_1) j_1 (l_2 s_2) j_2 J \rangle \\
&= \left[(2\lambda + 1)(2s + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{array}{ccc} l_1 & s_1 & j_1 \\ l_2 & s_2 & j_2 \\ \lambda & s & J \end{array} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Mit Hilfe der Moshinskytransformation gelangen wir danach zur Basis

$$|nN(Ll)\lambda s J M T M_T \rangle. \tag{4.44}$$

wobei die Betragsquantenzahlen des Gesamtbahndrehimpuls $\hat{\lambda} = \hat{L} + \hat{l}$ nun mit λ bezeichnet wird. Koppelt man drei Drehimpulse, d.h. Schwerpunktsbahndrehimpuls \vec{L} , Relativbahndrehimpuls \vec{l} und Gesamtspin \vec{s} zum Gesamtdrehimpuls \vec{J} , so gibt es verschiedene Sätze von maximal kommutierenden Operatoren und dadurch auch äquivalente Sätze von Eigenvektoren. In unserem Fall ist das der Satz

$$\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{l}^2, \hat{s}^2, (\hat{L} + \hat{l})^2. \quad (4.45)$$

mit den Eigenvektoren

$$|nN(Ll)\lambda s J M T M_T\rangle. \quad (4.46)$$

und der Satz

$$\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{l}^2, \hat{s}^2, (\hat{l} + \hat{s})^2 \quad (4.47)$$

mit den Eigenvektoren

$$|nNL(ls)j J M T M_T\rangle; \quad (4.48)$$

Die Transformation zwischen diesen beiden sets von äquivalenten Eigenvektoren

$$|nNL(ls)j J M T M_T\rangle = \sum_{\lambda} \langle (Ll)\lambda s J | L(ls)j J \rangle |nN(Ll)\lambda s J M T M_T\rangle \quad (4.49)$$

enthält die $6j$ -Symbole:

$$\begin{aligned} & \langle (Ll)\lambda s J | L(ls)j J \rangle \\ &= (-1)^{L+l+s+J} \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)} \left\{ \begin{matrix} L & l & \lambda \\ s & J & j \end{matrix} \right\}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Wir benutzen normierte antisymmetrische Zweiteilchenzustände $|n_{\alpha}l_{\alpha}j_{\alpha}n_{\beta}l_{\beta}j_{\beta}J M T M_T\rangle_A$. Für sie gilt:

$$\begin{aligned} & |n_{\alpha}l_{\alpha}j_{\alpha}n_{\beta}l_{\beta}j_{\beta}J M T M_T\rangle_A = \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} F [|n_{\alpha}l_{\alpha}j_{\alpha}n_{\beta}l_{\beta}j_{\beta}J M T M_T\rangle + \\ & (-1)^{j_{\alpha}+j_{\beta}+J+T} |n_{\beta}l_{\beta}j_{\beta}n_{\alpha}l_{\alpha}j_{\alpha}J M T M_T\rangle] \quad , \end{aligned} \quad (4.51)$$

mit $F = \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{n_{\alpha}n_{\beta}}\delta_{l_{\alpha}l_{\beta}}\delta_{j_{\alpha}j_{\beta}}}} = f(\alpha, \beta)$.

Daraus folgt mit der Abkürzung

$$|n_{\beta}l_{\beta}j_{\beta}n_{\alpha}l_{\alpha}j_{\alpha}J M T M_T\rangle_A = |\beta\alpha J M T M_T\rangle_A, \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned}
& |\beta\alpha JMTM_T\rangle_A \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}F [|\beta\alpha JMTM_T\rangle + (-1)^{j_\alpha+j_\beta+J+T} |\alpha\beta JMTM_T\rangle] \\
&= (-1)^{j_\alpha+j_\beta+J+T} \frac{1}{\sqrt{2}}F [|\alpha\beta JMTM_T\rangle + (-1)^{j_\alpha+j_\beta+J+T} |\beta\alpha JMTM_T\rangle] \\
&= +(-1)^{j_\alpha+j_\beta+J+T} |\alpha\beta JMTM_T\rangle_A
\end{aligned} \tag{4.53}$$

Es verschwinden also die Kets $|\alpha\alpha JMTM_T\rangle_A$ für die der Faktor $(-1)^{j_\alpha+j_\alpha+J+T}$ negativ ist. Weil die Einteilchenzustände einen halbzahligen Drehimpuls j_α besitzen ist $j_\alpha + j_\alpha$ ungerade und $J + T$ muss auch ungerade sein, damit der Zustand $|\alpha\alpha JMTM_T\rangle_A$ existiert.

Wir benutzen normierte antisymmetrische Zustände $|nNL(ls)jJMTM_T\rangle$ im Schwerpunkts- und Relativsystem. Für sie muss $l + s + T$ ungerade sein . Damit nimmt die $[S_2] = 0$ -Gleichung (3.14) folgende Gestalt an

$$\begin{aligned}
& \langle rNL(ls)jJT | (\hat{T}_1 + \hat{T}_2 + V_{12})\hat{S}_2 |(\nu_1\nu_2)JT\rangle_A \\
&+ \langle rNL(ls)jJT | (\sum_\nu \hat{S}_2 |(\nu\nu_2)JT\rangle_A h_{\nu\nu_1} + \hat{S}_2 |(\nu_1\nu)JT\rangle_A h_{\nu\nu_2}) \\
&= - \sum_{\nu \leq \nu'} \langle rNL(ls)jJT | \hat{S}_2 |(\nu\nu')JT\rangle_{AA} \langle (\nu\nu')JT | V_{12}\hat{\Psi}_2 |(\nu_1\nu_2)JT\rangle_A \\
&+ \langle rNL(ls)jJT | \hat{P}(\hat{T}_1 + \hat{T}_2)\hat{S}_2 |(\nu_1\nu_2)JT\rangle_A \\
&+ \langle rNL(ls)jJT | \hat{P}V_{12}\hat{\Psi}_2 |(\nu_1\nu_2)JT\rangle_A \\
&- \sum_{\alpha,\beta} \langle rNL(ls)jJT | V_{12} |(\alpha\beta)JT\rangle \langle \alpha | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle \beta | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle f(\nu_1, \nu_2)
\end{aligned} \tag{4.54}$$

$1 - \hat{P}$ ist der selbstkonsistente Paulioperator mit

$$\begin{aligned}
& \langle x_1 x_2 | \hat{P} | \alpha \beta \rangle = \sum_\nu \langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu \rangle \delta_{\nu\alpha} \langle x_2 | \beta \rangle \\
&+ \sum_\nu \left\{ \langle x_2 | \hat{\Psi}_1 | \nu \rangle \delta_{\nu\beta} \langle x_1 | \alpha \rangle - \sum_{\nu'} \langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu \rangle \delta_{\nu\alpha} \langle x_2 | \hat{\Psi}_1 | \nu' \rangle \delta_{\nu'\beta} \right\}
\end{aligned} \tag{4.55}$$

Im reinen Oszillatormodell ist $\hat{S}_1 = 0$ und $\hat{\Psi}_1$ ist

$$\langle x_1 | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle = \langle x_1 | \nu_1 \rangle \tag{4.56}$$

und $\langle \nu_1 \nu_2 | \hat{P} | \alpha \beta \rangle$ ergibt sich zu

$$\langle \nu_1 \nu_2 | \hat{P} | \alpha \beta \rangle = +\delta_{\nu_1\alpha} \delta_{\nu_2\beta}. \tag{4.57}$$

Gleichung (4.54) wird nun für die bestimmten Quantenzahlen

$$\nu_1, \nu_2, J, T$$

und

$$N, L, s, j, J, T, l$$

betrachtet, wobei die Abkürzungen

$$Q = (N, L, s, j, J, T)$$

und

$$\hat{Q} = (N, L, s, j, J, T, \nu_1, \nu_2)$$

bzw. wenn die Quantenzahlen ν_1, ν_2 explizit angedeutet werden sollen

$$\hat{Q}_{\nu_1, \nu_2} = (N, L, s, j, J, T, \nu_1, \nu_2)$$

verwendet werden. Die linke Seite der Gleichung (4.54) lautet

$$\begin{aligned} & \langle rNL(ls)jJT | (\hat{T}_1 + \hat{T}_2 + V_{12}) \hat{S}_2 | (\nu_1 \nu_2) JT \rangle_A \\ & + \langle rNL(ls)jJT | (\sum_{\nu} \hat{S}_2 | (\nu \nu_2) JT \rangle_A h_{\nu \nu_1} + \hat{S}_2 | (\nu_1 \nu) JT \rangle_A h_{\nu \nu_2}) \end{aligned}$$

Es werden nun Zustände

$$\begin{aligned} & |k_{\alpha} NL(ls)jJT \rangle \\ & = \int_0^{r_{Box}} r^2 dr |rNL(ls)jJT \rangle \langle rNL(ls)jJT | k_{\alpha} NL(ls)jJT \rangle \\ & = \int_0^{r_{Box}} r^2 dr |rNL(ls)jJT \rangle N_{\alpha l j l}(k_{\alpha} r) \end{aligned}$$

benutzt für die die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{k_{\alpha}, N, L, l, s, j, J, T} |k_{\alpha} NL(ls)jJT \rangle \langle k_{\alpha} NL(ls)jJT | = 1 \quad (4.58)$$

gilt.

Weil $\hat{T}_1 + \hat{T}_2 = \hat{T}_{rel} + \hat{T}_{cm}$ ist folgt nach Einschub von

$$1 = \sum_{k_{\alpha}, l, Q} |k_{\alpha} lQ \rangle \langle k_{\alpha} lQ |$$

vor der Klammer und Einschub von

$$1 = \sum_{k_{\beta}, l', Q'} |k_{\beta} l' Q'\rangle \langle k_{\beta} l' Q'|$$

nach der Klammer ergibt

$$\begin{aligned} & \sum_{k_{\alpha}, k_{\beta}, l, l'} N_{\alpha l} j_l(k_{\alpha} r) \\ & \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \times \left[\left(\langle k_{\alpha} l Q | \hat{T}_{rel} | k_{\beta} l' Q \rangle + \sum_{N'} \langle NL | \hat{T}_{cm} | N' L \rangle \right) \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \right. \\ & \left. - \sum_{\nu} \left(h_{\nu\nu_1} \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu \nu_2 JT \rangle_A + h_{\nu\nu_2} \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu JT \rangle_A \right) \right] \\ & + \langle k_{\alpha} l Q | V_{12} | k_{\beta} l' Q \rangle \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \\ & = \sum_{k_{\alpha}, k_{\beta}, l, l'} N_{\alpha l} j_l(k_{\alpha} r) \\ & \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \times \left[\left(\frac{\hbar^2}{m} k_{\beta}^2 + \sum_{N'} \langle NL | \hat{T}_{cm} | N' L \rangle \right) \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \right. \\ & \left. - \sum_{\nu} \left(h_{\nu\nu_1} \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu \nu_2 JT \rangle_A + h_{\nu\nu_2} \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu JT \rangle_A \right) \right] \\ & + \langle k_{\alpha} l Q | V_{12} | k_{\beta} l' Q \rangle \langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \end{aligned}$$

Die $\langle k_{\beta} l' Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ sind die gesuchten Koeffizienten

$$c_{\beta l \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}}$$

von

$$\langle r NL(l s) j JT | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A = \langle r l Q | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A = \sum_{\beta} c_{\beta l \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}} j_l(k_{\beta} r)$$

Integration von links mit $\int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\gamma l} j_l(k_{\gamma} r)$ liefert:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_{\beta}, l'} \\ & \delta_{\gamma\beta} \delta_{ll'} \times \left[\left(\frac{\hbar^2}{m} k_{\beta}^2 + 2N + L + \frac{3}{2} + \sum_{N' \neq N} \langle NL | \hat{T}_{cm} | N' L \rangle \right) c_{\beta l' \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}} \right. \\ & \left. - \sum_{\nu} \left(h_{\nu\nu_1} c_{\beta l' \hat{Q}_{\nu\nu_2}} + h_{\nu\nu_2} c_{\beta l' \hat{Q}_{\nu_1\nu}} \right) \right] \\ & + \langle k_{\gamma} l Q | V_{12} | k_{\beta} l' Q \rangle c_{\beta l' \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}} \quad (4.59) \\ & = \left[\left(\frac{\hbar^2}{m} k_{\gamma}^2 + 2N + L + \frac{3}{2} + \sum_{N' \neq N} \langle NL | \hat{T}_{cm} | N' L \rangle \right) c_{\gamma l \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}} \right. \\ & \left. - \sum_{\nu} \left(h_{\nu\nu_1} c_{\gamma l \hat{Q}_{\nu\nu_2}} + h_{\nu\nu_2} c_{\gamma l \hat{Q}_{\nu_1\nu}} \right) \right] \\ & + \sum_{k_{\beta}, l'} \langle k_{\gamma} l Q | V_{12} | k_{\beta} l' Q \rangle c_{\beta l' \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}} \end{aligned}$$

Das maximal zugelassene j ist in dem Programm zur Lösung von (4.54), (4.9) für ^{16}O bzw. (4.17) für ^{40}Ca drei:

$$j_{relmx} = 3$$

Die maximal zugelassene Bahndrehimpulsquantenzahl l ist

$$l_{max} = 4$$

Das beschränkt die gekoppelten V_{12} -Matrixelemente

$$\langle k_{\gamma} l Q | V_{12} | k_{\beta} l' Q \rangle$$

mit $l' \neq l$ auf drei:

$$\langle k_{\gamma} N L^{2s+1} l_j J T | V_{12} | k_{\beta} N L^{2s+1} l'_j J T \rangle \neq 0$$

für $T=0$ bei

$$\begin{aligned} {}^{2s+1}l_j &= {}^3S_1 & {}^{2s+1}l'_j &= {}^3D_1 \\ {}^{2s+1}l_j &= {}^3D_3 & {}^{2s+1}l'_j &= {}^3G_3 \end{aligned} \quad (4.60)$$

für $T=1$ bei

$${}^{2s+1}l_j = {}^3P_2 \quad {}^{2s+1}l'_j = {}^3F_2 \quad (4.61)$$

Falls V_{12} in l nichtdiagonal ist muß genauso noch von links über

$$\int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\gamma l'} j_{l'}(k_{\gamma} r)$$

integriert werden und es entsteht eine zweite gekoppelte Gleichung für die Koeffizienten $c_{\beta l \hat{Q}}$, $c_{\beta l' \hat{Q}}$:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\hbar^2}{m} k_{\gamma}^2 + 2N + L + \frac{3}{2} + \sum_{N' \neq N} \langle N L | \hat{T}_{cm} | N' L \rangle \right) c_{\gamma l' \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}} \\ & - \sum_{\nu} \left(h_{\nu \nu_1} c_{\gamma l' \hat{Q}_{\nu \nu_2}} + h_{\nu \nu_2} c_{\gamma l' \hat{Q}_{\nu_1 \nu}} \right) \\ & + \sum_{k_{\beta}, l} \langle k_{\gamma} l' Q | V_{12} | k_{\beta} l Q \rangle c_{\beta l \hat{Q}_{\nu_1 \nu_2}} \end{aligned}$$

Benutzt man nichtlokale Potentiale so sind auch im Ortsraum die Potentialmatrixelemente nicht diagonal und man hat gegenüber den nichtdiagonalen Matrixelementen

$$\langle k_{\gamma} l Q | V_{12} | k_{\beta} l' Q \rangle$$

im Impulsraum nichts gewonnen.

Der vierte Term auf der rechten Seite lautet:

$$- \sum_{\alpha, \beta} \langle r N L(l_s) j J T | V_{12} | (\alpha \beta) J T \rangle \langle \alpha | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle \beta | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle f(\nu_1, \nu_2)$$

Weil die $\hat{\Psi}_1$ -Matrixelemente nur ungleich null sind, wenn

$$l_\alpha = l_{\nu_1}, j_\alpha = j_{\nu_1}, m_\alpha = m_{\nu_1}, \tau_\alpha = \tau_{\nu_1} \text{ ist bzw.}$$

wenn

$$l_\beta = l_{\nu_2}, j_\beta = j_{\nu_2}, m_\beta = m_{\nu_2}, \tau_\beta = \tau_{\nu_2} \text{ folgt:}$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{n_\alpha, n_\beta} \langle rNL(ls)jJT | V_{12} | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle \\ & \times \langle n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2} m_{\nu_2} \tau_{\nu_2} | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle f(\nu_1, \nu_2) \end{aligned}$$

Einschub der

$$1 = \sum_{k_\alpha, l, Q} |k_\alpha l Q\rangle \langle k_\alpha l Q|$$

vor V_{12} und Einschub der

$$1 = \sum_{k_\beta, l', Q'} |k_\beta l' Q'\rangle \langle k_\beta l' Q'|$$

nach V_{12} liefert

$$\begin{aligned} & - \sum_{n_\alpha, n_\beta, k_\alpha, k_\beta, l, l'} N_\alpha j_l(k_\alpha r) \langle k_\alpha l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle \langle k_\beta l' Q | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle \\ & \times \langle n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2} m_{\nu_2} \tau_{\nu_2} | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle f(\nu_1, \nu_2) \end{aligned}$$

Für $\langle k_\beta l' Q | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle$ ergibt sich

$$\begin{aligned} & \langle k_\beta l' Q | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle \\ & = \int_0^{r_{Box}} r^2 dr \langle r Q l' | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle N_{\beta l' j_{l'}}(k_\beta r) \\ & = \sum_n \int_0^{r_{Box}} r^2 dr \langle n Q l' | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle N_{\beta l' j_{l'}}(k_\beta r) R_{nl'}(r) \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich für den vierten Term auf der rechten Seite nach Integration über

$$\int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\gamma l} j_l(k_\gamma r)$$

von links:

$$\begin{aligned} & - \sum_{n_\alpha, n_\beta, k_\alpha, k_\beta, l', n} \delta_{\alpha\gamma} \langle k_\alpha l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle \langle n Q l' | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle \\ & \times \langle n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2} m_{\nu_2} \tau_{\nu_2} | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle f(\nu_1, \nu_2) \\ & \times \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\beta l' j_{l'}}(k_\beta r) R_{nl'}(r) \\ & = - \sum_{n_\alpha, n_\beta, k_\beta, l', n} \langle k_\gamma l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle \langle n Q l' | (n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2})JT \rangle \\ & \times \langle n_\alpha l_{\nu_1} j_{\nu_1} m_{\nu_1} \tau_{\nu_1} | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle n_\beta l_{\nu_2} j_{\nu_2} m_{\nu_2} \tau_{\nu_2} | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle f(\nu_1, \nu_2) \\ & \times \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\beta l' j_{l'}}(k_\beta r) R_{nl'}(r) \end{aligned} \quad (4.62)$$

