

Kernstrukturrechnungen mit dichteabhängigen Wechselwirkungen

Diplomarbeit
vorgelegt von
Frank Hofmann
aus Biebertal

Institut für Theoretische Physik I
der Justus-Liebig-Universität Gießen

Gießen, im Mai 1996

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die HFB–Gleichungen	3
2.1	Die Hartree–Fock–Gleichungen	3
2.2	Die HF + BCS Gleichungen	6
2.3	Die HFB–Gleichungen	9
3	Die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung	11
3.1	Eigenschaften der NN–Wechselwirkung	12
3.2	Die effektive in–medium Wechselwirkung	14
3.3	Phänomenologische NN–Wechselwirkungen	15
3.4	Die M3Y–Wechselwirkung	17
4	Die dichteabhängige NN–Wechselwirkung	21
4.1	Die Zustandsgleichung unendlicher Kernmaterie	21
4.2	Fit an symmetrische Kernmaterie	27
4.3	Bestimmung der Symmetrieenergie	29
5	Hartree–Fock–Bogoliubov in Kernmaterie	33
5.1	Die HFB–Gleichungen in Kernmaterie	33
5.2	Ergebnisse	35
6	HF + BCS Gleichungen für endliche Kerne	43
6.1	Kinetische und potentielle Energie	44
6.2	Dichtematrixentwicklung des Austauschterms	45
6.3	Variation des Energiefunktional	47
6.4	Die Einteilchenwellenfunktionen	50

6.5	Die Spin–Orbit–Wechselwirkung	51
6.6	Die Coulomb–Wechselwirkung	53
6.7	Die Paarungskraft	53
7	Ergebnisse	57
7.1	Numerische Realisierung	57
7.2	Doppelt magische Kerne	59
7.3	Exotische Kerne	68
7.4	Zusammenfassung und Ausblick	77
A	Darstellung der NN–Wechselwirkung	79
A.1	Die {SE, TE, SO, TO}–Darstellung	79
A.2	Berechnung der HF–Matrixelemente	80
B	Die Dichtematrixentwicklung	83
C	Variation der Energie	87
	Literaturverzeichnis	91

Kapitel 1

Einleitung

Extrem neutronen- oder protonenreiche Kerne bieten die einzigartige Möglichkeit, Eigenschaften von Kernmodellen unter der Bedingung einer starken Ladungsasymmetrie zu untersuchen. Dies ist von besonderem Interesse, da es mit der Entwicklung moderner Beschleuniger, wie sie die GSI (Gesellschaft für Schwerionenforschung) in Darmstadt besitzt, heutzutage möglich ist, diese sogenannten exotischen Kerne herzustellen und ihre Eigenschaften experimentell zu messen.

Die Untersuchung dieser Kerne ist aus zwei Gründen von besonderer Bedeutung. Einerseits weiß man, daß die Kernfusion im Innern von Sternen vom Wasserstoff über eine Kette von exotischen Kernen läuft, bis sie bei den auf der Erde vorhandenen stabilen Kernen endet. Eine genaue Kenntnis der Eigenschaften von exotischen Kernen kann uns deshalb helfen, die Formation unseres heutigen Universums besser zu verstehen. Ein zweiter Aspekt ist, daß durch die Untersuchung dieser Kerne ein wesentlich breiteres Spektrum von Kerneigenschaften studiert werden kann, als dies mit stabilen Kernen möglich ist. So kann man mit exotischen Kernen das Verhalten der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung unter dem Gesichtspunkt geringer Dichten und der anfangs angesprochenen extremen Isospinasymmetrie studieren und dadurch theoretische Rückschlüsse auf die Eigenschaften der Wechselwirkung ziehen.

In der vorliegenden Arbeit werden nun Eigenschaften der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung im Rahmen des Hartree–Fock–Modells (HF) untersucht, einem Näherungsverfahren zur Beschreibung des Grundzustandes von Vielteilchensystemen, welches mit großem Erfolg in der Atom- und Kernphysik angewendet wird.

Entscheidend für den Erfolg der HF-Rechnungen ist die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen den Nukleonen. Theoretische Herleitungen der Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung sind nur in Kernmaterie und für eini-

ge ausgewählte stabile Kerne verfügbar [Tr 74]. Außerdem beschreiben die mikroskopischen Wechselwirkungen Bindungseigenschaften in der Regel nur unvollkommen. Einen Ausweg aus diesem Dilemma stellen phänomenologische Wechselwirkungen dar, deren Parameter man so bestimmt, daß experimentell gemessene Eigenschaften stabiler Kerne reproduziert werden können. Am weitesten verbreitet sind die Skyrme- und die Gogny-Wechselwirkung [Sk56a, DG 80], die sehr erfolgreich in Rechnungen über den gesamten Bereich stabiler Kerne eingesetzt worden sind. Diese Wechselwirkungen sind jedoch problematisch bei der Berechnung von exotischen Kernen, da deren Eigenschaften bei der Anpassung der Wechselwirkungen an stabile Kerne nicht berücksichtigt wurden.

In dieser Arbeit soll im Gegensatz dazu eine auf Mesonenaustausch basierende mikroskopisch fundierte Wechselwirkung untersucht werden. Die Medienabhängigkeit wird mit einer expliziten Dichteabhängigkeit berücksichtigt. Von entscheidender Bedeutung für die erfolgreiche Beschreibung protonen- oder neutronenreicher Kerne sind zusätzliche Paarkorrelationen, die bei leichten und oberflächendominierten Kernen an Bedeutung gewinnen, und deshalb im Modell berücksichtigt werden müssen. Diese werden im Rahmen der HF + Pairing Theorie behandelt, die zusammen mit der HF-Näherung in Kapitel 2 eingeführt wird.