Der erste Term auf der rechten Seite

$$- \sum_{\nu \leq \nu'} \langle rNL(ls)jJT | \hat{S}_2 | (\nu\nu')JT \rangle_{AA} \langle (\nu\nu')JT | V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$$

ergibt nach Einschub der

$$1 = \sum_{k_\beta, l, Q} |k_\beta l Q\rangle \langle k_\beta l Q|$$

und Integration über

$$\int_0^{r_{Boz}} r^2 dr N_{\gamma l} j_l(k_\gamma r)$$

von links

$$\begin{aligned} & - \sum_{\nu \leq \nu', k_\beta} \int_0^{r_{Boz}} r^2 dr N_{\gamma l} j_l(k_\gamma r) N_{\beta l} j_l(k_\beta r) c_{\beta l \hat{Q}} \langle (\nu\nu')JT | V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \\ & = - \sum_{\nu \leq \nu'} c_{\gamma l \hat{Q}} \langle (\nu\nu')JT | V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \end{aligned} \quad (4.63)$$

Term2 und Term3 auf der rechten Seite werden umgeformt indem vor und nach \hat{P} die Einsen

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{\alpha \leq \beta} |(\alpha\beta)JT\rangle_{AA} \langle (\alpha\beta)JT| \\ 1 &= \sum_{\alpha' \leq \beta'} |(\alpha'\beta')JT\rangle_{AA} \langle (\alpha'\beta')JT| \end{aligned}$$

eingeschoben werden:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha \leq \beta, \alpha' \leq \beta'} \langle rNL(ls)jJT | (\alpha\beta)JT \rangle_{AA} \langle (\alpha\beta)JT | \hat{P} | (\alpha'\beta')JT \rangle_A \\ & \times_A \langle (\alpha'\beta')JT | (\hat{T}_1 + \hat{T}_2) \hat{S}_2 + V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \\ & = \sum_{\alpha \leq \beta, \alpha' \leq \beta', n} R_{nl}(r) \langle nNL(ls)jJT | (\alpha\beta)JT \rangle_{AA} \langle (\alpha\beta)JT | \hat{P} | (\alpha'\beta')JT \rangle_A \\ & \times_A \langle (\alpha'\beta')JT | (\hat{T}_1 + \hat{T}_2) \hat{S}_2 + V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \end{aligned}$$

Integration über

$$\int_0^{r_{Boz}} r^2 dr N_{\gamma l} j_l(k_\gamma r)$$

von links liefert:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha \leq \beta, \alpha' \leq \beta', n} \int_0^{r_{Boz}} r^2 dr N_{\gamma l} j_l(k_\gamma r) R_{nl}(r) \langle nNL(ls)jJT | (\alpha\beta)JT \rangle_A \\ & \times_A \langle (\alpha\beta)JT | \hat{P} | (\alpha'\beta')JT \rangle_{AA} \langle (\alpha'\beta')JT | (\hat{T}_1 + \hat{T}_2) \hat{S}_2 + V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \end{aligned} \quad (4.64)$$

Der Term $_A \langle (\alpha'\beta')JT | (\hat{T}_1 + \hat{T}_2) \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ berechnet sich als:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \langle \alpha' | \hat{T} | \alpha \rangle \langle \alpha\beta JT | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A f(\alpha', \beta') \\ & + \sum_{\beta} \langle \beta' | \hat{T} | \beta \rangle \langle \alpha'\beta JT | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A f(\alpha', \beta') \end{aligned}$$

Einschub von

$$1 = \sum_{k_\beta, l, Q} |k_\beta l Q\rangle \langle k_\beta l Q|$$

vor \hat{S}_2 liefert

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha, k_\beta, l, Q} \langle \alpha' | \hat{T} | \alpha \rangle \langle \alpha \beta' JT | k_\beta l Q \rangle c_{\beta l \hat{Q}} f(\alpha', \beta') \\ & + \sum_{\beta, k_\beta, l, Q} \langle \beta' | \hat{T} | \beta \rangle \langle \alpha' \beta JT | k_\beta l Q \rangle c_{\beta l \hat{Q}} f(\alpha', \beta') \\ & = \sum_{\alpha, k_\beta, l, Q, n} \langle \alpha' | \hat{T} | \alpha \rangle \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\beta l j l}(k_\beta r) R_{nl}(r) \langle \alpha \beta' JT | nl Q \rangle c_{\beta l \hat{Q}} f(\alpha', \beta') \\ & + \sum_{\beta, k_\beta, l, Q, n} \langle \beta' | \hat{T} | \beta \rangle \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\beta l j l}(k_\beta r) R_{nl}(r) \langle \alpha' \beta JT | nl Q \rangle c_{\beta l \hat{Q}} f(\alpha', \beta') \end{aligned} \quad (4.65)$$

Der Term ${}_A \langle (\alpha' \beta') JT | V_{12} \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A$ berechnet sich mit Einschub von

$$1 = \sum_{k_\alpha, l, Q} |k_\alpha l Q\rangle \langle k_\alpha l Q|$$

vor V_{12} und

$$1 = \sum_{k_\beta, l', Q'} |k_\beta l' Q'\rangle \langle k_\beta l' Q'|$$

nach V_{12} als:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_\alpha, l, Q, k_\beta, l'} \langle (\alpha' \beta') JT | k_\alpha l Q \rangle \langle k_\alpha l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle \langle k_\beta l' Q | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \\ & = \sum_{k_\alpha, l, Q, k_\beta, l', n} \langle (\alpha' \beta') JT | nl Q \rangle \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\alpha l j l}(k_\alpha r) R_{nl}(r) \\ & \times \langle k_\alpha l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle \langle k_\beta l' Q | \hat{\Psi}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A \end{aligned}$$

Mit $\hat{\Psi}_2 = \hat{S}_2 + \hat{\Psi}_1$ folgt

$$\begin{aligned} & \sum_{k_\alpha, l, Q, k_\beta, l', n, \alpha, \beta} \langle (\alpha' \beta') JT | nl Q \rangle \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\alpha l j l}(k_\alpha r) R_{nl}(r) \\ & \times \langle k_\alpha l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle c_{\beta l' \hat{Q}} \end{aligned} \quad (4.66)$$

für den \hat{S}_2 -Term und für den $\hat{\Psi}_1$ -Term folgt

$$\begin{aligned} & \sum_{k_\alpha, l, Q, k_\beta, l', n, \alpha, \beta} \langle (\alpha' \beta') JT | nl Q \rangle \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\alpha l j l}(k_\alpha r) R_{nl}(r) \\ & \times \langle k_\alpha l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle \langle k_\beta l' Q | \alpha \beta JT \rangle \langle \alpha | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle \beta | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle f(\nu_1, \nu_2) \\ & = \sum_{k_\alpha, l, Q, k_\beta, l', n, n_\alpha, n_\beta, n'} \langle (\alpha' \beta') JT | nl Q \rangle \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\alpha l j l}(k_\alpha r) R_{nl}(r) \\ & \times \langle k_\alpha l Q | V_{12} | k_\beta l' Q \rangle \langle n_\alpha l_\alpha j_\alpha m_\alpha \tau_\alpha | \hat{\Psi}_1 | \nu_1 \rangle \langle n_\beta l_\beta j_\beta m_\beta \tau_\beta | \hat{\Psi}_1 | \nu_2 \rangle \\ & \times \int_0^{r_{Box}} r^2 dr N_{\beta l' j l'}(k_\beta r) R_{n' l'}(r) \langle n' l' Q | (n_\alpha l_\alpha j_\alpha n_\beta l_\beta j_\beta) JT \rangle f(\nu_1, \nu_2) \end{aligned} \quad (4.67)$$

Nimmt man nun die linke Seite (4.59) und die Terme auf der rechten Seite (4.62), (4.63), (4.64) mit (4.65) und (4.66), (4.67) so hat man die Matrixgleichung für die Koeffizienten $c_{\beta\nu\hat{Q}}$.

Die Einteilchengleichung (4.9)^(¹⁶O) bzw. (4.17)^(⁴⁰Ca) ist ein nichtlineares Gleichungssystem und wurde mit der Routine "newt" aus [19] gelöst.

Die subroutine "newt" ist eine globale konvergente Methode zur Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystem

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{0} \quad (4.68)$$

mit

$$\vec{F} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ f_N \end{pmatrix} \quad (4.69)$$

und

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_N \end{pmatrix} \quad (4.70)$$

Das Verfahren heisst global konvergent weil es immer gegen eine Lösung \vec{x} konvergiert.

In der subroutine "newt" wird das Newtonverfahren mit dem global konvergenten Minimumverfahren verbunden.

Beim eindimensionalen Newtonverfahren wird die Gleichung

$$f(x) = 0 \quad (4.71)$$

dadurch gelöst, dass $f(x)$ approximiert wird:

$$f(x_1) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) \equiv 0 \quad (4.72)$$

und die daraus für x_1 folgende Gleichung

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (4.73)$$

iteriert wird, startend vom Anfangswert x_0

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})} \quad (4.74)$$

bis die Differenz $x_n - x_{n-1}$ kleiner ist als eine vorgegebene Schranke ε . Beim N -dimensionalen Newtonverfahren tritt statt $f'(x_{n-1})^{-1}$ die Inverse der Jacobimatrix $J = (J_{ij})$ mit

$$J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (4.75)$$

auf:

$$\vec{x}_n = \vec{x}_{n-1} - J^{-1}(\vec{x}_{n-1}) \vec{F}(\vec{x}_{n-1}) \quad (4.76)$$

Das Newtonverfahren konvergiert oft nicht, wenn der Startwert \vec{x}_0 zu weit vom Lösungsvektor \vec{x} für den Gleichung (4.68) gilt entfernt ist. Ist der Startwert \vec{x}_0 gut konvergiert das Newtonverfahren sehr schnell. Beim Minimumverfahren wird das Minimum von

$$g(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N |f_i(x_1, \dots, x_N)|^2 \quad (4.77)$$

durch Iteration gesucht. Der Vektor \vec{x} der $g(\vec{x})$ minimiert ist natürlich die gesuchte Lösung zu Gleichung (4.68). Man weiss, dass die Richtung mit dem grössten Abfallen des Wertes von g in \vec{x} durch

$$-\vec{\nabla} g(\vec{x}) \quad (4.78)$$

gegeben ist. Aus einem Startwert \vec{x}_0 bekomme ich einen Vektor \vec{x}_1 mit

$$g(\vec{x}_1) < g(\vec{x}_0) \quad (4.79)$$

durch

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 - \alpha \vec{\nabla} g(\vec{x}_0) \quad (4.80)$$

wobei α bestimmt wird aus

$$h(\alpha) = g(\vec{x}_0 - \alpha \vec{\nabla} g(\vec{x}_0)) = \text{Minimum} \quad (4.81)$$

Beim Minimumverfahren kann die konvergente Lösung \vec{x} auch ein lokales Minimum sein.

Bei der subroutine "newt" wird als erstes

$$\delta \vec{x} = -J^{-1}(\vec{x}_0) \vec{F}(\vec{x}_0) \quad (4.82)$$

aus dem Startwert \vec{x}_0 bestimmt. Danach wird λ ($0 < \lambda \leq 1$) so bestimmt, dass für

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 + \lambda \delta \vec{x} \quad (4.83)$$

gilt:

$$g(\vec{x}_1) < g(\vec{x}_0) \quad (4.84)$$

Das ist möglich, weil man weiss das $\delta \vec{x}$ g erniedrigt:

$$g(\vec{x}_1) \approx g(\vec{x}_0) + \vec{\nabla} g(\vec{x}_0) \lambda \delta \vec{x} \quad (4.85)$$

mit

$$\vec{\nabla} g(\vec{x}_0) \delta \vec{x} = 2 \left(\vec{F}(\vec{x}_0) J(\vec{x}_0) \right) \left(-J^{-1}(\vec{x}_0) \vec{F}(\vec{x}_0) \right) = -2 \vec{F} \vec{F} < 0 \quad (4.86)$$

Mit diesem \vec{x}_1 rechnet man wieder ein $\delta \vec{x}$ aus, danach ein neues \vec{x}_2 mit

$$g(\vec{x}_2) < g(\vec{x}_1) \quad (4.87)$$

und führt dass solange durch bis $\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}$ kleiner ist als eine vorgegebene Schranke ε .

Diese Kombination von Newtonverfahren und Minimumverfahren in der subroutine "newt" kann zwar gelegentlich ein lokales Minimum liefern, hat aber oft Erfolg, wo dass Newtonverfahren alleine versagt.

Die Matrixgleichung Gleichung (4.54) und die Einteilchengleichung (4.9)^(16O) bzw. (4.17)^(40Ca) werden nach folgendem Muster gelöst:

- Am Anfang werden Startwerte für die Matricelemente $\langle \rho | \hat{S}_1 | \nu \rangle$ und die Energiematrix $h_{\nu\nu_1}$ angenommen:

Die beiden Gleichungen (4.9)^(16O) bzw. (4.17)^(40Ca) und (4.54) wurden im Oszillatormodell $\langle \rho | \hat{\Psi}_1 | \nu \rangle = \delta_{\rho\nu}$ gelöst, d. h. die Gleichungen (4.9)^(16O) bzw. (4.17)^(40Ca) sind trivial erfüllt.

Für die $h_{\nu_1\nu_1}$ wurden für ¹⁶O folgende Werte genommen

$$\begin{aligned} h_{0s_{\frac{1}{2}}0s_{\frac{1}{2}}} &= -40 \\ h_{0p_{\frac{3}{2}}0p_{\frac{3}{2}}} &= -25 \\ h_{0p_{\frac{1}{2}}0p_{\frac{1}{2}}} &= -18 \end{aligned} \quad (4.88)$$

die den experimentellen Werten für die Einteilchenenergien entsprechen. Für ⁴⁰Ca wurden für die $h_{\nu_1\nu_1}$ Werte von früheren Rechnungen

mit dem BonnA-Potential genommen:

$$\begin{aligned}
 h_{0s_{\frac{1}{2}}0s_{\frac{1}{2}}} &= -61.366 \\
 h_{0p_{\frac{3}{2}}0p_{\frac{3}{2}}} &= -42.567 \\
 h_{0p_{\frac{1}{2}}0p_{\frac{1}{2}}} &= -39.578 \\
 h_{0d_{\frac{5}{2}}0d_{\frac{5}{2}}} &= -23.631 \\
 h_{1s_{\frac{1}{2}}1s_{\frac{1}{2}}} &= -20.076 \\
 h_{0d_{\frac{3}{2}}0d_{\frac{3}{2}}} &= -19.052
 \end{aligned} \tag{4.89}$$

genauso wie für die Nichtdiagonalelemente $h_{\nu\nu_1}$:

$$\begin{aligned}
 h_{0s_{\frac{1}{2}}1s_{\frac{1}{2}}} &= -11.483 \\
 h_{1s_{\frac{1}{2}}0s_{\frac{1}{2}}} &= -5.742
 \end{aligned} \tag{4.90}$$

- Die Gleichung (4.54) wird im ersten Schritt nur mit dem 4. Term auf der rechten Seite gelöst.
- Mit den dadurch durch Gleichung (4.54) im Impulsraum ausgerechneten $S_{2Q}(k)$ -Funktionen können die ersten drei Terme auf der rechten Seite ausgerechnet werden und bei ^{40}Ca zusätzlich die Terme auf der linken Seite mit den nichtdiagonalen Energiematrixelementen $h_{\nu\nu_1}$.
- Die $S_{2Q}(k)$ -Funktionen ergeben sich als iterative Lösung, indem die im n -ten Schritt ausgerechneten $S_{2Q}(k)$ -Funktionen die $S_{2Q}(k)$ -Funktionen im $n + 1$ -ten Schritt bestimmen und man die iterative Lösung hat, wenn sich alle aufeinanderfolgenden $S_{2Q}(k)$ -Funktionen nicht merklich unterscheiden.
- Mit diesen $S_{2Q}(k)$ -Funktionen rechnet man das Einteilchenpotential U und die $\hat{T}_2\hat{S}_2$ -Matrixelemente aus.
- Mit diesem Einteilchenpotential U und den $\hat{T}_2\hat{S}_2$ -Matrixelementen geht man in die Einteilchengleichung (4.9) $^{(16)\text{O}}$ bzw. (4.17) $^{(40)\text{Ca}}$ und rechnet neue Matrixelemente $\langle \rho | \hat{S}_1 | \nu \rangle$ sowie eine neue Energiematrix $h_{\nu\nu_1}$ aus.
- Jetzt rechnet man physikalische Größen aus, z. B. die Bindungsenergie und den Radius. Wenn der Wert für die Bindungsenergie konvergiert, d. h. sich von Schritt n (in dem beide Gleichungen (4.54), (4.9) $^{(16)\text{O}}$ bzw. (4.17) $^{(40)\text{Ca}}$ gelöst werden) nach Schritt $n + 1$ (in dem beide

Gleichungen (4.54),(4.9)(^{16}O) bzw. (4.17)(^{40}Ca) gelöst werden) nicht merklich unterscheidet, hat man die konvergenten Grössen

$$\langle kNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JMTM_T \rangle_A, h_{\nu\nu_1}, \langle \rho | \hat{S}_1 | \nu \rangle \quad (4.91)$$

bestimmt.

4.2 Lösung der $e^{\hat{S}}$ -Gleichungen in der SUB 3-Näherung

Nachdem nun die Zweiteilchengleichung (4.54) und die Einteilchengleichung (4.9)(^{16}O) bzw. (4.17)(^{40}Ca) in der SUB 2-Näherung gelöst wurden muss man noch die Kopplung zur Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) einfügen (Anmerkung: die $\hat{\chi}_3$ in der Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) sind die 'renormierten' $\hat{\chi}_3$, sie ersetzen die ursprünglichen $V\hat{\chi}_3$ Terme in der Einteilchengleichung (3.13) und der Zweiteilchengleichung (3.14) durch $G\hat{\chi}_3$ Terme, vergleiche die G-matrix-Beziehung $G\phi = V\Psi$, Gleichung (2.87)):

$\hat{\chi}_3$ taucht multipliziert mit der G-matrix G in der Einteilchengleichung (3.13) als

$$\langle \rho \nu_1 \nu_2 | \hat{G}_{23} \hat{\chi}_3^{23} | \nu \nu_1 \nu_2 \rangle \quad (4.92)$$

bzw. in der Zweiteilchengleichung (3.14) als

$$\langle \rho_1 \rho_2 \nu | \hat{Q} \hat{G}_{13} \hat{\chi}_3^{13} | \nu_1 \nu_2 \nu \rangle + \langle \rho_1 \rho_2 \nu | \hat{Q} \hat{G}_{23} \hat{\chi}_3^{23} | \nu_1 \nu_2 \nu \rangle \quad (4.93)$$

auf.

Genauer gesagt:

- in der Zweiteilchengleichung (3.14) tritt ein Drei-Teilchenpotential

$$U_{32} = \sum_{\nu} \langle \rho_1 \rho_2 \nu | \hat{Q} \hat{G}_{13} \hat{\chi}_3^{13} | \nu_1 \nu_2 \nu \rangle + \sum_{\nu} \langle \rho_1 \rho_2 \nu | \hat{Q} \hat{G}_{23} \hat{\chi}_3^{23} | \nu_1 \nu_2 \nu \rangle \quad (4.94)$$

auf und die Lösung der Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) lautet für das Drei-Teilchen-Potential U_{32} ([17]):

$$\begin{aligned} U_{32} &= \sum_{\nu} \langle \rho_1 \rho_2 \nu | \hat{X} \hat{G} (1 + \hat{X} \frac{\hat{Q}_3}{\hat{e}_3} \hat{G})^{-1} \hat{X} A_{\nu} (\hat{S}_2 \hat{\Psi}_1) | \nu_1 \nu_2 \nu \rangle \\ &= \sum_{\nu} \langle \rho_1 \rho_2 \nu | \hat{Y}_2 A_{\nu} (\hat{S}_2 \hat{\Psi}_1) | \nu_1 \nu_2 \nu \rangle \end{aligned} \quad (4.95)$$

mit dem Day'schen Permutationsoperator [27]

$$\begin{aligned}\hat{X} &= |231\rangle \langle 123| + |312\rangle \langle 123| \\ &= |123\rangle \langle 231| + |123\rangle \langle 312|\end{aligned}\quad (4.96)$$

und der Definition des \hat{Y}_2 Operators

$$\hat{Y}_2 = \hat{X} \hat{G} (1 + \hat{X} \frac{\hat{Q}_3}{\hat{e}_3} \hat{G})^{-1} \hat{X} \quad (4.97)$$

- in der Einteilchengleichung (3.13) tritt ein Drei-Teilchenpotential

$$U_{31} = \sum_{\nu_1 \nu_2} \langle \rho \nu_1 \nu_2 | \hat{Q} \hat{G}_{23} \hat{\chi}_3^{23} | \nu \nu_1 \nu_2 \rangle \quad (4.98)$$

auf und die Lösung der Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) lautet für das Drei-Teilchen-Potential U_{31} :

$$\begin{aligned}U_{31} &= \sum_{\nu_1 \nu_2} \langle \rho \nu_1 \nu_2 | \hat{X}_1 \hat{G} (1 + \hat{X} \frac{\hat{Q}_3}{\hat{e}_3} \hat{G})^{-1} \hat{X} A_\nu (\hat{S}_2 \hat{\Psi}_1) | \nu \nu_1 \nu_2 \rangle \\ &= \sum_{\nu_1 \nu_2} \langle \rho \nu_1 \nu_2 | \hat{Y}_1 A_\nu (\hat{S}_2 \hat{\Psi}_1) | \nu \nu_1 \nu_2 \rangle\end{aligned}\quad (4.99)$$

mit der Definition des \hat{Y}_1 Operators

$$\hat{Y}_1 = \hat{X}_1 \hat{G} (1 + \hat{X} \frac{\hat{Q}_3}{\hat{e}_3} \hat{G})^{-1} \hat{X} \quad (4.100)$$

in der gegenüber dem \hat{Y}_2 Operator (4.97) am Anfang statt dem Day'schen Permutationsoperator X (4.96) nun nur der erste Teil im Operator

$$\begin{aligned}\hat{X}_1 &= |231\rangle \langle 123| \\ &= |123\rangle \langle 231|\end{aligned}\quad (4.101)$$

berücksichtigt wird weil er im Gegensatz zum U_{32} -Potential nur die $\hat{G}_{23} \hat{\chi}_3^{23}$ -Komponente von $\hat{G} \hat{\chi}$ herausgreift und nicht noch die $\hat{G}_{13} \hat{\chi}_3^{13}$ -Komponente die nur beim U_{32} -Potential auftritt.

Die Berechnung von G-Matrix-Elementen für endliche Kerne wurde möglich durch Erweiterung der Techniken zur Lösung der Bethe-Goldstone-Gleichung auf endliche Systeme wie in [29] beschrieben wird.

Mit den in der SUB 2-Näherung ausgerechneten

$\langle kNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JMTM_T \rangle_A$ und $\langle \rho | \hat{S}_1 | \nu \rangle$ können die $\hat{\chi}_3$ mit Hilfe der Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) ausgerechnet werden. Das U_{31} -Potential (4.99) der Einteilchengleichung (3.13) und das U_{32} -Potential (4.95) der Zweiteilchengleichung (3.14) werden nun in einer neuen SUB 2 Iteration der Gleichungen (4.54), ((4.9)^(16O) bzw. (4.17)^(40Ca)) berücksichtigt. Unterscheiden sich aufeinanderfolgende SUB 2 Iterationen (mit jeweils neu ausgerechneten U_{31} -, U_{32} -Potentialen (4.99, 4.95)) nicht mehr voneinander, d. h. liefern die gleichen Bindungsenergien und Radien, haben wir $\Psi = e^{\hat{S}} |\phi\rangle$ in SUB 3-Näherung berechnet.

Bei der Lösung der Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) taucht ein technisches Problem auf:

Wir müssen zwischen verschiedenen Drei-Teilchen-Darstellungen wie in dem Day'schen Permutationsoperator (4.96) und dem \hat{X}_1 -Operator (4.101) wechseln. Eine relativ einfache Transformation zwischen den beiden Drei-Teilchen-Zuständen $|231\rangle$ und $|123\rangle$ des \hat{X}_1 -Operators gibt es für die Einteilchenzustände ν der ebenen Wellen (geeignet für Kernmaterie) und für die Einteilchenzustände ν des harmonischen Oszillators (geeignet für endliche Kerne).

Die drei Teilchen werden durch drei Jakobikoordinaten beschrieben:

1. der Schwerpunkt $\vec{\mathcal{R}}$ aller drei Teilchen:

$$\vec{\mathcal{R}} = \sqrt{\frac{1}{3}}(\vec{x}_1 + \vec{x}_2 + \vec{x}_3)$$

2. die Bewegung von Teilchen k relativ zum Schwerpunkt von Teilchen i und j:

$$\vec{R}_k = \sqrt{\frac{2}{3}}(\vec{x}_k - \frac{1}{2}(\vec{x}_i + \vec{x}_j))$$

3. die relative Bewegung von Teilchen i zu Teilchen j:

$$\vec{r}_k = \sqrt{\frac{1}{2}}(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$$

wobei (ijk) zyklisch sind.

Für die Einteilchenzustände des harmonischen Oszillators lauten nun die Dreiteilchenzustände des X-Operators: $|123\rangle = |[12]3\rangle = \{[n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\} \mathcal{J}^{\pi} \mathcal{T} \mathcal{N} \mathcal{L} I \rangle$.

In dieser Nomenklatur bedeutet weil die Relativbewegung von Teilchen 1 zu Teilchen 2 betrachtet wird:

- das der Dreiteilchenzustand $|123\rangle$ durch die Quantenzahlen zur Jakobikoordinate \vec{r}_3 beschrieben wird:

n ist die Prinzipal-Quantenzahl des harmonischen Oszillators von der Relativbewegung von Teilchen 1 zu Teilchen 2

l ist die Bahndrehimpulsquantenzahl des harmonischen Oszillators von der Relativbewegung von Teilchen 1 zu Teilchen 2

s ist die Gesamtspinquantenzahl von der Kopplung vom Spin von Teilchen 1 zum Spin von Teilchen 2

t ist die Gesamtisospinquantenzahl von der Kopplung vom Isospin von Teilchen 1 zum Isospin von Teilchen 2

j ist die Gesamtdrehimpulsquantenzahl von der Kopplung vom Bahndrehimpuls mit dem Gesamtspin

- das der Dreiteilchenzustand $|123\rangle$ durch die Quantenzahlen zur Jakobikoordinate \vec{R}_3 beschrieben wird :
 N ist die Prinzipal-Quantenzahl des harmonischen Oszillators von der Relativbewegung von Teilchen 3 zum Schwerpunkt von Teilchen 1 und 2
 L ist die Bahndrehimpulsquantenzahl des harmonischen Oszillators von der Relativbewegung von Teilchen 3 zum Schwerpunkt von Teilchen 1 und 2
 J ist die Gesamtdrehimpulsquantenzahl von der Kopplung vom Bahndrehimpuls mit Quantenzahl L mit dem Spin von Teilchen 3
- das der Dreiteilchenzustand $|123\rangle$ durch die Quantenzahlen
 \mathcal{J} des totalen relativen Drehimpulses
 π der totalen relativen Dreiteilchenparität
 \mathcal{T} des totalen Dreiteilchenisospins
 \mathcal{N} der Prinzipal-Quantenzahl des harmonischen Oszillators von der Schwerpunktsbewegung aller drei Teilchen
 \mathcal{L} der Bahndrehimpulsquantenzahl des harmonischen Oszillators von der Schwerpunktsbewegung aller drei Teilchen
 I der Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses aller drei Teilchen beschrieben wird.

Beim \hat{X}_1 Operator (4.101) findet eine Transformation vom

- Zustand $|231\rangle$ mit Jakobikoordinaten \vec{r}_1 und \vec{R}_1 zum
- Zustand $|123\rangle$ mit Jakobikoordinaten \vec{r}_3 und \vec{R}_3

statt:

$$\langle \{ [n(l s) j t] N(L \frac{1}{2}) J \} \mathcal{J}^\pi \mathcal{T} \mathcal{N} \mathcal{L} I | 231 \rangle \langle 123 | \{ [n'(l' s') j' t'] N'(L' \frac{1}{2}) J' \} \mathcal{J}^\pi \mathcal{T} \mathcal{N} \mathcal{L} I \rangle$$

$$= \langle [n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\mathcal{J}\mathcal{T} | \hat{X}_1 | \{[n'(l's')j't']N'(L'\frac{1}{2})J'\mathcal{J}\mathcal{T} \rangle$$

die unabhängig ist von den Quantenzahlen \mathcal{N} , \mathcal{L} der Schwerpunktsbewegung aller drei Teilchen und der Quantenzahl I des Gesamtdrehimpulses aller drei Teilchen. Ausserdem müssen die Quantenzahlen \mathcal{J} des totalen relativen Drehimpulses, π der totalen relativen Dreiteilchenparität und \mathcal{T} des totalen Dreiteilchenisospins für beide Zustände gleich sein. Um die Transformation zwischen diesen beiden Dreiteilchenzuständen herzuleiten geht man folgendermassen vor

1. man koppelt Spins, Isospins und Bahndrehimpulse separat, indem man Spins und Bahndrehimpulse voneinander entkoppelt:

$$\begin{aligned} & \langle (ls)j(L\frac{1}{2})J\mathcal{J} | \\ &= \sum_{\lambda S} \langle (ls)j(L\frac{1}{2})J\mathcal{J} | (lL)\lambda(s\frac{1}{2})S\mathcal{J} \rangle \langle (lL)\lambda(s\frac{1}{2})S\mathcal{J} | \end{aligned} \quad (4.102)$$

und

$$\begin{aligned} & | (l's')j'(L'\frac{1}{2})J'\mathcal{J} \rangle \\ &= \sum_{\lambda S} \langle (l'L')\lambda(s'\frac{1}{2})S\mathcal{J} | (l's')j'(L'\frac{1}{2})J'\mathcal{J} \rangle | (l'L')\lambda(s'\frac{1}{2})S\mathcal{J} \rangle \end{aligned} \quad (4.103)$$

2. man ordnet die Teilchen in beiden Zuständen in der gleichen Reihenfolge, die dazu notwendigen Vertauschungen ändern die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Isospin- und Spin-Kopplungen:

die Vertauschung beim Zustand $|[23]1\rangle$ zum Zustand $|1[23]\rangle$ liefert einen Clebsch-Gordan-Phasenfaktor von $(-1)^{\frac{1}{2}+s-S}$ für den Spin und einen Clebsch-Gordan-Phasenfaktor von $(-1)^{\frac{1}{2}+t-T}$ für den Isospin.

Da die Transformationen $\langle \frac{1}{2}(\frac{1}{2}\frac{1}{2})sS | (\frac{1}{2}\frac{1}{2})s'\frac{1}{2}S \rangle$ für den Spin und $\langle \frac{1}{2}(\frac{1}{2}\frac{1}{2})tT | (\frac{1}{2}\frac{1}{2})t'\frac{1}{2}T \rangle$ für den Isospin folgende Gestalt haben, folgt für den Spin (und genauso für den Isospin), siehe Gleichung (4.50)

$$\begin{aligned} & \langle \frac{1}{2}(\frac{1}{2}\frac{1}{2})sS | (\frac{1}{2}\frac{1}{2})s'\frac{1}{2}S \rangle \\ &= (-1)^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+S} \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s' \\ \frac{1}{2} & S & s \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (4.104)$$

und es ergibt sich zusammen mit den Clebsch-Gordan-Phasenfaktoren für den Spinanteil der Transformation $\langle (lL)\lambda(s\frac{1}{2})S\mathcal{J} | (l'L')\lambda(s'\frac{1}{2})S\mathcal{J} \rangle$:

$$(-1)^s \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s' \\ \frac{1}{2} & S & s \end{array} \right\}$$

$$= (-1)^s \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ S & \frac{1}{2} & s' \end{Bmatrix}. \quad (4.105)$$

und eine entsprechende Formel für den Isospinanteil.

3. man sucht eine Transformation zwischen den Jakobikoordinaten \vec{r}_1, \vec{R}_1 und den Jakobikoordinaten \vec{r}_3, \vec{R}_3 :
Diese lautet wie man mit der Definition der Jakobikoordinaten leicht nachprüft folgendermassen:

$$\begin{pmatrix} \vec{r}_1 \\ \vec{R}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{3}{4}} & -\sqrt{\frac{1}{4}} \\ \sqrt{\frac{1}{4}} & \sqrt{\frac{3}{4}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\vec{R}_3 \\ \vec{r}_3 \end{pmatrix} \quad (4.106)$$

Die Transformationsmatrix ist dieselbe, wie die Transformation vom Laborsystem zweier harmonischer Oszillatoren mit Masse m_1 , Ortskoordinate \vec{r}_1 und Masse m_2 , Ortskoordinate \vec{r}_2 und dem Massenverhältnis $\frac{m_2}{m_1} = d$ ($d = 3$ in Gleichung (4.106)) ins Relativ- und Schwerpunktsystem der beiden harmonischen Oszillatoren. Die Transformation vom Laborsystem der beiden harmonischen Oszillatoren mit Ortskoordinaten \vec{r}_1, \vec{r}_2 ins Schwerpunktsystem mit Relativkoordinate \vec{r} und Schwerpunktkoordinate \vec{R} lautet also folgendermassen [28]:

$$\begin{pmatrix} \vec{r} \\ \vec{R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{d}{1+d}} & -\sqrt{\frac{1}{1+d}} \\ \sqrt{\frac{1}{1+d}} & \sqrt{\frac{d}{1+d}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r}_1 \\ \vec{r}_2 \end{pmatrix} \quad (4.107)$$

Die Talmi-Moshinsky-Klammer $\langle nlNL\lambda | n_1 l_1 n_2 l_2 \lambda \rangle_d$ verbindet die Eigenzustände der beiden harmonischen Oszillatoren (mit Massenverhältnis $\frac{m_2}{m_1} = d$) im Laborsystem $|n_1 l_1 n_2 l_2 \lambda M\rangle$ mit den Eigenzuständen $|nlNL\lambda M\rangle$ im Schwerpunktsystem, vergleiche Gleichung (4.28),

$$|nlNL\lambda M\rangle = \sum_{n_1, n_2, l_1, l_2} \langle nlNL\lambda | n_1 l_1 n_2 l_2 \lambda \rangle_d |n_1 l_1 n_2 l_2 \lambda M\rangle. \quad (4.108)$$

Wenn ich nun um von der Transformation $\langle nlNL\lambda | n' l' N' L' \lambda \rangle$ zur Talmi-Moshinsky-Klammer zu gelangen

- die Jakobikoordinate \vec{R}_3 spiegele und
- die beiden Koordinaten \vec{r}_3 und $-\vec{R}_3$ vertausche

gelange ich zu folgender Beziehung zwischen der gesuchten Transformation $\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle$ und der Talmi-Moshinsky-Klammer $\langle nlNL\lambda|N'L'n'l'\lambda\rangle_3$:

$$\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle = (-1)^{L'}(-1)^{l'+L'-\lambda} \langle nlNL\lambda|N'L'n'l'\lambda\rangle_3 \quad (4.109)$$

wobei die Phasenfaktoren folgendermassen zustandekommen:

- $(-1)^{L'}$ von der Spiegelung von \vec{R}_3 weil für den Winkelanteil der harmonischen Oszillatorzustände $Y_{L'M'}(-\vec{R}_3) = (-1)^{L'}Y_{L'M'}(\vec{R}_3)$ gilt
- $(-1)^{l'+L'-\lambda}$ als Clebsch-Gordan-Phasenfaktor von der Vertauschung der Kopplung von $\vec{l}' + \vec{L}' = \vec{\lambda}$ nach $\vec{L}' + \vec{l}' = \vec{\lambda}$

Benutzt man noch die folgende Vertauschungsrelation der Talmi-Moshinsky-Klammer:

$$\langle nlNL\lambda|N'L'n'l'\lambda\rangle_3 = (-1)^{L-\lambda} \langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\rangle_{\frac{1}{3}} \quad (4.110)$$

so folgt insgesamt für die gesuchte Transformation $\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle$:

$$\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle = (-1)^{l'+L} \langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\rangle_{\frac{1}{3}} \quad (4.111)$$