In Kapitel 3 werden allgemeine Eigenschaften der Nukleonen-Nukleon-Wechselwirkung diskutiert und die für die Rechnung verwendete Wechselwirkung vorgestellt. Der Mesonenaustauschcharakter wird mit einer Überlagerung von drei Yukawa-Propagatoren beschrieben. Der gleiche Ansatz wurde schon von Bertsch et al. in der M3Y-Parametrisierung von Brückner G-Matrizen erfolgreich benutzt [Be 77]. In dieser Arbeit wird jedoch über den ursprünglichen M3Y-Ansatz hinausgegangen, indem Medieneffekte berücksichtigt werden. Dazu wird die Wechselwirkung in Kapitel 4 um eine effektive Dichteabhängigkeit erweitert, die als eine Korrektur des Nukleon-Meson-Vertexes eingeführt und deren Parametrisierung in unendlicher Kernmaterie berechnet wird. Die Eigenschaften der Paarkraft dieser dichteabhängigen M3Y-Wechselwirkung werden in Kapitel 5 in unendlicher Kernmaterie untersucht.

In Kapitel 6 wird die Wechselwirkung auf endliche Systeme übertragen. Die HF-Gleichungen im Ortsraum müssen aufgrund der Dichteabhängigkeit erweitert werden. Es treten dadurch zusätzlich sogenannte Rearrangementterme auf. In Kapitel 7 werden schließlich HF-Rechnungen für stabile und exotische Kerne durchgeführt und die numerischen Ergebnisse mit experimentellen Daten verglichen.

Kapitel 2

Die Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen

In dieser Arbeit werden der Grundzustand und Grundzustandskorrelationen eines Systems miteinander wechselwirkender Teilchen untersucht. Da jedoch im allgemeinen die exakte Beschreibung eines Vielteilchensystems nicht möglich ist, ist man darauf angewiesen, dieses Problem näherungsweise zu lösen. Ein einfaches und sehr erfolgreiches Verfahren zur Beschreibung des Grundzustandes eines Systems von A Nukleonen ist die Hartree–Fock–Näherung. Man nimmt dabei an, daß sich die Nukleonen, von Pauli–Korrekturen abgesehen, in einem mittleren Potential, dem sogenannten Mean-field oder Hartree–Fock–Potential, unabhängig voneinander bewegen. Dabei wird das Mean-field von allen Nukleonen erzeugt. Zur Lösung dieses Problems ist es notwendig, aus der Summe aller Zweiteilchenwechselwirkungen zwischen den Nukleonen ein Einteilchenpotential zu berechnen:

$$\frac{1}{2} \sum_{ij} V(i, j) \simeq \sum_{i=1}^A V(i)$$

Die Eigenschaften der Zweiteilchenwechselwirkung und ihre algebraische Struktur werden in Kapitel 3 genauer diskutiert.

2.1 Die Hartree–Fock–Gleichungen

Im Rahmen des Hartree–Fock–Modells nimmt man nun an, daß der Grundzustand $\Phi(1, 2, \dots, A)$ eines Atomkernes mit A Nukleonen durch ein antisymmetrisiertes Produkt von Einteilchenwellenfunktionen ϕ_k , die sogenannte

Slaterdeterminante, beschrieben werden kann [SF 74]:

$$\Phi(1, 2, \dots, A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \text{Det} \{ \phi_k(i) \} = |\text{HF}\rangle \quad i = 1, A \quad (2.1)$$

Dabei steht i für die Orts-, Spin- und Isospinkoordinaten des entsprechenden Teilchens. Berechnet man nun für den allgemeinen Vielteilchen-Hamiltonoperator H mit einer beliebigen Zweiteichenwechselwirkung

$$H = \sum_i T_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} V(i, j) \quad (2.2)$$

mit dieser Wellenfunktion den Grundzustandserwartungswert, so erhält man die HF-Energie

$$E^{HF} = \langle \text{HF} | H | \text{HF} \rangle = \sum_k \langle k | \frac{p^2}{2m} | k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \langle k_1 k_2 | \bar{V} | k_1 k_2 \rangle. \quad (2.3)$$

Das antisymmetrische Wechselwirkungsmatrixelement ist definiert durch

$$\langle k_1 k_2 | \bar{V} | k_1 k_2 \rangle = \langle k_1 k_2 | V | k_1 k_2 \rangle - \langle k_1 k_2 | V | k_2 k_1 \rangle. \quad (2.4)$$

Mit

$$\begin{aligned} |k\rangle &= \phi_k(\vec{r}, \sigma, \tau) & |k_1 k_2\rangle &= \phi_{k_1}(\vec{r}_1, \sigma_1, \tau_1) \phi_{k_2}(\vec{r}_2, \sigma_2, \tau_2) \\ & & |k_2 k_1\rangle &= \phi_{k_2}(\vec{r}_1, \sigma_1, \tau_1) \phi_{k_1}(\vec{r}_2, \sigma_2, \tau_2) \end{aligned}$$

berechnet sich das direkte oder Hartree-Matrixelement in (2.4) also zum Beispiel zu

$$\langle k_1 k_2 | V | k_1 k_2 \rangle = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \phi_{k_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{k_2}^*(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_{k_1}(\vec{r}_1) \phi_{k_2}(\vec{r}_2). \quad (2.5)$$

Die HF-Gleichungen erhält man aus der Bedingung, daß die Grundzustandsenergie minimal sein soll. Dazu variiert man diese bezüglich der Einteilchenwellenfunktionen. Um die Nebenbedingung zu erfüllen, daß deren Normierung

$$\int d^3 r \phi_k^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \phi_k(\vec{r}, \sigma, \tau) = 1 \quad (2.6)$$

erhalten bleibt, führt man die Lagrangemultiplikatoren ϵ_k ein, die die physikalische Bedeutung der Einteilchenenergien besitzen und erhält:

$$\delta \left[E_{HF} - \sum_k \epsilon_k \int d^3 r \phi_k^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \phi_k(\vec{r}, \sigma, \tau) \right] = 0 \quad (2.7)$$