Fassen wir nun die Ergebnisse (4.105) und eine entsprechende Gleichung für den Isospin und (4.111) zusammen erhalten wir folgende Beziehung für $\langle\{[n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}|\hat{X}_1|\{[n'(l's')j't']N'(L'\frac{1}{2})J'\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}\rangle$:

$$\begin{aligned} & \langle\{[n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}|\hat{X}_1|\{[n'(l's')j't']N'(L'\frac{1}{2})J'\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}\rangle \\ &= \sum_{\lambda S} \langle(ls)j(L\frac{1}{2})J\mathcal{J}|\lambda(s\frac{1}{2})S\mathcal{J}\rangle \langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\rangle_{\frac{1}{3}} \\ & (-1)^{l'+L+s+t} \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s' \\ \frac{1}{2} & S & s \end{array} \right\} \\ & \sqrt{(2t+1)(2t'+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & t' \\ \frac{1}{2} & T & t \end{array} \right\} \langle(l'L')\lambda(s'\frac{1}{2})S\mathcal{J}|\lambda(s\frac{1}{2})S\mathcal{J}\rangle \end{aligned} \quad (4.112)$$

Wir gehen nun genauso wie oben vor um den zweiten Teil des \hat{X} Operators zu finden:

$$\begin{aligned} & \langle\{[n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{TN}\mathcal{L}I|312\chi123|\{[n'(l's')j't']N'(L'\frac{1}{2})J'\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{TN}\mathcal{L}I\rangle \\ &= \langle\{[n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}|\hat{X}_2|\{[n'(l's')j't']N'(L'\frac{1}{2})J'\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}\rangle. \end{aligned}$$

Beim \hat{X}_2 Operator findet eine Transformation vom

- Zustand $|312\rangle$ mit Jakobikoordinaten \vec{r}_2 und \vec{R}_2 zum
- Zustand $|123\rangle$ mit Jakobikoordinaten \vec{r}_3 und \vec{R}_3

statt. Um die Transformation zwischen diesen beiden Dreiteilchenzuständen herzuleiten geht man folgendermassen vor

1. man koppelt Spins, Isospins und Bahndrehimpulse separat, indem man Spins und Bahndrehimpulse voneinander entkoppelt, siehe Gleichungen (4.102), (4.103).
2. man ordnet die Teilchen in beiden Zuständen in der gleichen Reihenfolge, die dazu notwendigen Vertauschungen ändern die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Isospin- und Spin-Kopplungen:
die Vertauschung beim Zustand $\langle [12]3 |$ zum Zustand $\langle 3[12] |$ liefert einen Clebsch-Gordan-Phasenfaktor von $(-1)^{\frac{1}{2}+s'-S}$ für den Spin und einen Clebsch-Gordan-Phasenfaktor von $(-1)^{\frac{1}{2}+t'-T}$ für den Isospin.
Da die Transformationen $\langle (\frac{1}{2}\frac{1}{2})_s \frac{1}{2} S | \frac{1}{2} (\frac{1}{2}\frac{1}{2})_{s'} S \rangle$ für den Spin und $\langle (\frac{1}{2}\frac{1}{2})_t \frac{1}{2} T | \frac{1}{2} (\frac{1}{2}\frac{1}{2})_{t'} T \rangle$ für den Isospin folgende Gestalt haben, folgt für den Spin (und genauso für den Isospin)

$$\begin{aligned} & \langle (\frac{1}{2}\frac{1}{2})_s \frac{1}{2} S | \frac{1}{2} (\frac{1}{2}\frac{1}{2})_{s'} S \rangle \\ &= (-1)^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+S} \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s' \\ \frac{1}{2} & S & s \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (4.113)$$

und es ergibt sich zusammen mit den Clebsch-Gordan-Phasenfaktoren für den Spinanteil der Transformation $\langle (lL)\lambda(s\frac{1}{2})S\mathcal{J} | (l'L')\lambda(s'\frac{1}{2})S\mathcal{J} \rangle$:

$$\begin{aligned} & (-1)^{s'} \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s' \\ \frac{1}{2} & S & s \end{array} \right\} \\ &= (-1)^{s'} \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ S & \frac{1}{2} & s' \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (4.114)$$

und eine entsprechende Formel für den Isospinanteil.

3. man sucht eine Transformation zwischen den Jakobikoordinaten \vec{r}_2, \vec{R}_2 und den Jakobikoordinaten \vec{r}_3, \vec{R}_3 :

Diese lautet wie man mit der Definition der Jakobikoordinaten leicht nachprüft folgendermassen:

$$\begin{pmatrix} \vec{r}_2 \\ -\vec{R}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{3}{4}} & -\sqrt{\frac{1}{4}} \\ \sqrt{\frac{1}{4}} & \sqrt{\frac{3}{4}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{R}_3 \\ \vec{r}_3 \end{pmatrix} \quad (4.115)$$

Wenn ich nun um von der Transformation $\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle$ zur Talmi-Moshinsky-Klammer zu gelangen

- die Jakobikoordinate \vec{R}_2 spiegele und
- die beiden Koordinaten \vec{r}_3 und \vec{R}_3 vertausche

gelange ich zu folgender Beziehung zwischen der gesuchten Transformation $\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle$ und der Talmi-Moshinsky-Klammer $\langle nlNL\lambda|N'L'n'l'\lambda\rangle_3$:

$$\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle = (-1)^L (-1)^{l'+L'-\lambda} \langle nlNL\lambda|N'L'n'l'\lambda\rangle_3 \quad (4.116)$$

wobei die Phasenfaktoren folgendermassen zustandekommen:

- $(-1)^L$ von der Spiegelung von \vec{R}_2 weil für den Winkelanteil der harmonischen Oszillatorzustände $Y_{LM}(-\vec{R}_2) = (-1)^L Y_{LM}(\vec{R}_2)$ gilt
- $(-1)^{l'+L'-\lambda}$ als Clebsch-Gordan-Phasenfaktor von der Vertauschung der Kopplung von $\vec{l}' + \vec{L}' = \vec{\lambda}$ nach $\vec{L}' + \vec{l}' = \vec{\lambda}$

Benutzt man noch die folgende Vertauschungsrelation der Talmi-Moshinsky-Klammer:

$$\langle nlNL\lambda|N'L'n'l'\lambda\rangle_3 = (-1)^{L-\lambda} \langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle_{\frac{1}{3}} \quad (4.117)$$

so folgt insgesamt für die gesuchte Transformation $\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle$:

$$\langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle = (-1)^{l'+L'} \langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle_{\frac{1}{3}} \quad (4.118)$$

Fassen wir nun die Ergebnisse (4.114) und eine entsprechende Gleichung für den Isospin und (4.118) zusammen erhalten wir folgende Beziehung für $\langle\{[n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}|\hat{X}_2|\{[n'(l's')j't']N'(L'\frac{1}{2})J'\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}\rangle$:

$$\begin{aligned} & \langle\{[n(ls)jt]N(L\frac{1}{2})J\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}|\hat{X}_2|\{[n'(l's')j't']N'(L'\frac{1}{2})J'\}\mathcal{J}^\pi\mathcal{T}\rangle \\ &= \\ & \sum_{\lambda S} \langle(ls)j(L\frac{1}{2})J\mathcal{J}|(lL)\lambda(s\frac{1}{2})S\mathcal{J}\rangle \langle nlNL\lambda|n'l'N'L'\lambda\rangle_{\frac{1}{3}} \\ & (-1)^{l'+L'+s'+t'} \sqrt{(2s+1)(2s'+1)} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s' \\ \frac{1}{2} & S & s \end{matrix} \right\} \\ & \sqrt{(2t+1)(2t'+1)} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & t' \\ \frac{1}{2} & T & t \end{matrix} \right\} \langle(l'L')\lambda(s'\frac{1}{2})S\mathcal{J}|(l'L')\lambda(s'\frac{1}{2})S\mathcal{J}\rangle \end{aligned} \quad (4.119)$$

Wir müssen unsere $\langle kNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1\nu_2JMTM_T \rangle_A$ Matrixelemente vom Impulsraum in den harmonischen Oszillatorraum transformieren:

$$\langle nNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1\nu_2JMTM_T \rangle_A \quad (4.120)$$

bevor wir sie in der Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) benützen können. Benutzen wir die harmonische Oszillatorbasis der Einteilchengleichung (3.13) und Zweiteilchengleichung (3.14) mit einer Oszillatorlänge von $b = 2.526$ fm so sehen wir das die Entwicklung

$$\langle kNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1\nu_2JMTM_T \rangle_A = \sum_{n=0}^{n_{max}} \langle k|n \rangle_b \langle nNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1\nu_2JMTM_T \rangle_A \quad (4.121)$$

mit Entwicklungskoeffizienten $\langle k|n \rangle_b$ schlecht konvergiert, siehe Abbildung (4.7), (rote Kurve: $n_{max} = 30$, grüne Kurve: $n_{max} = 40$).

Benutzt man dagegen eine harmonische Oszillatorbasis mit einer Oszillatorlänge von $b = 1.1$ fm so erreicht man schon mit einem n_{max} von 30 (rote Kurve) perfekte Übereinstimmung und braucht gar keine Entwicklung bis $n_{max} = 40$ (grüne Kurve) berücksichtigen, siehe Abbildung (4.8).

Die Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) wurde einmal mit der Oszillatorlänge und Oszillatorbasis der Einteilchengleichung (3.13) und Zweiteilchengleichung (3.14) gelöst und einmal mit einer Oszillatorbasis (Oszillatorlänge) in der die in die Bethe-Faddeev-Gleichung (3.28) eingehenden

$\langle kNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1\nu_2JMTM_T \rangle_A$ und $\langle \rho | \hat{S}_1 | \nu \rangle$ -Matrixelemente, Gleichung (4.91) am besten beschrieben werden.

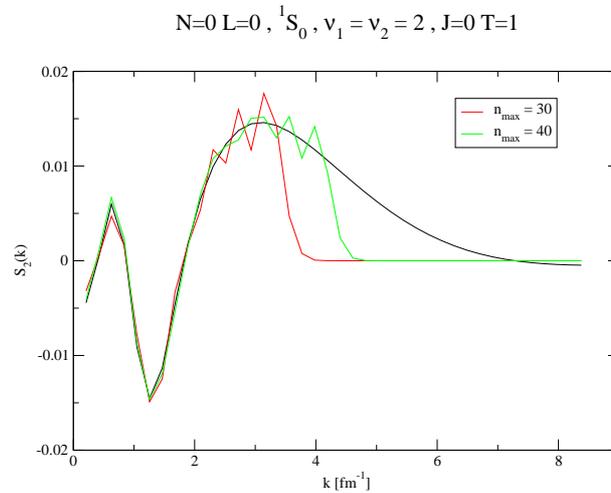


Abbildung 4.7: Gegenüberstellung von $\langle kNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1\nu_2JMTM_T \rangle_A$ (schwarze Kurve) und seinen Entwicklungen nach harmonischen Oszillatorfunktionen, Gleichung (4.121), mit $n_{max} = 30$ (rote Kurve) und $n_{max} = 40$ (grüne Kurve) für eine Oszillatorlänge von $b = 2.526$ fm.

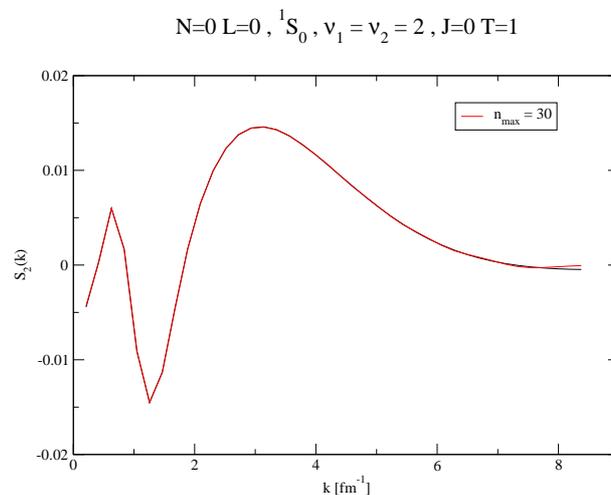


Abbildung 4.8: Gegenüberstellung von $\langle kNL(ls)jJMTM_T | \hat{S}_2 | \nu_1\nu_2JMTM_T \rangle_A$ (schwarze Kurve) und seiner Entwicklung nach harmonischen Oszillatorfunktionen, Gleichung (4.121), mit $n_{max} = 30$ (rote Kurve) für eine Oszillatorlänge von $b = 1.1$ fm. Aus der Abbildung ist ersichtlich das $n_{max} = 30$ für diese Oszillatorlänge in Gleichung (4.121) vollkommen ausreicht.

Kapitel 5

Ergebnisse

5.1 Energie und Radius der Atomkerne

Als ein erstes Ergebnis der Untersuchungen mit der Exponential-S-Methode werden in diesem Abschnitt die Ergebnisse entsprechender Rechnungen für die globalen Eigenschaften der Atomkerne diskutiert: die Bindungsenergien und die Radien. Dazu sind in der Abb. 5.1 erste Resultate für diese Größen am Beispiel des doppelt magischen Kernes ^{16}O dargestellt. Zunächst diskutieren wir die Ergebnisse, die in der SUB 2 Näherung für verschiedene realistische Modelle der NN Wechselwirkungen erzielt wurden. Diese sind durch die offenen Symbole (Rechteck und Kreis) dargestellt. Als Referenzzustand Φ wurden bei diesen und den im folgenden diskutierten Rechnungen, eine Slaterdeterminante aus Oszillatorfunktionen gewählt, wobei der Oszillatorparameter entsprechend den Ausführungen im Abschnitt 4.2 optimiert wurde.

Wie bereits im Abschnitt 3 diskutiert wurde, entspricht diese SUB 2 Näherung weitgehend der Brueckner-Hartree-Fock (BHF) Approximation. Im Vergleich zur Bethe-Goldstone Gleichung der BHF Approximation enthält die entsprechende SUB 2 Gleichung (3.14) allerdings noch den Term für die Loch-Loch Leitern ($\hat{S}_2\hat{P}\hat{V}_{12}\hat{\Psi}_2$ in Gleichung (3.14)). Dieser Beitrag ist aber insbesondere für leichte Atomkerne wie ^{16}O von untergeordneter Bedeutung, so dass es nicht verwunderlich ist, dass die in Abb. 5.1 dargestellten Ergebnisse den entsprechenden Resultaten von BHF Rechnungen [1, 2] sehr ähnlich sind. Auch für diese SUB 2 Näherung findet man, dass man mit keinem der realistischen NN Wechselwirkungen gleichzeitig die Größe und die Energie

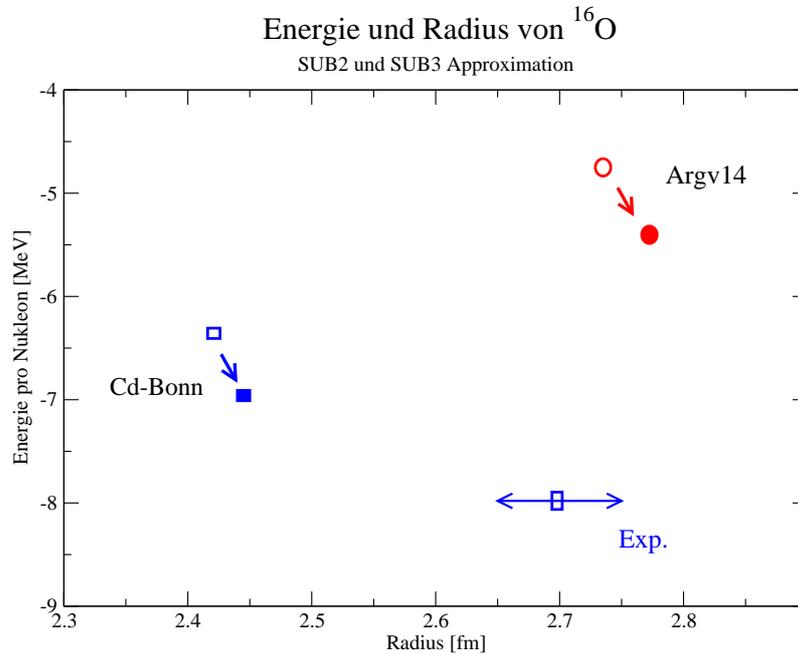


Abbildung 5.1: Energie/Radius von ^{16}O berechnet für das Argv14 (Kreis-symbole) - und das CDBonn - Potential (Quadrate) in der SUB 2 Näherung (offene Symbole) und unter Berücksichtigung von 3-Teilchen Korrelationen (SUB 3 Näherung, dargestellt durch gefüllte Symbole).

der Atomkerne reproduzieren kann. Weiche nichtlokale Wechselwirkungen wie das CD-Bonn Potential liefern eine größere Bindungsenergie etwa -6.4 MeV pro Nukleon zeigen aber gleichzeitig ein Ergebnis für den Radius der Ladungsverteilung von etwa 2.4 fm, der deutlich unter dem experimentellen Wert von 2.7 ± 0.05 fm liegt. Die härteren Modelle der NN Wechselwirkung, die man typischerweise aus einem lokalen Ansatz für das Potential erhält wie z.B. Arg V14, liefern eine gute Näherung für den Radius aber zu dem Preis, dass die Bindungsenergie viel zu klein ausfällt.

Dieses Verhalten entspricht der Situation der sogenannten Coester Bänder für die Vorhersagen des Sättigungspunktes der Kernmaterie [3]. Auch im Fall der Kernmaterie liefern lokale Potentiale den Sättigungspunkt in der Nähe des empirischen Wertes für die Sättigungsdichte der Kernmaterie allerdings bei zu niedriger Energie, während nicht-lokale Potentiale zu einer höheren Bindungsenergie führen allerdings bei einem Ergebnis für die Sättigungsdichte, der etwa doppelt so groß ist wie der empirische Wert.

	Energy/A [MeV]	Radius [fm]
Exp.	-8.55	3.450
SUB 2	-8.78	2.898
SUB 3	-9.17	2.916
SUB 3 (XGX)	-9.01	2.935
SUB 3 (opt. b)	-9.34	2.909

Tabelle 5.1: Energie pro Nukleon und Radius für ^{40}Ca berechnet mit dem CD Bonn Potential. Die experimentellen Werte werden mit Resultaten aus verschiedenen Näherungen verglichen, siehe Diskussion im Text.

Ein zentrales Ziel dieser Arbeit ist es deshalb zu untersuchen, ob die Berücksichtigung von 3-Teilchen Korrelationen zu einer Auflösung dieses Dilemmas der Coester Bande beitragen. Ergebnisse der SUB 3 Näherung sind durch die gefüllten Symbole in Abb. 5.1 dargestellt. Für beide betrachteten Wechselwirkungen liefert die Berücksichtigung von 3-Teilchen Korrelationen eine Vergrößerung der Bindungsenergie und gleichzeitig eine Vergrößerung des berechneten Radius. Diese Korrelationen führen also zu einer Modifikation der Ergebnisse, die von der Coester Bande wegführt in Richtung auf den experimentellen Wert. Allerdings ist der Effekt zu klein.