Für eine dichteunabhängige Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung erhält man aus obiger Gleichung nach Variation bezüglich $\delta\phi_j^*(\vec{r})$ (wobei aus Gründen der Übersichtlichkeit σ und τ vernachlässigt werden) die HF-Gleichungen im Ortsraum:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\phi_j(\vec{r}) &+ \int d^3r_1 \rho(\vec{r}_1) V(\vec{r}, \vec{r}_1)\phi_j(\vec{r}) \\ &+ \int d^3r_1 \rho(\vec{r}, \vec{r}_1) V(\vec{r}, \vec{r}_1)\phi_j(\vec{r}_1) = \epsilon_j\phi_j(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Die Dichtematrizen sind definiert durch

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}_1) = \sum_k \phi_k^*(\vec{r})\phi_k(\vec{r}_1) \quad \text{und} \quad \rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r}). \quad (2.9)$$

Gleichung (2.8) ist aufgrund des Fock- oder Austauschpotentials ein System gekoppelter Integrodifferentialgleichungen, dessen Lösung die Bestimmung der Einteilchenenergien und Eigenfunktionen erlaubt. Da die Meanfield-Potentiale wiederum über die Dichte von den Eigenfunktionen abhängen, müssen die Gleichungen selbstkonsistent gelöst werden.

Die Erweiterung dieser Gleichungen auf effektive dichteabhängige Wechselwirkungen wird in Kapitel 6 behandelt.

Eine weitere Möglichkeit zur Lösung des HF-Problems bietet die Methode der Zweiten Quantisierung (siehe zum Beispiels [RS 80]). In dieser Darstellung läßt sich der HF-Grundzustand durch ein Produkt von Fermi-Erzeugungsoperatoren auf das Teilchenvakuum $|0\rangle$ beschreiben:

$$|\text{HF}\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^+ |0\rangle \quad a_i |0\rangle = 0 \quad \{a_i^+, a_j\} = \delta_{ij} \quad (2.10)$$

Der Zweiteilchen–Hamiltonoperator ist in der Zweiten Quantisierung mit den Abkürzungen

$$t_{kk'} = \langle k | \frac{p^2}{2m} | k' \rangle \quad V_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = \langle k_1 k_2 | \bar{V} | k'_1 k'_2 \rangle. \quad (2.11)$$

gegeben durch

$$H = \sum_{kk'} t_{kk'} a_k^+ a_{k'} + \frac{1}{4} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} V_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k'_1} a_{k'_2}. \quad (2.12)$$

Mit Hilfe von Wicks Theorem bringt man diesen Ausdruck in Normalordnung bezüglich des HF-Teilchen-Loch-Vakuums $|\text{HF}\rangle$ [Ro 70]. Man findet, wenn man die Restwechselwirkung vernachlässigt,

$$H = \sum_{kk'} \left\{ t_{kk'} + \sum_{k''} V_{kk''k'k''} \right\} a_k^+ a_{k'} - \frac{1}{2} \sum_{kk'} V_{kk'kk'} \quad (2.13)$$

Das HF-Problem reduziert sich damit auf die Diagonalisierung des Einteilchenoperators in obiger Gleichung (der erste Term)

$$h_{kk'} = t_{kk'} + \sum_{k''} V_{kk''k'k''} = \epsilon_k \delta_{kk'} \quad (2.14)$$

durch die Wahl einer geeigneten Einteilchen-Basis $\{\phi_k\}$. Man erreicht dies durch die Entwicklung dieser Wellenfunktion nach einer vollständigen orthogonalen Basis. Man erhält dadurch die HF-Einteilchenenergien

$$\epsilon_k = t_{kk} + \sum_{k'} V_{kk'kk'} \quad (2.15)$$

und die HF-Energie

$$E^{HF} = \langle \text{HF} | H | \text{HF} \rangle = \sum_k \epsilon_k - \frac{1}{2} \sum_{kk'} V_{kk'kk'} \quad (2.16)$$

$$= \sum_k t_{kk} + \frac{1}{2} \sum_{kk'} V_{kk'kk'}. \quad (2.17)$$

2.2 Die HF + BCS Gleichungen

Die Annahme, daß sich die Nukleonen unabhängig voneinander in einem mittleren Potential bewegen, ist jedoch nur bedingt richtig. Aus dem Vergleich von experimentellen Bindungsenergien weiß man, daß die Bindungsenergie eines g -Kerns geringer ist als das arithmetische Mittel der Bindungsenergien zweier benachbarter g -Kerne. (g steht für Kerne mit gerader Protonen- und Neutronenzahl, u für Kerne mit gerader Protonen- und ungerader Neutronenzahl oder umgekehrt.) Diese und weitere Beobachtungen legen die Vermutung nahe, daß eine zusätzliche kurzreichweitige, attraktive Kraft zwischen Paaren von Nukleonen existiert.

Während die HF-Methode nur den Teilchen-Loch-Kanal (particle-hole oder ph) der Wechselwirkung berücksichtigt, der durch den langreichweitigen Teil der Wechselwirkung bestimmt wird, läßt sich die oben beschriebene Kraft durch zusätzliche Teilchen-Teilchen-Korrelationen (particle-particle

oder pp) beschreiben, deren Eigenschaften durch den kurzreichweitigen Teil der Wechselwirkung dominiert werden. Diese Teilchen–Teilchen- oder Paarkorrelationen kann man durch die Kopplung zweier Nukleonen in zeitumgekehrten Zuständen zu einem neuen Teilchen mit Gesamtdrehmoment $J = 0$ ($M = 0$) beschreiben. In endlichen Kernen koppeln so zwei Nukleonen mit Drehmoment j zu dem Zustand

$$[|jm\rangle|j-m\rangle]_{J,M=0}. \quad (2.18)$$

Nimmt man nun an, daß der Hamiltonoperator schon im diagonalisierten Zustand vorliegt, die HF-Einteilchenenergien und -wellenfunktionen also schon bekannt sind, lassen sich die Paarkorrelation durch eine zusätzliche Paarkraft im Hamiltonoperator ausdrücken,

$$H_p = \sum_k \epsilon_k^0 a_k^+ a_k + \sum_{kk'>0} \langle k\bar{k}|V|k'\bar{k}'\rangle a_k^+ a_{\bar{k}}^+ a_{k'} a_{\bar{k}'} \quad (2.19)$$

wobei $|k\rangle = |jm\rangle$ und $|\bar{k}\rangle = |j-m\rangle$ ist.

Betrachtet man Korrelationen nur zwischen Protonen und nur zwischen Neutronen, so ist die Paarkraft durch den Singlett–Even–Kanal (SE) der Wechselwirkung gegeben, da gerade dieser auf das Spin–Singlett $S = 0$ und das Isospin–Triplet $T = 1$ projiziert.

Das Problem ist nun, daß H_p nicht mehr diagonal ist. Dies kann jedoch erreicht werden, wenn man den Grundzustand nicht mehr durch unabhängige Einteilchenwellenfunktionen sondern durch Paare von korrelierten Teilchen beschreibt, die sich unabhängig voneinander bewegen sollen. Man macht dazu den Ansatz für die sogenannte BCS-Grundzustandswellenfunktion (nach Bardeen, Cooper, Schrieffer [BCS57], die auf diese Weise die Supraleitung in der Festkörperphysik erklären konnten):

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^+ a_{\bar{k}}^+) |0\rangle. \quad (2.20)$$

Die Parameter v_k^2 und u_k^2 sind die Wahrscheinlichkeiten, daß ein bestimmter Paarzustand $(k, \bar{k})$ mit einem sogenannten Quasiteilchen besetzt oder nicht besetzt ist, und müssen noch bestimmt werden. Es folgt sofort, daß $v_k^2 + u_k^2 = 1$ sein muß. Zur Diagonalisierung von H_p drückt man diesen durch Quasiteilchenerzeugungs- und -vernichtungsoperatoren α_k^+ und $\alpha_{\bar{k}}^+$ aus. Diese erhält man aus den ursprünglichen Erzeugern und Vernichtern mit Hilfe der Bogoliubow–Valatin–Transformation [BV 61]:

$$\begin{aligned} a_k^+ &= u_k \alpha_k^+ + v_k \alpha_{\bar{k}} \\ \alpha_k^+ &= u_k a_k^+ - v_k a_{\bar{k}} \end{aligned} \quad \left\{ \alpha_k^+, \alpha_{k'} \right\} = \delta_{kk'} \quad \left\{ \alpha_k, \alpha_{k'} \right\} = 0 \quad (2.21)$$

Man entwickelt nun wieder mit Hilfe von Wicks Theorem H_p in Normalordnung, dieses Mal jedoch bezüglich des $|\text{BCS}\rangle$ -Grundzustandes. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß dieser das Quasiteilchenvakuum ist, also $\alpha_k|\text{BCS}\rangle = 0$ gilt. Wie im HF-Fall soll die Grundzustandsenergie minimal werden. Für sie erhält man nach einigen Umformungen

$$\begin{aligned} E^{BCS} &= \langle \text{BCS} | H | \text{BCS} \rangle \\ &= 2 \sum_{k>0} \left\{ \epsilon_k^0 + \frac{1}{2} V_{k\bar{k}k\bar{k}}^p v_k^2 \right\} v_k^2 + \sum_{kk'>0} V_{k\bar{k}k'\bar{k}'}^p u_{k'} v_{k'} u_k v_k \end{aligned} \quad (2.22)$$

Ein Problem ist jedoch, daß H_p nicht mit dem Teilchenzahloperator $\hat{N} = \sum_k a_k^\dagger a_k$ kommutiert, so daß die Teilchenzahl nicht erhalten ist (nur die Anzahl der Quasiteilchen ist erhalten). Dies kann jedoch erreicht werden, wenn man fordert, daß

$$\langle \text{BCS} | \hat{N} | \text{BCS} \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \stackrel{!}{=} A. \quad (2.23)$$

Diese Nebenbedingung wird in der Variation durch den Lagrangemultiplikator λ , das chemische Potential, berücksichtigt. Die Variationsbedingung lautet dann:

$$\delta \langle \text{BCS} | H_p - \lambda \hat{N} | \text{BCS} \rangle = 0 \quad (2.24)$$

Da der $|\text{BCS}\rangle$ Grundzustand durch die Besetzungswahrscheinlichkeiten v_k eindeutig bestimmt ist, variiert man bezüglich dieser

$$\left(\frac{\partial}{\partial v_k} + \frac{\partial u_k}{\partial v_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \right) \langle \text{BCS} | H_p - \lambda \hat{N} | \text{BCS} \rangle = 0 \quad (2.25)$$

und erhält daraus die Bedingung

$$2(\epsilon_k - \lambda) u_k v_k = \Delta_k (u_k^2 - v_k^2) \quad (2.26)$$

Dabei sind

$$\epsilon_k = \epsilon_k^0 + V_{k\bar{k}k\bar{k}}^p v_k^2 \quad (2.27)$$

$$\Delta_k = - \sum_{k'>0} V_{k\bar{k}k'\bar{k}'}^p u_{k'} v_{k'} \quad (2.28)$$

Aus (2.26) und $v_k^2 + u_k^2 = 1$ erhält man die Lösungen

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_k^2}} \right\} \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_k^2}} \right\} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Zusammen mit der Nebenbedingung für die Teilchenzahlerhaltung (2.23), aus der λ bestimmt werden muß, bilden die Gleichungen (2.27) - (2.29) die BCS-Gleichungen, die simultan gelöst werden müssen. Gleichung (2.28) wird die Gap-Gleichung genannt. Zu beachten ist, daß in (2.27) eine Renormalisierung der HF-Einteilchenenergien stattfindet, die durch den Teilchen-Teilchen-Kanal der Wechselwirkung bestimmt wird.

Da dieser Ansatz für die Paarkraft das HF- und das BCS-Problem separiert, so daß beide nacheinander gelöst werden können, nennt man die Lösung der BCS-Gleichungen mit den HF-Energien und -wellenfunktionen auch das HF + BCS Verfahren. Man überzeugt sich leicht, daß für die triviale Lösung $u_k = 0$, $v_k = 1$ für $\epsilon_k \leq \lambda$ und $u_k = 1$, $v_k = 0$ für $\epsilon_k > \lambda$ der BCS-Grundzustand in den HF-Grundzustand übergeht. Die entspricht einem System ohne Paarung.