Der Einfluss der 3-Teilchenkorrelationen auf die Eigenschaften des Grundzustandes von ^{16}O ist im Fall des Arg V14 Potentials ein wenig größer als im Fall der CD Bonn Wechselwirkung. Dies ist dadurch zu erklären, dass im Fall des steiferen Arg V14 Potentials ja auch der Beitrag der 2-Teilchenkorrelationen größer ist als im Fall des weicherer CD-Bonn Potentials.

Entsprechende Resultate ergeben sich auch für ^{40}Ca , wie man aus der Tabelle 5.1 entnehmen kann. Auch in diesem Fall führt die Berücksichtigung von 3-Teilchen Korrelationen in der SUB 3 Näherung zu einer höheren Bindungsenergie und einem größeren Wert für den Radius.

Bei der Lösung der 3-Teilchen Gleichung (3.28) wurden verschiedene Näherungen betrachtet. Neben der vollständigen Lösung der 3-Teilchen Gleichung sind in der Tabelle 5.1 auch Ergebnisse angegeben für eine Näherung, bei der diese vollständige Lösung durch die Terme in zweiter Ord-

nung Störungstheorie angenähert sind. Wir approximieren also z.B. den 3-Teilchenterm in der Zweiteilchen Gleichung durch

$$U_{32} = \sum_{\nu} \langle \rho_1 \rho_2 \nu | \hat{X} \hat{G} \hat{X} A_{\nu} (\hat{S}_2 \hat{\Psi}_1) | \nu_1 \nu_2 \nu \rangle \quad (5.1)$$

Diese Ergebnisse sind durch die Bezeichnung “XGX” gekennzeichnet. In diesem, wie auch in anderen Fällen, zeigt sich, dass die störungstheoretische Näherung, eine recht brauchbare Näherung liefert.

Wie bereits im Kapitel 4 diskutiert wurde, lösen wir die 3-Teilchen Gleichung in einer Basis von Oszillatorfunktionen. Die Darstellung der 2-Teilchen Korrelationsfunktion in der Oszillatorbasis, in der die Einteilchenfunktionen optimal dargestellt werden, konvergiert aber nur sehr schlecht (siehe Abb. 4.7 und dazugehörige Diskussion). Alternativ kann man die Oszillatorlänge für diese Basis so anpassen, dass die Darstellung der 2-Teilchen Korrelationsfunktionen optimiert wird (siehe z.B. Abb. 4.8). Leider hängen die Ergebnisse von der Wahl der Oszillatorbasis ab. In beiden Fällen und auch für andere Oszillatorbasen, die in der Untersuchung betrachtet wurden, führt die Berücksichtigung der 3-Teilchen Korrelationen zu einer signifikanten Vergrößerung der berechneten Bindungsenergie und des berechneten Radius mit einer gewissen Streuung der Ergebnisse in Abhängigkeit von der Wahl der Basis der 3-Teilchenzustände. Diese Streuung der Ergebnisse muss als ein Maß für die numerische Genauigkeit der Rechnungen angesehen werden.

In der Tabelle 5.2 sind die entsprechenden Ergebnisse für den Atomkern ^{16}O aufgelistet. In diesem Fall wurden Rechnungen sowohl für das CD Bonn Potential als auch für die Argonne V14 Wechselwirkung durchgeführt. Die Ergebnisse entsprechen den bereits diskutierten Ergebnissen für ^{40}Ca . Die Effekte der 3-Teilchen Korrelationen sind, wie ja bereits oben diskutiert, etwas stärker ausgeprägt im Fall des steiferen Argonne V14 Potentials.

5.2 Zwei-Teilchen Korrelationen

Bei einem Hamiltonoperator, der neben der kinetischen Energie der Nukleonen nur eine Zweiteilchenwechselwirkung berücksichtigt, gehen in die Berechnung des Erwartungswertes für die Energie direkt nur die Ein- und Zweiteilchendichten ein. Die oben diskutierten Effekte der Drei-Teilchen Korrelationen auf die berechneten Bindungsenergien ergeben sich also nur indirekt

	CD Bonn		Arg V14	
	E/A [MeV]	R [fm]	E/A [MeV]	R [fm]
Exp.	-7.98	2.70		
SUB 2	-6.31	2.421	-4.75	2.735
SUB 3	-6.96	2.445	-5.50	2.780
SUB 3 (XGX)			-5.40	2.774
SUB 3 (opt. b)	-6.76	2.386	-5.26	2.681

Tabelle 5.2: Energie pro Nukleon (E/A) und Radius (R) für ^{16}O berechnet mit dem CD Bonn Potential und dem Argonne V14 Potential. Die experimentellen Werte werden mit Resultaten aus verschiedenen Näherungen verglichen, siehe Diskussion im Text.

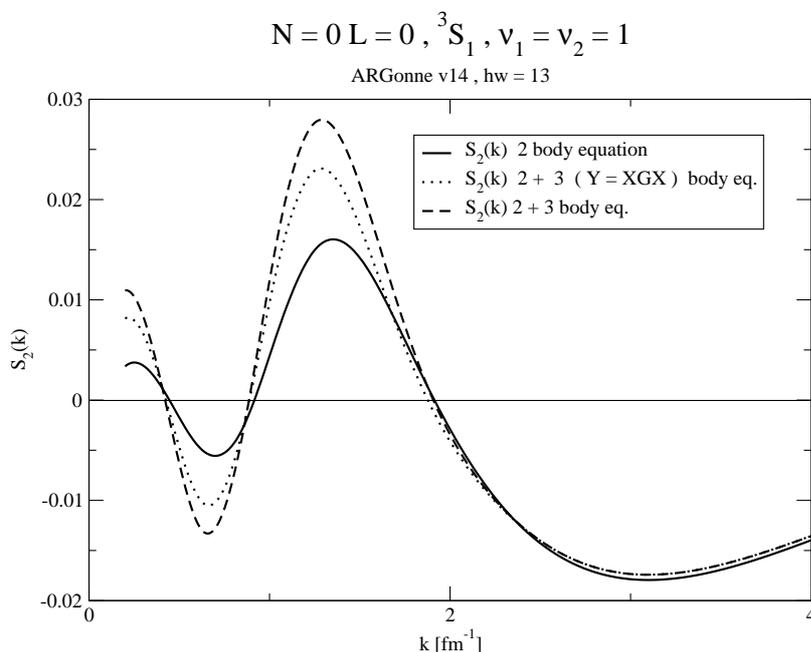


Abbildung 5.2: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung für ^{16}O . Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2.

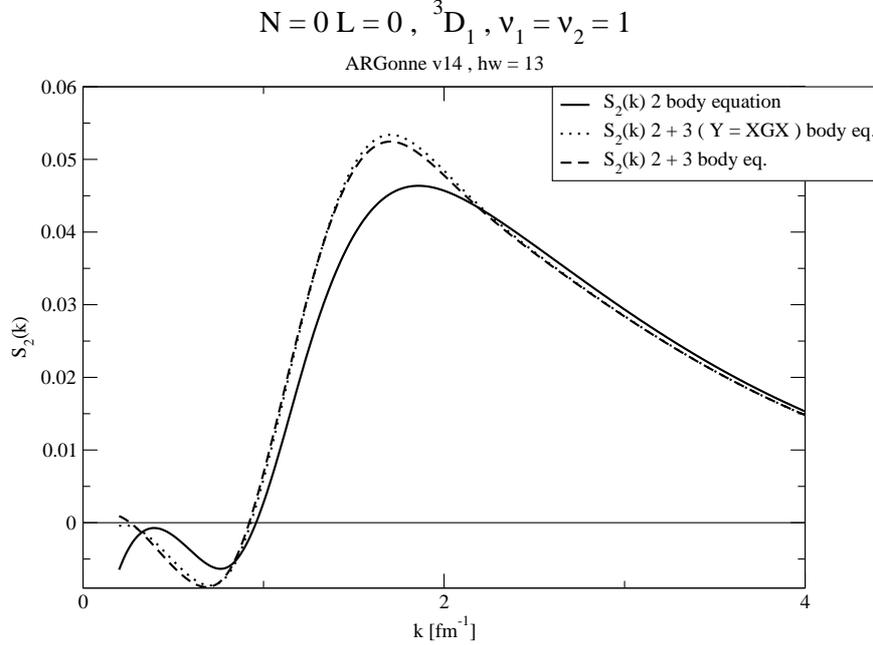


Abbildung 5.3: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung für ^{16}O . Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2.

dadurch, dass diese Drei-Teilchen Korrelationen die Ein- und Zweiteilchendichten modifizieren. In diesem Abschnitt diskutieren wir am Beispiel des ^{16}O den Einfluss der Drei-Teilchen Korrelationen auf die Zwei-Teilchen Korrelationsfunktionen

$$\langle NL(ls)jJT | \hat{S}_2 | \nu_1 \nu_2 JT \rangle_A. \quad (5.2)$$

Zunächst betrachten wir nur Ergebnisse, die mit Argonne V14 Potential erzielt wurden.

Als erstes Beispiel ist in Abb. 5.2 die Impulsdarstellung dieser \hat{S}_2 Korrelationsfunktion für den Fall $\nu_1 = \nu_2 = 1$ (also dem $s_{1/2}$ Zustand), $J = 1, T = 0, N = L = 0, l = 0$ und $s = 1$ dargestellt. Es zeigt sich, dass die Berücksichtigung der Drei-Teilchen Korrelationen zu einer Verstärkung der Amplitude insbesondere bei kleineren Impulsen $k < 2 \text{ fm}^{-1}$ führt. Dies gilt sowohl für den Fall, dass die volle Bethe-Faddeev Gleichung gelöst wird als auch für den Fall, dass wir lediglich die Näherung der Störungstheorie (Y=XGX) benutzen. Das gleiche gilt auch für die entsprechende $l = 2, s = 1$ (also 3D_1) Komponente, die ja mit der 3S_1 Partialwelle über das Tensorpotential ver-

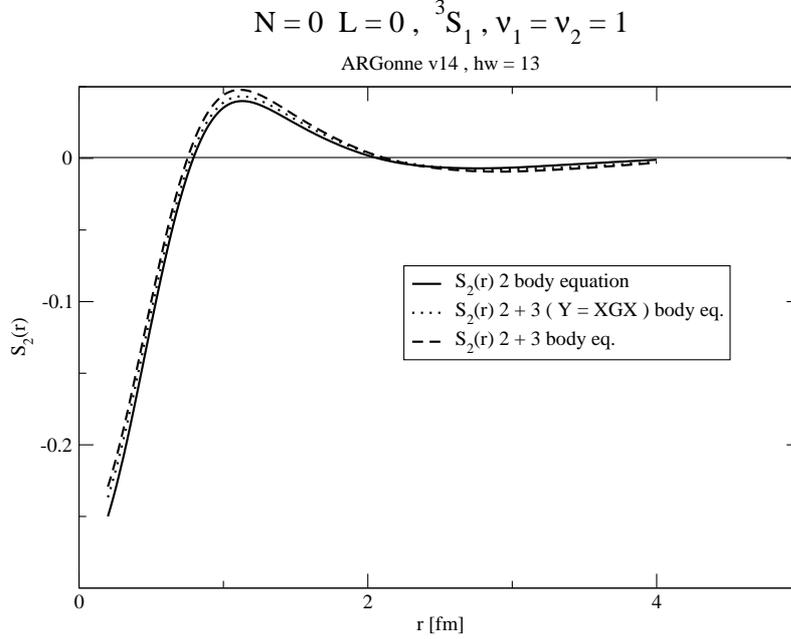


Abbildung 5.4: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung für ${}^{16}\text{O}$. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2.

knüpft ist (siehe Abb. 5.3).

Transformiert man diese Korrelationsfunktionen in die Ortsdarstellung, so erhält man für die 3S_1 Partialwelle das charakteristische Verhalten (siehe Abb. 5.4): Die Amplitude der Relativwellenfunktion wird bei kleinen Abständen ($r < 0.8\text{fm}$) reduziert und bei mittleren Abständen ($0.8 < r < 2\text{fm}$) verstärkt. Dies reflektiert die kurzreichweitigen repulsiven Komponenten, beziehungsweise die attraktiven Beiträge der NN Wechselwirkung bei mittleren Reichweiten. Die Drei-Teilchen Korrelationen führen zu einer Verstärkung der Amplitude der Wellenfunktion insbesondere im attraktiven Bereich der Wechselwirkung. Auch die Tensor Korrelationen in der 3D_1 Partialwelle (siehe Abb. 5.5) erfahren eine Verstärkung im Bereich mittlerer Relativabstände.

Dies gilt nicht nur für die 3S_1 - 3D_1 Partialwellen der Korrelationsfunktionen. Ganz ähnliche Effekte findet man auch z.B. in den 1S_0 Partialwellen, die in Abb. 5.6 (Impulsdarstellung) und Abb. 5.7 (Ortsdarstellung) dargestellt sind. In diesem Fall betrachten wir die \hat{S}_2 Funktion für $\nu_1 = \nu_2 = 2$

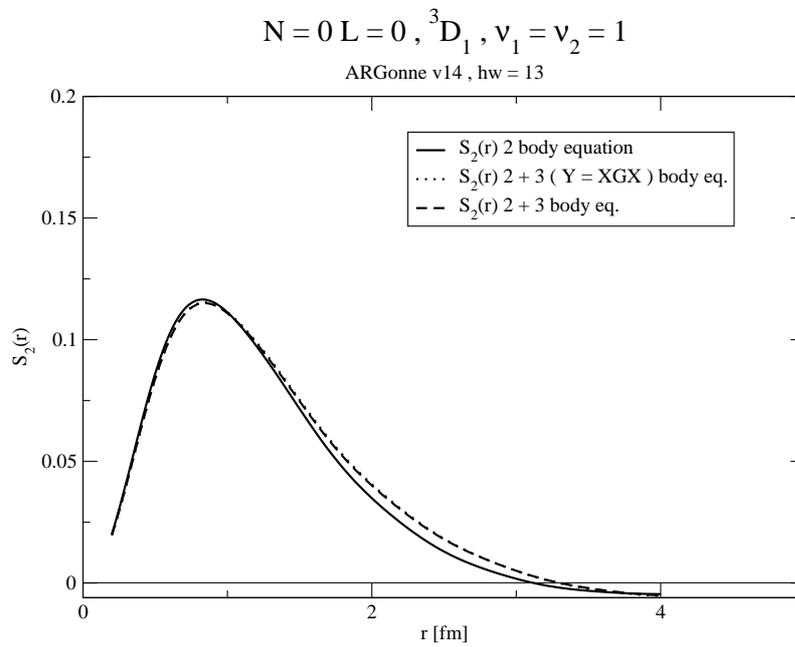


Abbildung 5.5: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung für ${}^{16}\text{O}$. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2.

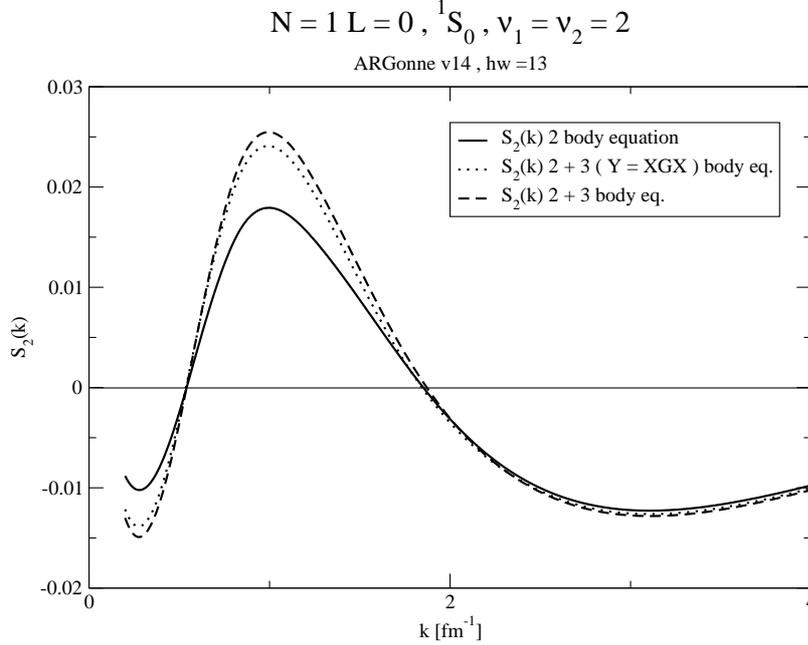


Abbildung 5.6: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung für ^{16}O . Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2.

(also dem $p_{3/2}$ Zustand), $J = 0, T = 1, N = 1, L = 0, l = 0$ und $s = 0$.

Als nächstes betrachten wir die Unterschiede in den Korrelationsfunktionen, die sich durch die unterschiedlichen Wechselwirkungen ergeben. Auch hier beschränken wir uns auf das Beispiel des Atomkerns ^{16}O . In der Abb. 5.8 finden wir wieder die Impulsdarstellung der 3S_1 Partialwelle für den Fall $\nu_1 = \nu_2 = 2$ (also dem $p_{3/2}$ Zustand), $J = 1, T = 0, N = 1, L = 0, l = 0$ und $s = 1$. Bei dem Vergleich fällt auf, dass die Amplituden der mit dem Argonne V14 berechneten Korrelationsfunktionen signifikant größer sind als die mit dem CD Bonn Potential berechneten. Dies gilt insbesondere auch für die höheren Impulskomponenten, also in dem Bereich, wo der Einfluss der Drei-Teilchen Korrelationen auf die \hat{S}_2 Funktion vernachlässigbar ist.