2.3 Die Hartree-Fock-Bogoliubow Gleichungen

In Abschnitt 2.2 wurde angenommen, daß die Teilchen-Teilchen- und die Teilchen-Loch-Wechselwirkung unabhängig voneinander behandelt werden können. Dies ist jedoch streng genommen nicht richtig, da sie beide durch die gleiche Wechselwirkung beschrieben werden, und, wie wir in Abschnitt 2.2 gesehen haben, die Paarkorrelation die Einteilchenenergien und sicherlich auch die Wellenfunktionen beeinflussen. Letzteres wird allerdings in den HF + BCS Rechnungen vernachlässigt. Zur korrekten Beschreibung ist es daher notwendig, das Paarungsproblem selbstkonsistent zu lösen. Dazu muß der allgemeine Zweiteilchenhamiltonoperator

$$H = \sum_{kk'} t_{kk'} a_k^+ a_{k'} + \frac{1}{4} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} V_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k'_1} a_{k'_2} \quad (2.30)$$

bezüglich des $|\text{BCS}\rangle$ Grundzustandes minimiert werden. Dies soll hier nicht genauer ausgeführt werden, da die Rechnung ähnlich verläuft wie im BCS-Fall.

Man findet die sogenannten Hartree–Fock–Bogoliubow–Gleichungen [SF 74]:

$$\left\{ t_{kk'} - \lambda \delta_{kk'} + \sum_{k'' > 0} (V_{k\bar{k}''k'k''} + V_{kk''k'k''}) v_{k''}^2 \right\} (u_k v_{k'} + u_{k'} v_k) \quad (2.31)$$

$$+ \sum_{k'' > 0} V_{k\bar{k}''k'k''} u_{k''} v_{k''} (u_k u_{k'} - v_k v_{k'}) = 0 \quad (2.32)$$

Mit den Definitionen

$$h_{kk'} = t_{kk'} + \sum_{k''} V_{k\bar{k}''k'k''} v_{k''}^2 = \epsilon_k \delta_{kk'} \quad (2.33)$$

und

$$\Delta_{kk'} = -\frac{1}{2} \sum_{k''} V_{k\bar{k}''k'k''} u_{k''} v_{k''} \quad (2.34)$$

reduziert sich (2.31) zu

$$2(\epsilon_k - \lambda) u_k v_k \delta_{kk'} = \Delta_{kk'} (u_k u_{k'} - v_k v_{k'}) \quad (2.35)$$

Das chemische Potential λ wird wieder aus der Nebenbedingung $\sum_k v_k^2 = A$ bestimmt. Die Selbstkonsistenz der HFB-Gleichungen wird nun klar: Während man analog zum HF-Verfahren den Einteilchenhamiltonoperator in (2.33) diagonalisiert, müssen *gleichzeitig* (2.35) und die Gapgleichung (2.34) gelöst werden, um die Besetzungswahrscheinlichkeiten v_k^2 zu erhalten. Dies macht die Lösung dieser Gleichungen wesentlich aufwendiger als im HF + BCS Fall.

Kapitel 3

Die Nukleon–Nukleon– Wechselwirkung

Die mikroskopische Beschreibung eines Atomkernes, also eines Vielteilchensystems, erfordert die Kenntnis der Kräfte, die zwischen den einzelnen Teilchen wirken. Deshalb steht am Anfang jeder mikroskopischen Kernstrukturrechnung die Zweiteilchenwechselwirkung zwischen den Nukleonen. Man macht im allgemeinen die grundlegenden Annahmen, daß relativistische Effekte vernachlässigt werden können und daß nur Zweiteilchenkräfte wichtig sind. Desweiteren nimmt man an, daß dynamische mesonische Freiheitsgrade vernachlässigt werden können. Dadurch kann man den Kern als ein System von A Nukleonen beschreiben, deren Wechselwirkung untereinander durch ein Potential beschrieben wird. Die Herleitung dieses Nukleon–Nukleon–Potentials aus der Quantenchromodynamik sollte zwar theoretisch möglich sein, aufgrund deren nichtperturbativen Charakters bei geringen Energien sind die Rechnungen aber noch in ihrem Anfangsstadium.

Da jedoch im Rahmen der Kernstrukturphysik die innere Struktur der Nukleonen nicht von entscheidender Bedeutung ist, versucht man, die Nukleon–Nukleon–Wechselwirkung mit Hilfe von effektiven Theorien zu berechnen, deren Ausgangspunkt eine effektive Lagrangedichte für miteinander wechselwirkende Mesonen und Nukleonen ist. Dies wird in Abbildung 3.1 dargestellt. Von Yukawa wurde dies erstmals 1937 vorgeschlagen [Yu 35]. Die einfachste Form dieses Zweiteilchenpotentials ist *das one-pion exchange potential* (OPEP), das nur den Austausch eines langreichweitigen π -Mesons berücksichtigt.

Bevor hierauf jedoch genauer eingegangen wird, sollen zuerst allgemeine Eigenschaften des nichtrelativistischen Nukleon–Nukleon–Potentials diskutiert werden.

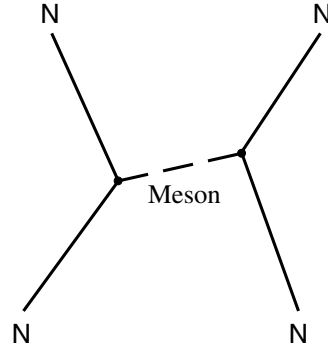


Abbildung 3.1: Mesonenaustausch zwischen zwei Nukleonen

3.1 Eigenschaften der NN–Wechselwirkung

Das Zweiteilchenpotential $V(1, 2) = V(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{\sigma}_1, \vec{\tau}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2, \vec{\sigma}_2, \vec{\tau}_2)$ hängt in seiner allgemeinsten Form jeweils vom Ort $\vec{r}$, dem Impuls $\vec{p}$, dem Spin $\vec{\sigma}$ sowie dem Isospin $\vec{\tau}$ der beiden Nukleonen ab. Mit Hilfe grundlegender Symmetrieüberlegungen läßt sich dieser Ansatz genauer spezifizieren. Das Potential ist eine skalare Größe und muß translations- und rotationsinvariant sowie symmetrisch unter Teilchenaustausch sein. Außerdem ist es invariant unter Zeitumkehr und Raumspiegelung. So folgt etwa direkt aus der Translationsinvarianz, daß das Potential nur von der Relativkoordinate $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ abhängen darf. Aufgrund dieser Symmetrieeigenschaften macht man einen allgemeinen Ansatz für die Struktur des Zweiteilchenpotentials. Eine mögliche und häufig benutzte Darstellung ist [RS 80]:

$$V_{NN} = V_C + V_T + V_{LS}$$

mit

dem Zentralpotential

$$V_C(1, 2) = V_0(r) + V_\sigma(r)(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) + V_\tau(r)(\vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2) + V_{\sigma\tau}(r)(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2)$$

dem Tensorpotential

$$V_T(1, 2) = [V_{T_0}(r) + V_{T_\tau}(r)(\vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2)] \left[\frac{3}{r^2} (\vec{\sigma}_1 \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \vec{r}) - (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) \right]$$

und dem Spin-Bahn-Potential

$$V_{LS} = V_{LS}(r)\vec{L}\vec{S}.$$

Die Zentralkraft ist der wichtigste Teil der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung. In der Literatur existieren nun verschiedene Darstellungen für ihre Beschreibung, die in Abhängigkeit von der jeweiligen physikalischen Anwendung mehr oder weniger vorteilhaft sind. In Anhang A werden diese Darstellungen und ihre Umrechnungen untereinander genauer erläutert.

Die radiale Abhängigkeit der Funktionen $V(r)$ kann man jedoch nicht aus den Symmetrieüberlegungen herleiten. Geht man jedoch, wie schon in der Einleitung erwähnt, davon aus, daß Nukleonen durch Mesonenaustausch miteinander wechselwirken, so wird die Reichweite und Form der Wechselwirkung durch die Eigenschaften der Mesonen beeinflusst.

Dies läßt sich, sehr vereinfacht, auf folgende Weise sehen: Betrachtet man das Nukleon an einem Punkt $\vec{r}_1$ als die Quelle eines skalaren Mesonenfeldes, so läßt sich dieses Feld durch Lösen der Klein-Gordon Gleichung bestimmen. Die Stärke der Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen ist dann durch die Stärke des Mesonenfeldes am Ort $\vec{r}_2$ des zweiten Nukleons gegeben. Als Lösung findet man die radiale Abhängigkeit des Yukawa Potentials:

$$V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = V_0 \frac{e^{-\mu|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{\mu|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (3.1)$$

wobei die Reichweite $\mu = \hbar/mc$ der inversen Masse des Mesons entspricht.

Aus Experimenten [Mc 69] weiß man, daß das Nukleon-Nukleon-Potential für lange Reichweiten attraktiv ist. Dies kann durch den Austausch eines π -Mesons erklärt werden, dessen Masse von 138 MeV einer Reichweite von 1.414 fm entspricht. Für kurze Reichweiten (< 0.8 fm) jedoch ist das Potential extrem repulsiv. Man versucht deshalb den kurzreichweitigen Bereich durch den Austausch verschiedener skalarer und Vektormesonen zu erklären. In der Regel behilft man sich hier jedoch durch ein phänomenologisches Potential, dessen Parameter an die experimentell gemessene Nukleon-Nukleon-Streuphase angepaßt wurden und dessen radiale Abhängigkeit wiederum durch die Überlagerung von Yukawas mit den Reichweiten der entsprechen Mesonen ω , ρ und σ gegeben ist.

Zu erwähnen sind hier insbesondere das Hamada-Johnston- und das Reid-Potential [HJ 62, Re 68], die in den sechziger Jahren erstmals eingeführt wurden, sowie die moderneren Bonn und Paris Potentiale [BM 90, La 80].

3.2 Die effektive in–medium Wechselwirkung

Wie schon erwähnt wurde, ist die freie NN–Wechselwirkung für geringe Entfernungen zwischen den Nukleonen extrem repulsiv, manche Parametrisierungen benutzen zur Beschreibung dieser Eigenschaft sogar einen *hard core* [$V(r) = \infty$ für $r \leq 0.4$ fm]. Dies führt zu unüberwindbaren Problemen bei der Anwendung in Hartree–Fock–Rechnungen, da durch den *hard core* die HF-Matrixelemente unendlich werden. Jedoch entspricht die freie NN–Wechselwirkung nicht der Wechselwirkung, die die Nukleonen in einem Kern spüren, in dem sie von anderen Nukleonen umgeben sind. So können dort die Nukleonen nicht mehr durch ebene Wellen beschrieben werden, sondern es müssen die Schalenmodellwellenfunktion für endliche Kerne benutzt werden. Analog zur Lippmann–Schwinger–Gleichung für die Streumatrix (T–Matrix) der freien NN–Wechselwirkung erhält man die effektive in–medium Wechselwirkung, durch Aufsummation aller Streu- und Rückstreuprozesse zweier miteinander wechselwirkender Nukleonen [Br 55, Da 67]. Dies wird in Abb. 3.2 dargestellt. Dabei ist V die freie Wechselwirkung und G die effektive Wechselwirkung im Kern, die sogenannte Brückner’sche G–Matrix. Man erhält diese durch Summation aller Leiterdiagramme, schematisch dargestellt durch eine Operatorgleichung, die Bethe–Goldstone–Gleichung:

$$G = V + V \frac{Q_F}{E - H_0} G$$

Dabei ist H_0 der Hamiltonoperator des Kerns und Q_F ein Projektionsoperator, der auf alle nicht besetzten intermediären Zustände projiziert und so dafür sorgt, daß das Pauli–Prinzip nicht verletzt wird.