Entsprechendes gilt auch für die 3D_1 Partialwelle, wie man am Beispiel der Abb. 5.9 sehen kann, wo Ergebnisse für den Fall $\nu_1 = \nu_2 = 1, J = 1, T = 0, N = 0, L = 0, l = 2$ und $s = 1$ dargestellt sind. Diese \hat{S}_2 Funktionen beschreiben die Abweichungen der entsprechenden Relativfunktionen von den unkorrelierten Referenzfunktionen, also Oszillatorfunktionen. Die

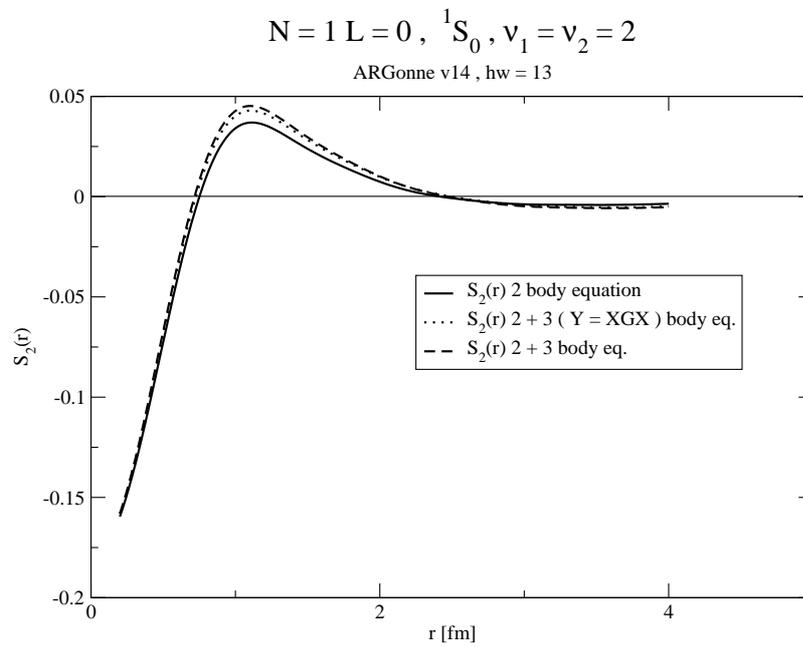


Abbildung 5.7: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung für ^{16}O . Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2.

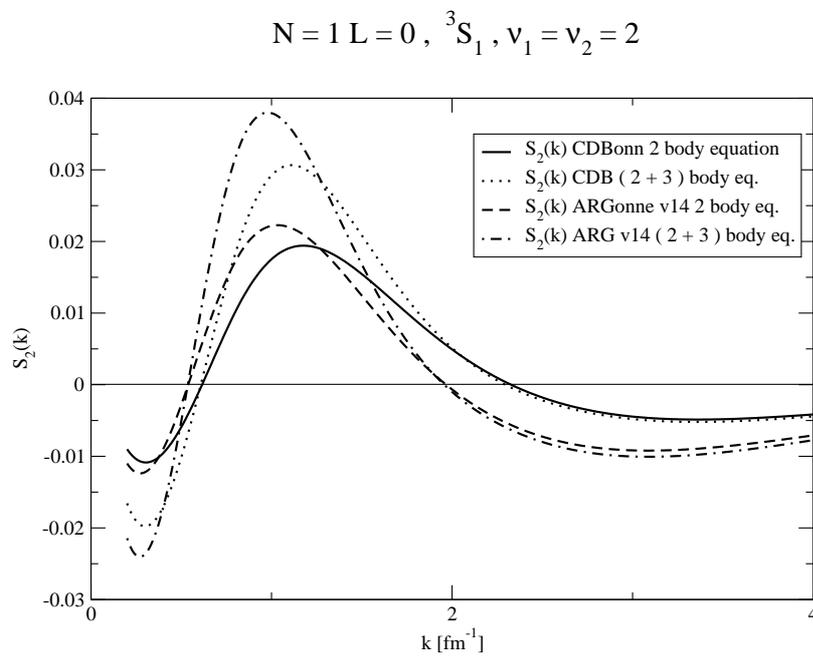


Abbildung 5.8: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung für ^{16}O . Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von Argonne V14 mit CD Bonn Potential.

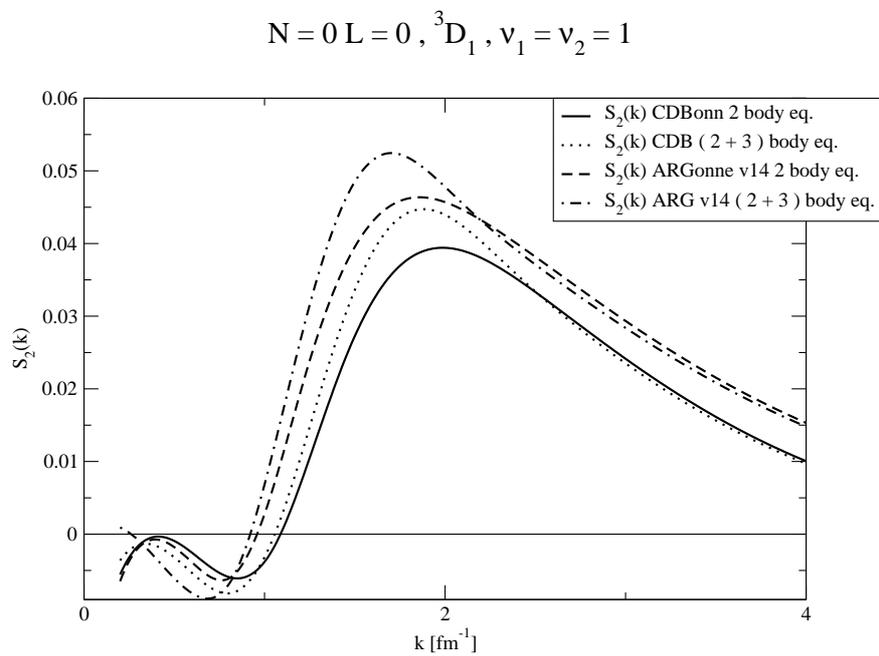


Abbildung 5.9: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung für ${}^{16}\text{O}$. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von Argonne V14 mit CD Bonn Potential.

3S_1 und 3D_1 Funktionen spiegeln also die Quasideuteron Funktionen von Protonen und Neutronen im Atomkern wieder. Deshalb können wir auch die Amplituden in den \hat{S}_2 Funktionen direkt im Vergleich setzen zu den entsprechenden Impulskomponenten des freien Deuterons. Im Fall des freien Deuterons zeigten die Analysen von Mütter und Polls [2], dass lokale Potentiale wie das Argonne V14 zu größeren Amplituden in der Deuteron Wellenfunktion bei hohen Impulsen führte als nichtlokale Potentiale wie das CD Bonn. Dies führte zu entsprechend höheren Erwartungswerten für die kinetische Energie. Die Potential Unterschiede in den \hat{S}_2 Funktionen bei den hohen Impulsen können wir also direkt auf die Ergebnisse für das freie Deuteron beziehen.

Ähnliches gilt aber auch für die 1S_0 Partialwelle, wie wir am Beispiel der Impulsdarstellung der \hat{S}_2 Funktion in Abb. 5.10 sehen können. Dargestellt ist in dieser Abbildung der Fall $\nu_1 = \nu_2 = 1$, $J = 0$, $T = 1$, $N = L = 0$, $l = 0$ und $s = 0$. In dieser Partialwelle gibt es keinen gebundenen Zustand für zwei freie Nukleonen. Es zeigt sich aber auch hier, dass das nicht-lokale Potential CD Bonn zu kleineren Amplituden in der \hat{S}_2 Funktion bei hohen Impulsen führt, als das lokale Argonne V14 Potential.

In allen Fällen, in den in den Abb. 5.8, 5.9 und 5.10 dargestellten genau so, wie in den Fällen, die hier nicht explizit dargestellt sind führen die Drei-Teilchen Korrelationen nur zu Modifikationen der \hat{S}_2 Funktion bei niedrigen Impulsen. Diese Effekte der Drei-Teilchen Korrelationen sind generell etwas größer im Fall des Argonne V14 als im Fall des CD Bonn Potentials.

In den Abbildungen 5.11, 5.12 und 5.13 sind Korrelationsfunktionen für die Partialwellen 3S_1 , 3D_1 und 1S_0 in der Ortsdarstellung dargestellt. In den Partialwellen mit $l = 0$ findet man systematisch, dass die mit dem CD Bonn Potential berechneten Amplituden vom Betrag her deutlich kleiner sind als die mit dem Argonne V14 berechneten Werte. Dies gilt besonders für den Grenzfall kleiner Relativabstände. In diesem Fall ist die \hat{S}_2 Funktion ein Maß dafür, wie sehr die Relativfunktion der Nukleonen durch die repulsiven kurzreichweitigen zentralen Komponenten der NN Wechselwirkung unterdrückt wird. Aus diesen Ergebnissen kann man also den Schluss ziehen, dass die zentralen Komponenten des CD Bonn Potentials weicher sind als die der Argonne V14 Wechselwirkung. Aber auch in der 3D_1 Partialwelle ergeben sich deutlich größere Amplituden für das Argonne V14, als für das CD Bonn Potential. Damit sind also auch die Tensorkomponenten im Argonne V14 Potential stärker als im CD Bonn Potential, ein Ergebnis, das ja auch durch die Untersuchungen am freien Deuteron bestätigt sind [2].

Zum Abschluss dieses Unterabschnittes soll die Frage aufgegriffen wer-

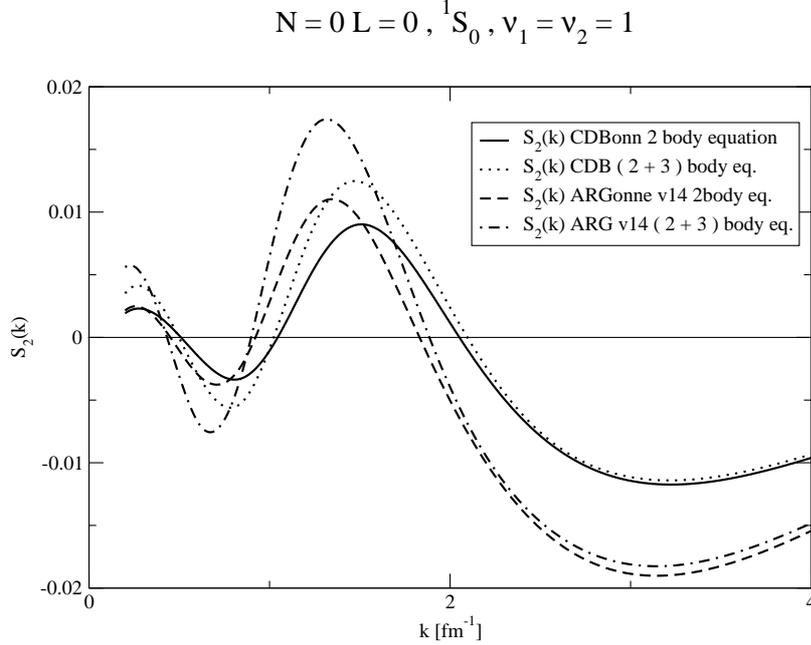


Abbildung 5.10: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung für ^{16}O . Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von Argonne V14 mit CD Bonn Potential.

den, wie die Korrelationsfunktionen vom Medium, also dem jeweiligen Atomkern abhängen. Dazu sind in den Abbildungen 5.14, 5.15 und 5.16 Beispiele für Zwei-Teilchen Korrelationsfunktionen in den 3S_1 , 3D_1 und 1S_0 Partialwellen in der Impulsdarstellung gegeben. Verglichen werden \hat{S}_2 Funktionen, die mit dem CD Bonn Potential für ^{16}O und ^{40}Ca mit und ohne Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen berechnet wurden. Insgesamt fällt auf, dass Amplituden der Korrelationsfunktionen \hat{S}_2 für ^{40}Ca deutlich kleiner sind als im Fall des ^{16}O . Verantwortlich dafür sind sicher auch die folgenden Überlegungen zur Energie: Die Einteilchenzustände sind im Fall des ^{40}Ca stärker gebunden als im Fall des ^{16}O . Im Rahmen der Brueckner Theorie führt dies in der Bethe-Goldstone Gleichung zu Energienennern, die im Falle des ^{40}Ca vom Betrag her größer sind als für die entsprechende Zustände im ^{16}O . Diese größeren Energienenner führen zu einer Unterdrückung der Korrelationseffekte. Diesen Effekt hat man in der Brueckner Theorie als dispersive Unterdrückung (dispersive quenching [1]) bezeichnet. Ein entsprechender Effekt ergibt sich natürlich auch für die Lösung der Zwei Teilchen Gleichung

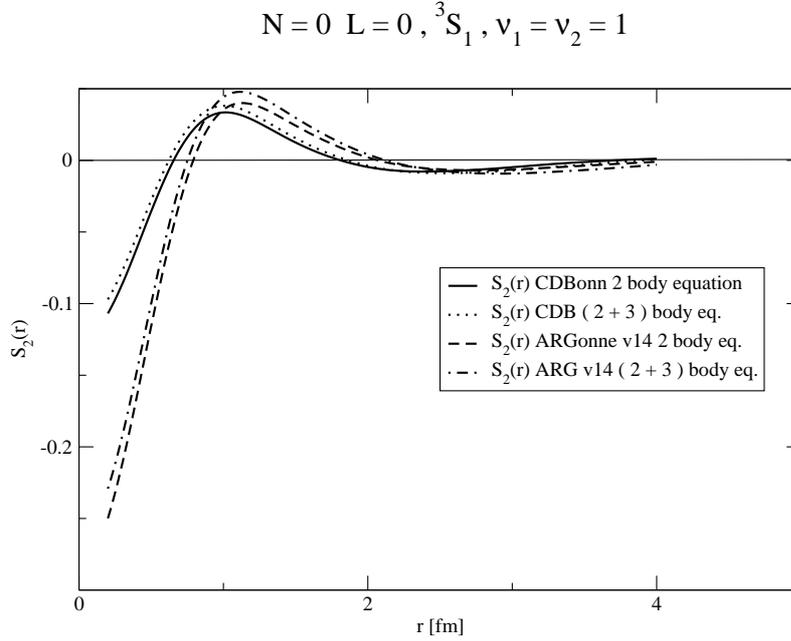


Abbildung 5.11: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung für ${}^{16}\text{O}$. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von Argonne V14 mit CD Bonn Potential.

im Rahmen der hier benutzten Exponential S Methode.

Zu dieser dispersiven Unterdrückung tritt in der Brueckner Theorie auch noch eine Pauli Unterdrückung (Pauli quenching) von Korrelationeffekten hinzu. Diese Pauli Unterdrückung wird in der Bethe-Goldstone Gleichung durch die Wirkung des Pauli Operators hervorgerufen. Ein entsprechender Effekt macht sich auch in der Lösung der \hat{S}_2 Gleichung bemerkbar. Auch hier erfolgt eine Orthogonalisierung der Korrelationsfunktionen zu den besetzten Zuständen. Konsequenzen dieser Pauli Unterdrückung finden sich insbesondere in Abb. 5.14. Bei kleinen Impulsen führen sie im Falle des ${}^{40}\text{Ca}$ zu zusätzlichen Knoten im Vergleich zu ${}^{16}\text{O}$.

Diese Unterdrückungsmechanismen machen sich natürlich auch in der Ortsdarstellung der \hat{S}_2 Funktionen bemerkbar. Beispiele dazu sind in den Figuren 5.17, 5.18 und 5.19 gegeben.

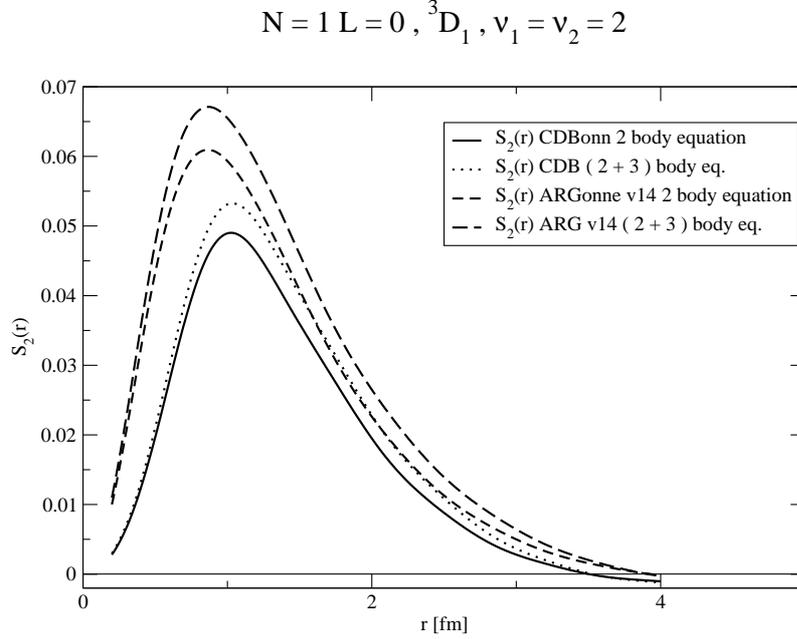


Abbildung 5.12: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung für ^{16}O . Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von Argonne V14 mit CD Bonn Potential.

5.3 Ein-Teilchen Dichten

Die Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen beeinflusst die Berechnung der Ein-Teilchendichte auf zwei verschiedenen Wegen. Einerseits liefert der Drei-Teilchenterm einen Beitrag zur Ein-Teilchen Gleichung. Durch ihn werden also direkt die Lösungen für die \hat{S}_1 Amplituden, beziehungsweise die Entwicklung der \hat{S}_1 Funktion in der entsprechenden Oszillatorbasis beeinflusst. Andererseits wirken die Drei-Teilchen Korrelationen aber auch indirekt über die Modifikation der \hat{S}_2 Funktionen und beeinflussen so die Berechnung der Einteilchendichtematrix [18].

Zunächst wollen wir die Effekte auf die \hat{S}_1 Funktionen betrachten und vergleichen dazu in der Tabelle 5.3 die Ergebnisse für die Amplituden der \hat{S}_1 Funktion, berechnet mit und ohne Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen. Die Ergebnisse der SUB 3 Näherung zeigen keine signifikanten Unterschiede im Vergleich zur SUB 2 Näherung, also der Lösung der Glei-

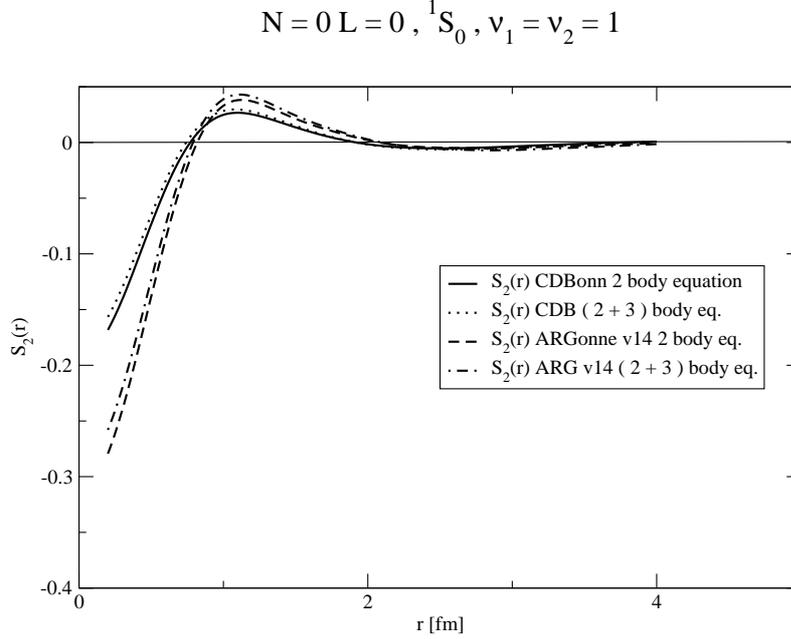


Abbildung 5.13: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung für ${}^{16}\text{O}$. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von Argonne V14 mit CD Bonn Potential.

chungen ohne Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen. Ähnliche Ergebnisse sehen wir auch für die anderen Beispiele. Offensichtlich haben die Drei-Teilchen Korrelationen keinen großen Einfluss auf die Berechnung der Ein-Teilchen Funktionen.