Entscheidend ist nun, daß die G–Matrix über den Pauliblockingoperator Q_F von der Dichte des Mediums abhängt, und man deshalb für jeden Kern eine andere effektive Wechselwirkung erhält. Außerdem werden zur Berechnung der G–Matrix die Wellenfunktionen und Einteilchenenergien der Nukleonen im Kern benötigt. Diese erhält man jedoch erst aus der Lösung dieses Vielteilchenproblems, zu dessen Lösung wiederum die G–Matrix benötigt wird. Dies führt zu einem selbstkonsistenten Problem, das im Rahmen der Brückner–Hartree–Fock Theorie (BHF) [Kö 75] behandelt werden kann.

Das Ziel dieser Arbeit ist es nun, eine effektive NN–Wechselwirkung zu finden, die diese Berechnungen vereinfacht, indem sie zwar explizit von der Dichte abhängt, diese Dichteabhängigkeit jedoch nicht für jeden einzelnen Kern aus G–Matrixrechnungen bestimmt werden muß.

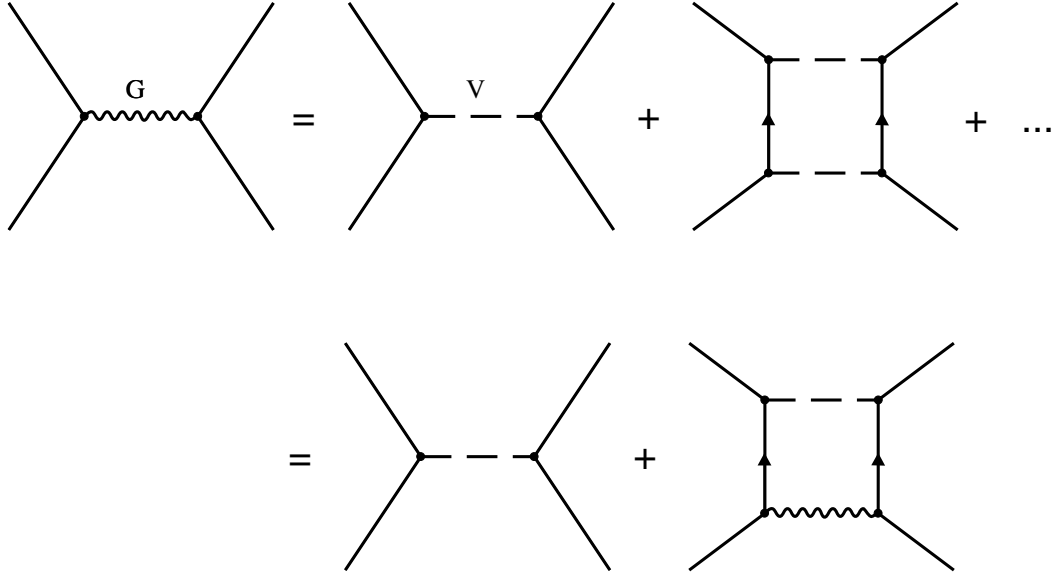


Abbildung 3.2: Die Bethe–Goldstone–Gleichung

3.3 Phänomenologische NN-Wechselwirkungen

Die Lösung der Bethe–Goldstone Gleichung zur Bestimmung der G–Matrix eines speziellen Kerns im Rahmen der selbstkonsistenten BHF-Theorie ist sehr aufwendig und Rechnungen zeigten, daß die Übereinstimmung der Ergebnisse mit den experimentellen Daten nicht sehr befriedigend ist [DMS73]. Aus diesem Grund wird in Kernstrukturrechnungen in der Regel die mikroskopische G–Matrix durch eine phänomenologische Wechselwirkung angenähert.

Die wohl am weitesten verbreitete und mit sehr großen Erfolg benutzte phänomenologische NN-Wechselwirkung ist die Skyrme-Wechselwirkung [Sk56a, Sk56b]. Sie ist eine dichte- und impulsabhängige Wechselwirkung, die aufgrund einer δ -Kraft keine endliche Reichweite mehr besitzt. Der allgemeinste Ansatz für ihre Struktur ist [FR 86]

$$\begin{aligned}
 V_{\text{Skyrme}}(1, 2) &= t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
 &+ \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) \left[\delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}_{12}^2 + \vec{k}_{12}^2 \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right]
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

$$\begin{aligned}
& + t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \vec{k}_{12} \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}_{12} \\
& + \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& + i W_0 \vec{p}_{12} \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \times \vec{p}_{12}.
\end{aligned}$$

Dabei ist $\vec{p}_{12} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ der relative Impuls der Nukleonen. Es existieren unterschiedliche Parametrisierungen der Skyrme-Wechselwirkung. Ihre Parameter $t_0, t_1, t_2, t_3, x_0, x_1, x_2, x_3, \alpha$ und W_0 wurden so angepaßt, daß mit ihr berechnete Eigenschaften endlicher Kerne, wie Bindungsenergien und Ladungsradien, mit den experimentellen Daten übereinstimmen. Der Fit der Parameter erfolgt dabei in der Regel an doppelt magische Kerne wie ^{208}Pb oder ^{40}Ca [VB 72].

Die Struktur der Wechselwirkung ist sehr einfach, insbesondere wird durch die δ -Funktion die numerische Berechnung der Hartree-Fock- und Paarmatrixelemente (oder ph- und pp-Matrixelemente, siehe Kapitel 2) extrem vereinfacht. Eine weitere sehr erfolgreiche phänomenologische Wechselwirkung ist die Gogny-Wechselwirkung [DG 80]. Sie besitzt im wesentlichen die gleiche Spin- und Isospinstruktur wie die Skyrme-Wechselwirkung, mit dem Unterschied, daß die orts- und impulsabhängigen Teile der Wechselwirkung durch eine Summe von Gauß-Funktionen ersetzt wurden:

$$\begin{aligned}
V_{Gogny}(1, 2) &= \sum_{i=1,2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) e^{-\left(\frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\mu_i}\right)^2} \\
&+ t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \rho^{1/3} \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
&+ i W_0 \vec{p}_{12} \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \times \vec{p}_{12}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Auch hier wurden die Parameter durch einen Fit an doppelt magische Kerne bestimmt.