Die Drei-Teilchen Korrelationen haben aber auch direkt und über die Ein- und Zweiteilchenfunktionen \hat{S}_1 und \hat{S}_2 Auswirkungen auf die Einteilchendichtematrix. Diese Einteilchendichtematrix kann in der Basis von geeigneten Oszillatorfunktionen dargestellt werden und ergibt sich dann in der Form

$$\rho_{nn'}^i = \langle \Psi | a_{ni}^\dagger a_{n'i} | \Psi \rangle \quad (5.3)$$

Dabei stehen n und n' für die radialen Oszillatorquantenzahlen und i für die weiteren Quantenzahlen $i = l, s, j$ Quantenzahlen der Basisfunktionen. Wegen der sphärischen Symmetrie ist die Dichtematrix diagonal in diesen Quantenzahlen i . Die Berechnung der Dichtematrix aus den Korrelationsfunktionen \hat{S}_α ist in [18] dargestellt.

ν		ε_ν [MeV]	$\langle 1 S_1 \nu \rangle$	$\langle 2 S_1 \nu \rangle$	$\langle 3 S_1 \nu \rangle$	$\langle 4 S_1 \nu \rangle$
$s_{1/2}$	SUB 2	-51.86	-0.035	0.004	-0.016	-0.004
	SUB 3	-52.71	-0.072	0.005	-0.018	-0.004
$p_{3/2}$	SUB 2	-26.32	-0.023	0.044	-0.019	-0.001
	SUB 3	-27.50	-0.029	0.043	-0.020	-0.001
$p_{1/2}$	SUB 2	-20.55	-0.069	0.071	-0.020	0.011
	SUB 3	-22.05	-0.070	0.070	-0.018	0.011

Tabelle 5.3: Einteilchenenergien und Amplituden der \hat{S}_1 Funktion berechnet für ^{16}O mit dem CD Bonn Potential. Angegeben sind Ergebnisse mit (SUB 3) und ohne (SUB 2) Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen. Referenzzustand ist eine Slaterdeterminante aus Oszillatorfunktionen mit $\hbar\omega = 17$ MeV.

i		Arg V14		CD Bonn	
		SUB 2	SUB 3	SUB 2	SUB 3
$s_{1/2}$	n_i	3.800	3.730	3.826	3.779
	ρ_i	3.861	3.843	3.884	3.867
$p_{3/2}$	n_i	7.646	7.441	7.683	7.548
	ρ_i	7.725	7.550	7.753	7.637
$p_{1/2}$	n_i	3.793	3.661	3.807	3.714
	ρ_i	3.831	3.713	3.841	3.757
$d_{5/2}$	n_i	0.102	0.210	0.102	0.176
	ρ_i	0.145	0.269	0.136	0.221
$d_{3/2}$	n_i	0.113	0.204	0.112	0.173
	ρ_i	0.149	0.249	0.141	0.211
$\sum \rho_i$		15.710	15.618	15.755	15.693

Tabelle 5.4: Besetzungszahlen der natürlichen Orbitale, n_i (siehe Gl.5.4) und Beiträge der verschiedenen Orbitale i zur Gesamtteilchenzahl ρ_i (siehe Gl.5.5) für ^{16}O . Angegeben sind Ergebnisse für das Argonne V14 Potential und das CD Bonn Potential mit (SUB 3) und ohne (SUB 2) Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen.

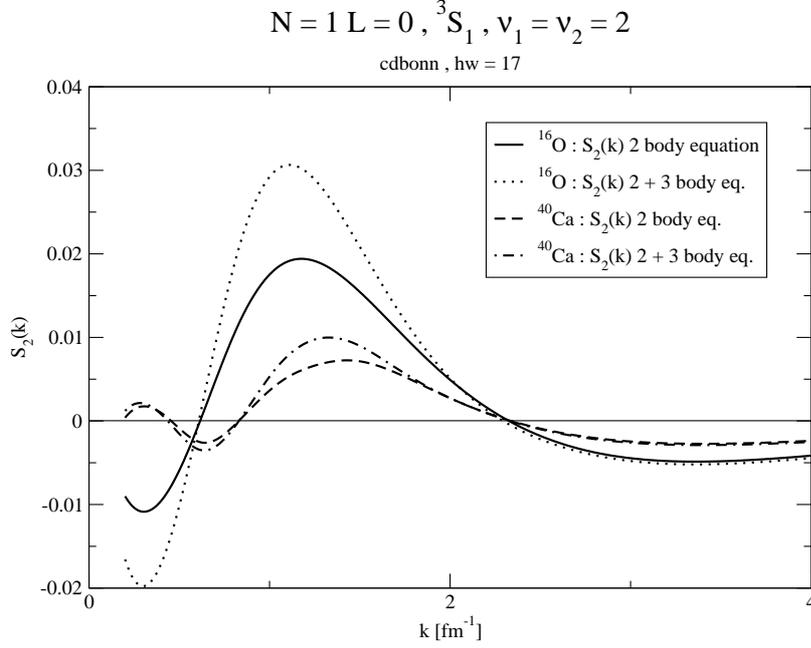


Abbildung 5.14: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von ^{16}O mit ^{40}Ca .

Für einen gegebenen Satz von Quantenzahlen i kann man die Dichtematrix diagonalisieren und erhält die Eigenwerte ρ_α^i . Die Eigenfunktionen des Dichteoperators bezeichnet man als natürliche Orbitale. In der Tabelle 5.4 sind die jeweils höchsten Eigenwerte ρ_α^i für die verschiedenen Orbitale i multipliziert mit dem Entartungsgrad

$$n_i = (2 * j_i + 1) * 2 * \rho_\alpha^i, \quad (5.4)$$

angegeben. Im Falle einer reinen Slaterdeterminante sind die Eigenwerte ρ_α^i entweder 0 oder 1. Abweichungen von diesen einfachen Schalenmodellwerten sind also ein erstes Mass für Korrelationseffekte in der Einteilchendichte. Auserdem sind die Besetzungszahlen

$$\rho_i = (2 * j_i + 1) * 2 * \sum_\alpha \rho_\alpha^i, \quad (5.5)$$

aufgeführt.

Die Korrelationen führen zu Besetzungen, die sich deutlich vom einfachen Schalenmodell unterscheiden. Diese Abweichungen vom Schalenmodell wer-

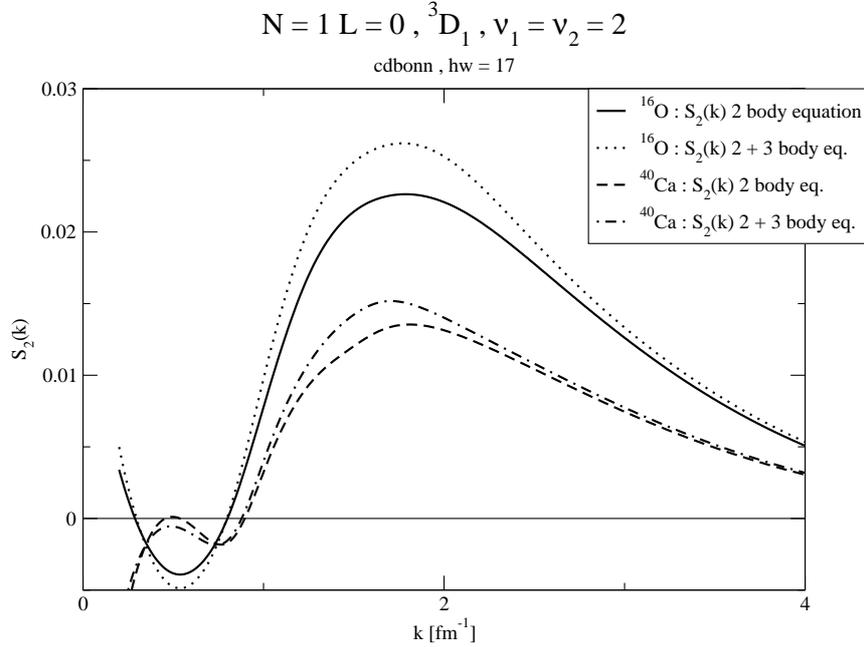


Abbildung 5.15: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von ^{16}O mit ^{40}Ca .

den durch die Berücksichtigung der Dre-Teilchen Korrelationen vergrößert. Dies gilt insbesondere für die Besetzung der Orbitale in der Nähe der Fermikante. Dies ist ein weiterer Beleg dafür, dass Drei-Teilchenkorrelationen vor allen Dingen langreichweitiger Natur sind, also die Korrelationsfunktionen stärker bei kleinen Impulsen modifizieren.

Die Abweichungen von den Schalenmodellwerten sind systematisch auch größer im Fall des Argonne V14 Potentials im Vergleich zu CD Bonn. Auch dies belegt, dass das lokale Argonne V14 Potential stärkere Korrelationen induziert.

Entsprechende Ergebnisse für ^{40}Ca sind in der Tabelle 5.5 aufgeführt. Auch in diesem Fall liefern die Drei-Teilchenkorrelationen signifikante Änderungen nur in der Nähe der Fermikante. Die Korrelationseffekte sind insgesamt schwächer als im ^{16}O , was ja bereits bei der Diskussion der Zwei-Teilchenfunktionen zum Ausdruck kam.

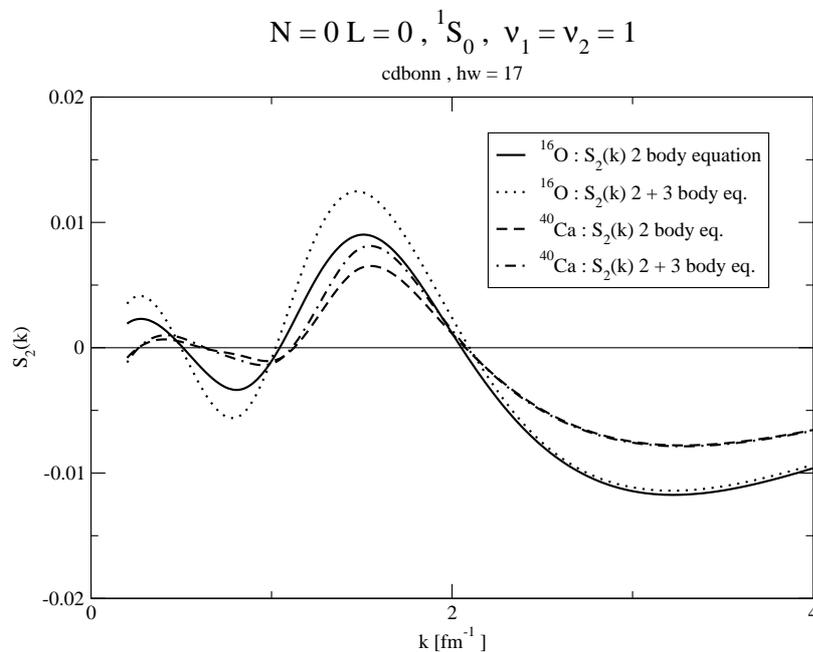


Abbildung 5.16: S_2 Funktion in der Impulsdarstellung. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von ${}^{16}\text{O}$ mit ${}^{40}\text{Ca}$.

i	CD Bonn	
	SUB 2	SUB 3
$s_{1/2}$	7.861	7.831
$p_{3/2}$	7.913	7.909
$p_{1/2}$	3.958	3.951
$d_{5/2}$	11.889	11.845
$d_{3/2}$	7.913	7.865
$\sum \rho_i$	39.534	39.401

Tabelle 5.5: Beiträge der verschiedenen Orbitale i zur Gesamtteilchenzahl ρ_i (siehe Gl.5.5) für ${}^{40}\text{Ca}$. Angegeben sind Ergebnisse für das CD Bonn Potential mit (SUB 3) und ohne (SUB 2) Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen.

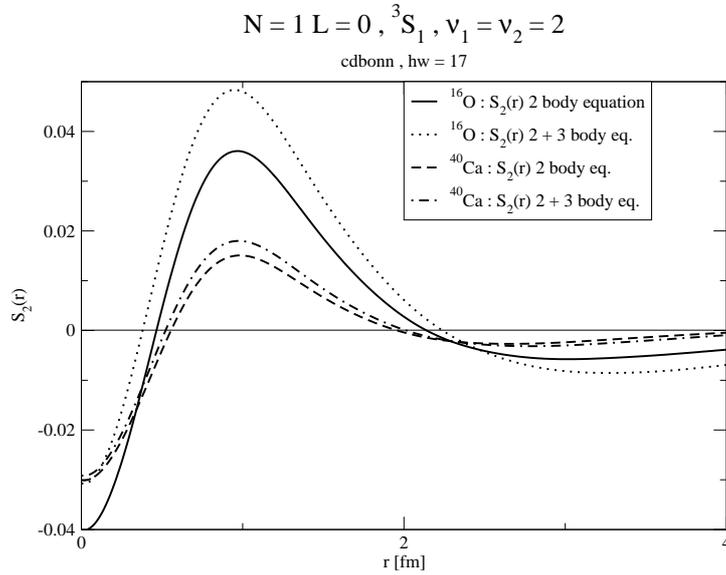


Abbildung 5.17: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von ^{16}O mit ^{40}Ca .

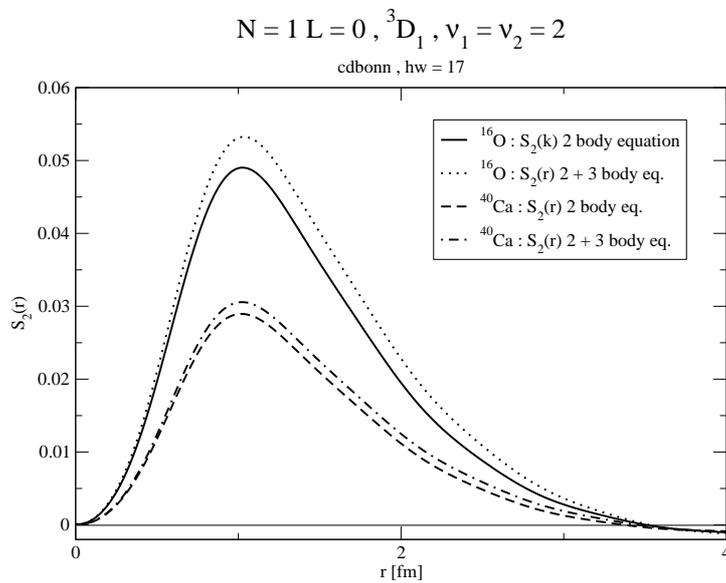


Abbildung 5.18: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von ^{16}O mit ^{40}Ca .

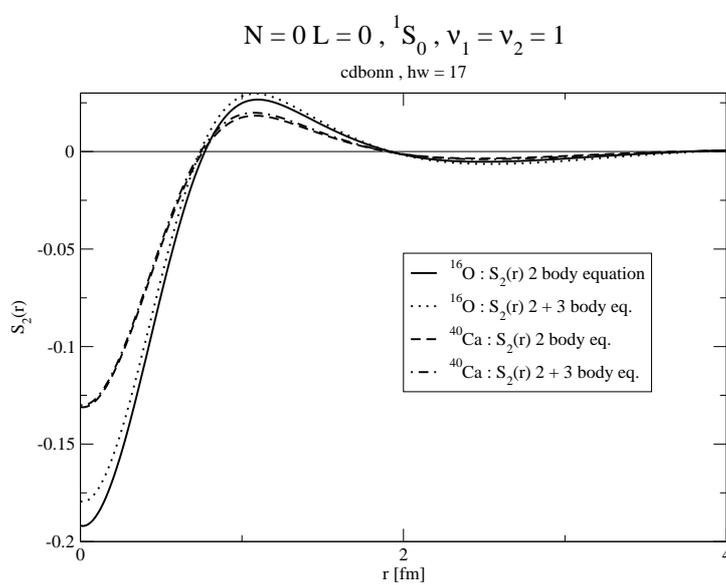


Abbildung 5.19: S_2 Funktion in der Ortsdarstellung. Die Quantenzahlen entsprechen den Quantenzahlen in Gl. 5.2. Vergleich von ${}^{16}\text{O}$ mit ${}^{40}\text{Ca}$.

Kapitel 6

Zusammenfassung

In diesem Abschnitt möchte ich versuchen, die Ergebnisse der Arbeit zusammenzufassen und einen kleinen Ausblick zu geben. Ziel dieser Arbeit war es, die globalen Eigenschaften, wie Bindungsenergie und Radius, von Atomkernen auf der Basis von realistischen Nukleon Nukleon (NN) Wechselwirkungen zu berechnen. Wegen der starken kurzreichweitigen Komponenten in solch realistischen NN Wechselwirkungen muss man dazu Methoden der Vielteilchentheorie benutzen, die über eine einfache Mean Field oder Hartree Fock Beschreibung hinausgeht.

In dieser Arbeit wird dazu die sogenannte Coupled Cluster oder Exponential S Methode herangezogen, die insbesondere von Kümmel und Mitarbeitern [14] entwickelt worden ist. Bereits vor 30 Jahren wurden erste Versuche unternommen, die Gleichungen der Coupled Cluster Methode in der Kernphysik zu lösen [15, 16, 17, 18]. In den folgenden Jahren wurde diese Methode insbesondere in der Theoretischen Chemie aufgegriffen und angewandt [50]-[64]. In den vergangenen Jahren fand diese Methode aber auch wieder in der Theoretischen Kernphysik großes Interesse und wurde z.B. von Heisenberg und Mihaila [68, 69, 70, 71] aber auch von Dean, Hjorth-Jensen und Mitarbeitern [76, 77, 78, 79, 80] unter Benutzung von modernen Modellen der NN Wechselwirkung benutzt.

In diesen Arbeiten wurden die Korrelationsfunktionen aber in einer Basis von harmonischen Oszillatorfunktionen entwickelt, ein Verfahren, das nach meinen Untersuchungen nur sehr unbefriedigende Ergebnisse erlaubt (siehe Diskussion in Abschnitt 4). In der vorliegenden Arbeit werden deshalb die Korrelationsfunktionen direkt in der Impulsdarstellung berechnet und dann bei Bedarf in die Ortsdarstellung transformiert.

Die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Im Rahmen der Berücksichtigung von Ein- und Zwei-Teilchen Korrelationen bestätigen die Ergebnisse der Coupled Cluster Rechnungen die Resultate von entsprechenden Brueckner-Hartree-Fock Rechnungen in vielerlei Hinsicht.
- Auch die Coupled Cluster Rechnungen für endliche Atomkerne liefern Ergebnisse, die dem Phänomen der Coesterbande in unendlich ausgehnter Kernmaterie entsprechen [3].
- Lokale Modelle der NN Wechselwirkungen wie das Argonne V14 Potential sind relativ steif und liefern niedrige Ergebnisse für den Absolutwert der Bindungsenergie. Gleichzeitig ergeben sich aber relativ gute Werte für den Radius.
- Nichtlokale Modelle der NN Wechselwirkung liefern einen größeren Wert für die Bindungsenergie aber verbunden mit einem zu kleinen Wert für den Radius beziehungsweise einem zu großen Wert für die Dichte der Materie.
- Die Berücksichtigung von Drei-Teilchen Korrelationen in der SUB 3 Näherung der Exponential S Methode führt zu einer leichten Verbesserung der Ergebnisse im Vergleich zu den experimentellen Daten. Der Wert für die berechnete Bindungsenergie wird um etwa 0.6 bis 0.8 MeV pro Nukleon größer; gleichzeitig ergibt sich auch ein größerer Wert für den Radius. Der Ergebnispunkt im Diagramm Energie versus Radius bewegt sich also ein wenig weg von der Coesterbande in Richtung auf den empirischen Wert. Der Effekt der Drei-Teilchen Korrelationen ist aber quantitativ zu gering.
- Die Effekte der Drei-Teilchen Korrelationen aus einer Lösung der vollen Bethe-Faddeev Gleichung werden durch eine störungstheoretische Näherung gut reproduziert.
- Die Drei-Teilchenkorrelationen bewirken insbesondere eine Verstärkung der Zwei-Teilchen Korrelationsfunktion bei kleinen Werten des Relativimpulses. Sie bewirken also insbesondere eine Verstärkung langreichweitiger Korrelationen, ein Effekt, der sich auch bei der Diskussion der Besetzungszahlen zeigt.

Ich möchte nun darauf eingehen, wie man versucht Korrelationen zu messen. Die ersten Messungen ([30], [31]) untersuchten den reduzierten Wirkungsquerschnitt von $^{16}\text{O}(e, e'p)^{15}\text{N}$ Reaktionen, in dem ein Elektron aus einem ^{16}O -Kern ein Proton herausschlägt, in Abhängigkeit vom Impuls des Restkerns ^{15}N . Die Idee war dabei, dass Korrelationen zu einer Besetzung von hohen Impulskomponenten in den Wellenfunktionen führen sollten. Die mit und ohne Korrelationen berechneten Wirkungsquerschnitte ([32], [33]) unterscheiden sich aber nicht signifikant, wenn die Anregungsenergie des Restkerns niedrig ist. Das erwartete Enhancement der hohen Impulskomponenten ergibt sich erst bei Reaktionen mit großer “missing energy” also bei hohen Anregungsenergien im Restkern ([34], [35], [36], [37]).

Um Korrelationen zu messen werden Zwei-Nukleon knockout Experimente durchgeführt ([38], [39], [40], [41], [42], [43]), in denen ein Elektron an einem Kern gestreut wird und zwei Nukleonen aus einem Kern herausschlägt. Die Idee dabei ist dass das virtuelle Photon, das von dem inelastisch gestreuten Elektron übertragen wird, von einem Paar von Nukleonen absorbiert wird, der Wirkungsquerschnitt für $(e, e'2\text{N})$ also davon abhängt, wie groß die Korrelationen zwischen den herausgeschlagenen Nukleonen sind. Bei den Rechnungen und Experimenten wählt man gerne die superparallele Kinematik in der die zwei Nukleonen parallel bzw. antiparallel zum Impuls des übertragenen Photons emittiert werden ([44],[45]).

Verschiedene Arbeiten ([46], [47]) zeigen nun dass der berechnete Wirkungsquerschnitt bei hohen Relativimpulsen zwischen den beiden Nukleonen vom Wechselwirkungspotential abhängt. Als Konkurrenzprozesse zum Wirkungsquerschnitt hat man neben den Korrelationen noch die Final-State-Interaction und bei $(e, e'pn)$ -Reaktionen zusätzlich noch die Mesonen-Austauschströme und die Isobarströme zu berücksichtigen ([48],[49]). Dafür haben $(e, e'pn)$ -Reaktionen gegenüber $(e, e'pp)$ -Reaktionen einen grösseren Wirkungsquerschnitt. Auch die Korrelationen sind im pn -Kanal wegen den grösseren pionischen Tensorkorrelationen grösser, als im pp -Kanal. Das sieht man auch bei den \hat{S}_2 -Funktionen im vorigen Kapitel wenn man die 3S_1 -Funktionen mit den 1S_0 -Funktionen vergleicht:

die 1S_0 -Funktionen sind vom Betrag kleiner als die 3S_1 -Funktionen.

Die Exponential S Methode liefert einen systematischen Wege die Korrelationsfunktionen, die man für solche Untersuchungen benötigt parameterfrei zu bestimmen. Darüber hinaus ist die $e^{\hat{S}}$ -Methode eine Möglichkeit schwere Kerne mit heutigen oder in naher Zukunft vorhandenen Computerressourcen genau zu beschreiben, die für die auf kleine Kerne erfolgreich angewendete

GreensFunctionMonteCarlo-Methode ([65]) und das nocore shell model ([66], [67]) unerreichbar sind.

Neuere $e^{\hat{S}}$ -Rechnungen benutzen statt dem realistischen Potential eine effektive Wechselwirkung die im Modellraum des harmonischen Oszillators bei kleineren Radialquantenzahlen konvergiert, als die ursprünglichen $e^{\hat{S}}$ -Rechnungen von Heisenberg und Mihaila ([68], [69], [70], [71]) im harm. Oszillatorraum mit dem realistischen Potential:

die realistischen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungspotentiale haben Matrixelemente im Impulsraum $V(k, k')$ die bei hohen Impulsen noch signifikant sind. Deswegen besteht seit kurzem ein verstärktes Interesse in der Benutzung von Effektiver Feld Theorie (EFT), ([72], [73]) in kernphysikalischen Problemen. Die grundlegende Idee beim EFT-Zugang ist den vollständigen Hilbertraum auf einen kleineren Raum zu beschränken, der nur niedrige Impulskomponenten besitzt. In den letzten Jahren wurde die 'folded diagram' Technik benutzt um ein effektives Potential V_{lowk} ([74]) zu bestimmen. Die V_{lowk} Wechselwirkung reproduziert natürlich auch die Deuteron Bindungsenergie und die Nukleon-Nukleon Streuphasen bei kleinen Energien. Ist das maximale k_{cut} der effektiven V_{lowk} Wechselwirkung unterhalb der Schranke für Pion-Produktion in Nukleon-Nukleon Streuung, so ist die V_{lowk} Wechselwirkung ziemlich unabhängig vom zugrundeliegenden Potential ([74], [75]).

Diese Rechnungen ([76], [77], [78], [79], [80]) mit einer effektiven Wechselwirkung zeigen das die Drei-Teilchen-Korrelationen einen geringen Einfluss auf die Bindungsenergie haben und schon gut durch die SUB 2-Näherung beschrieben werden. Allerdings liefern diese Untersuchungen mit den V_{lowk} Wechselwirkungen auch keine guten Ergebnisse für die Sättigungseigenschaften von Kernmaterie [81]. Dazu müsste eine geeignete Drei-Teilchen Wechselwirkung berücksichtigt werden, wie sie sich z.B. aus relativistischen Beschreibungen ergibt [1].

Literaturverzeichnis

- [1] H. Müther, A. Polls
Prog.Part.Nucl.Phys. **45**(2000)243
- [2] H. Müther, A. Polls
Phys.Rev. **C61**(2000)014304
- [3] F. Coester, S. Cohen, B. D. Day, C. M. Vincent
Phys.Rev. **C1**(1970)769
- [4] M. Lacombe, B. Loiseau, J. M. Richard, R. Vinh Mau, J. Cote, P. Pires,
R. Turreil
Phys.Rev. **C21**(1980)861
- [5] R. Machleidt, K. Holinde, C. Elster
*Phys.Reports***149**(1987)1.
- [6] R. Machleidt, F. Sammarruca, Y. Song
Phys.Rev. **C53**(1996)1483
- [7] R. Machleidt.
Phys.Rev. **C63**(2001)024001.
- [8] V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen, J. J. de Swart.
Phys.Rev. **C49**(1994)2950
- [9] R. B. Wiringa , V. G. J. Stoks , R. Schiavilla.
Phys.Rev. **C51**(1995)38.
- [10] R. D. Mattuck.
A guide to Feynman diagrams in the Many-Body Problem.
McGraw-Hill,1967.

-
- [11] Fetter, Walecka.
Quantum Theory of Many Particle Systems.
McGraw-Hill,1971.
- [12] R. D. Day.
*Reviews of Modern Physics***39**(1967)719.
- [13] K. H. Lührmann, H. Kümmel.
*Nucl. Phys. A***191**(1972)525.
- [14] H. Kümmel, K. H. Lührmann, J. G. Zabolitzky.
*Physics Reports C***36**(1978)1.
- [15] J. G. Zabolitzky.
*Nucl. Phys. A***228**(1974)272.
- [16] K. H. Lührmann, H. Kümmel.
*Nucl. Phys. A***194**(1972)225.
- [17] J. G. Zabolitzky.
*Nucl. Phys. A***228**(1974)285
- [18] K. Emrich, J. G. Zabolitzky, K. H. Lührmann.
*Phys.Rev. C***16**(1977)1650
- [19] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling.
Numerical Recipes in FORTRAN.
Cambridge University Press, 1989.
- [20] A. de-Shalit und I. Talmi.
Nuclear Shell Theory.
Academic Press, New York, 1963.
- [21] I. Talmi.
Simple Models of Complex Nuclei; The Shell Model and Interacting Boson Models.
Harwood Academic Publishers, 1993.
- [22] R. B. Wiringa, R. A. Smith, T. L. Ainsworth.
*Physical Review C***29**(1984)1207.
- [23] M. M. Nagels, T. A. Rijken, J. J. de Swart.
*Phys.Rev. D***17**(1978)768.

-
- [24] M. M. Nagels, T. A. Rijken, J. J. de Swart.
*Phys.Rev. D***20**(1979)1633.
- [25] R. Machleidt.
*Adv.Nucl.Phys.***19**(1989)189.
- [26] W. Greiner und J. A. Maruhn.
Nuclear Models.
Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1996.
- [27] B. D. Day, F. Coester and A. Goodman
*Phys.Rev. C***6**(1972)1992
- [28] L. Trlifaj
*Phys.Rev. C***5**(1972)1534
- [29] H. Mütter und P. U. Sauer
in Computational Nuclear Physics 2, edited by K. Langanke, J. A. Maruhn and S. E. Koonin
Springer, 1993, p.30
- [30] L. Bobeldijk et al.
*Phys.Rev.Lett.***73**(1994)2684
- [31] K. I. Blomqvist et al.
*Phys.Lett. B***344**(1995)85
- [32] K. Amir-Azimi-Nili, H. Mütter, L. D. Skouras, A. Polls
*Nucl. Phys. A***604**(1996)245
- [33] K. Amir-Azimi-Nili, H. Mütter, L. D. Skouras, A. Polls, J. M. Udias
*Nucl. Phys. A***625**(1997)633
- [34] T. Frick, Kh. S. A. Hassaneen, D. Rohe, H. Mütter
*Phys.Rev. C***70**(2004)024309
- [35] D. Rohe et al.
*Phys.Rev.Lett.***93**(2004)182501
- [36] D. Rohe
Habilitationsschrift
Universität Basel
- [37] T. Frick
Doktorarbeit
Universität Tübingen, 2004

- [38] L. J. H. M. Kester et al.
Phys.Rev.Lett. **74**(1995)1712
- [39] C. J. G. Onderwater et al.
Phys.Rev.Lett. **78**(1997)4893
- [40] C. J. G. Onderwater et al.
Phys.Rev.Lett. **81**(1998)2213
- [41] D. L. Groep et al.
Phys.Rev.Lett. **83**(1999)5443
- [42] K. I. Blomqvist et al.
Phys.Lett. B **421**(1998)71
- [43] G. Rosner
Perspectives in Hadron Physics, eds. S. Boffi, C. Cioffi degli Atti and M. Giannini
World Scientific, 1998
- [44] C. Giusti, H. Mütter, F. D. Pacati, M. Stauf
Phys.Rev. C **60**(1999)054608
- [45] C. Barbieri, C. Giusti, F. D. Pacati, W. H. Dickhoff
Phys.Rev. C **70**(2004)014606
- [46] W. J. W. Geurts, K. Allaart, W. H. Dickhoff, H. Mütter
Phys.Rev. C **54**(1996)1144
- [47] C. Giusti, F. D. Pacati, K. Allaart, W. J. W. Geurts, W. H. Dickhoff, H. Mütter
Phys.Rev. C **57**(1998)1691
- [48] D. Knödler, H. Mütter
Phys.Rev. C **63**(2001)044602
- [49] D. Knödler, H. Mütter, P. Czerski
Phys.Rev. C **61**(2000)064603
- [50] J. Paldus, X. Li
Adv. Chem. Phys. **110**(1999)1
- [51] J. Paldus.
The First 40 Years in Theory and Applications of Computational Chemistry, edited by C. F. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim, G. E. Scuseria
Elsevier, 2005 in press

- [52] R. J. Bartlett, J. F. Stanton
Rev. Comput. Chem. **5**(1994)65
- [53] R. J. Bartlett
in Modern Electronic Structure Theory, Part 1, edited by D. R. Yarkony
World Scientific, 1995, p.1047
- [54] T. D. Crawford, H. F. Schaefer 111
Rev. Comput. Chem. **14**(2000)33
- [55] J. Gauss
in Encyclopedia of Computational Chemistry, edited by P. v. R. Schleyer, N. L. Allinger, T. Clark, J. Gasteiger, P. A. Kollman, H. F. Schaefer 111, P. R. Schreiner
Wiley, 1998, Vol.1, p.615
- [56] J. Paldus
in Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry, edited by S. Wilson
Wiley, 2003, Vol.2, p.272
- [57] P. Piecuch, K. Kowalski, I. S. O. Pimienta, M. J. McGuire
Rev. Phys. Chem. **21**(2002)527
- [58] P. Piecuch, K. Kowalski, P. -D. Fan, I. S. O. Pimienta
in Advanced Topics in Theoretical Chemical Physics, Vol.12 of Progress in Theoretical Chemistry and Physics, edited by J. Maruani, R. Lefebvre, E. Brändas
Kluwer, 2003, p.119
- [59] P. Piecuch, K. Kowalski, I. S. O. Pimienta, P. -D. Fan, M. Lodriguito, M. J. McGuire, S. A. Kucharski, T. Kus, M. Musial
Theor. Chem. Acc. **112**(2004)349
- [60] P. Piecuch, M. Wloch, M. Lodriguito, J. R. Gour
in Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Vol. XXX, Recent Advances in the Theory of Chemical and Physical Systems, edited by S. Wilson, J. -P. Julien, J. Maruani, E. Brändas, and G. Delgado-Barrio
Springer, 2005, p.XXX, in press
- [61] K. Kowalski, P. Piecuch
J. Chem. Phys. **113**(2000)18

-
- [62] K. Kowalski, P. Piecuch
J. Chem. Phys. **120**(2004)1715
- [63] K. Kowalski, P. Piecuch
J. Chem. Phys. **113**(2000)8490
- [64] K. Kowalski, P. Piecuch
J. Chem. Phys. **115**(2001)643
- [65] R. Wiringa , S. Pieper
Phys.Rev.Lett. **89**(2002)182501
- [66] P. Navratil , W. E. Ormand
*Phys.Rev. C***68**(2003)034305
- [67] P. Navratil , W. E. Ormand
Phys.Rev.Lett. **88**(2002)152502
- [68] J. H. Heisenberg , B. Mihaila
*Phys.Rev. C***59**(1999)1440
- [69] J. H. Heisenberg , B. Mihaila
*Phys.Rev. C***60**(1999)054303
- [70] J. H. Heisenberg , B. Mihaila
*Phys.Rev. C***61**(2000)054309
- [71] J. H. Heisenberg , B. Mihaila
Phys.Rev.Lett. **84**(2000)1403
- [72] D. B. Kaplan
“Effective Field Theories“,Lectures given at 7th Summer School in Nuclear Physics Symmetries , Seattle , Washington , 1995 .
preprint nucl-th/ 9506035
- [73] E. Epelbaum , W. Glockle , Ulf-G. Meissner *Nucl.Phys.* **A671**(2000)295
- [74] S. Bogner , T. T. S. Kuo , A. Schwenk
Phys.Rep. **386**(2003)1
- [75] J. Kuckei, F. Montani, H. Mütter, A. Sedradian
Nucl.Phys. **A723**(2003)32
- [76] D. J. Dean , M. Hjorth-Jensen
*Phys.Rev. C***69**(2004)54320

-
- [77] K. Kowalski, D. J. Dean, M. Hjorth-Jensen, T. Papenbrock, P. Piecuch
Phys.Rev.Lett. **92**(2004)132501
- [78] M. Wloch, D. J. Dean, J. R. Gour, M. Hjorth-Jensen, K. Kowalski, T.
Papenbrock, P. Piecuch
Phys.Rev.Lett. **94**(2005)212501
- [79] D. J. Dean, J. R. Gour, G. Hagen, M. Hjorth-Jensen, K. Kowalski, T.
Papenbrock, P. Piecuch
Nucl.Phys. **A752**(2005)299
- [80] M. Wloch, J. R. Gour, P. Piecuch, D. J. Dean, M. Hjorth-Jensen, T.
Papenbrock
J.Phys. G: Nucl.Part.Phys. **31**(2005)S1291
- [81] P. Bożek, D. J. Dean, H. Mütter
Phys.Rev. **C74**(2006)014303