Während einerseits diese Wechselwirkungen sehr erfolgreich für die Berechnung von Grundzustandseigenschaften stabiler Kerne eingesetzt wurden und numerisch einfach zu handhaben sind, fehlt ihnen andererseits die mikroskopische Fundierung. So kann weder eine δ -Funktion noch eine Gaußfunktion die radiale Abhängigkeit des Yukawa-Potentials korrekt beschreiben, noch können die Parameter der Wechselwirkungen direkt mit physikalischen Größen gleichgesetzt werden. Da diese Parameter an stabile Kerne angepaßt wurden, treten insbesondere bei der Berechnung von Eigenschaften von Kernen an der Protonen- oder Neutronenabbruchkante Probleme auf, da diese Kerne mit ihrer starken Ladungsasymmetrie Anforderungen stellen, die weder von der Skyrme- noch von der Gogny-Wechselwirkung erfüllt werden

können. Für eine korrekten Beschreibung dieser komplizierteren Kerne sollte daher eine mikroskopische Wechselwirkung eingesetzt werden.

Da es jedoch, wie am Anfang erwähnt, sehr aufwendig ist, für jeden Kern eine entsprechende G-Matrix zu berechnen, soll versucht werden, eine mikroskopisch fundierte Parametrisierung der G-Matrix zu finden, die in der Lage ist, sowohl Eigenschaften stabiler als auch exotischer Kerne zu beschreiben. Um diese effektive Wechselwirkung zu erhalten, soll die Dichteabhängigkeit der G-Matrix parametrisiert werden.

3.4 Die M3Y-Wechselwirkung

Eine besonders in der Streutheorie weitverbreitete effektive NN-Wechselwirkung ist die sogenannte M3Y-Wechselwirkung, die *Michigan version of the in-medium interaction*. Sie wurde von Bertsch und Anantaraman [Be 77, An 83] durch einen Fit von G-Matrix Elementen an eine Summe von Yukawa-Termen der Form in Gleichung (3.1) hergeleitet. Die G-Matrix Elemente wurden dabei in einer harmonischen Oszillatorbasis berechnet, die so gewählt wurde, daß mit ihr die Eigenschaften des ^{16}O Grundzustandes reproduziert werden konnten. Als NN-Potential zur Berechnung der Matrixelemente wurden in [Be 77] das Reid-Potential und das Potential von Hamada und Johnston gewählt. Die aktuellere Parametrisierung ist allerdings die aus [An 83], die als Ausgangspunkt das Paris NN-Potential [La 80] benutzt. Dieses Potential beschreibt im Gegensatz zu den vorher erwähnten Potentialen sowohl den langreichweitigen Bereich der NN-Wechselwirkung als auch den Bereich mittlerer Reichweite durch Mesonenaustausch, nur der kurzreichweitige Bereich wurde phänomenologisch an experimentelle Streudaten gefittet. Es basiert deshalb auf einer fundamentaleren Theorie der NN-Wechselwirkung als die früheren Potentiale und enthält außerdem auch neuere experimentelle Daten. Für die nachfolgenden Rechnungen wird deshalb die Paris-Parametrisierung benutzt. Sie besteht aus einer Überlagerung von drei Yukawatermen. Der langreichweitige Term beschreibt den Austausch eines π -Mesons ($r_0 = 1.414$ fm), die Reichweiten des repulsiven kurzreichweitigen Anteil von 0.25 fm und 0.4 fm entsprechen in etwa dem Austausch der Vektormesonen ω und ρ sowie der skalaren bzw. pseudoskalaren Mesonen σ und η .

Tabelle 3.1 zeigt die Stärken der M3Y-Wechselwirkung in den einzelnen Kanälen und den unterschiedlichen Darstellungen (entsprechend Anhang A), Abbildung 3.3 die radiale Abhängigkeit in der in [An 83] ursprünglich gefitteten {SE,TE,SO,TO}-Darstellung. Man erkennt dort insbesondere die starke

	$r_0 = 0.250 fm$	$r_0 = 0.400 fm$	$r_0 = 1.414 fm$
V_{SE}	11466	-3556	-10.463
V_{TE}	13967	-4594	-10.463
V_{SO}	-1418	950	31.389
V_{TO}	11345	-1900	3.488
V_0	11062	-2538	0.000
V_σ	939	-36	0.000
V_τ	314	224	0.000
$V_{\sigma\tau}$	-969	450	3.487
V_{pp}^d	11375	-2314	0.000
V_{pn}^d	10748	-2761	0.000
V_{pp}^e	-5642	536	-5.232
V_{pn}^e	2594	-1574	-10.463
V_0^d	11062	-2538	0.000
V_τ^d	314	224	0.000
V_0^e	-1524	-519	-7.847
V_τ^e	-4118	1055	2.616

Tabelle 3.1: Stärken in MeV der M3Y–Wechselwirkung in den unterschiedlichen Kanälen

Attraktion in den Even–Kanälen sowie die starke Repulsion im Singlett–Odd–Kanal der Wechselwirkung, erzeugt durch den Pionenaustausch.

Die M3Y–Wechselwirkung ist erfolgreich in vielen Rechnungen verwendet worden, insbesondere bei der Berechnung des optischen Potentials in der Nukleon–Kern- und Kern–Kern–Streuung [Sa 79]. Ein Problem ist allerdings, daß sie aufgrund ihrer Herleitung keine explizite Dichteabhängigkeit mehr besitzt, da diese durch den Fit an nur einen Kern verloren gegangen ist. Aus den oben angesprochenen Rechnungen weiß man, daß sie deshalb nur für einen kleinen Bereich der Kerndichte von etwa $1/3$ der normalen Kerndichte charakteristisch ist. Das erfolgreiche Verhalten in diesem Dichtebereich sollte sie aber gerade für die Anwendung in Kernstrukturechnungen für leichte exotische Kerne interessant machen, da für diese Kerne das Verhalten an der Kernoberfläche mit ihrer geringeren Dichte entscheidend ist. Auf der anderen Seite erwartet man von einer realistischen effektiven Wechselwirkung,

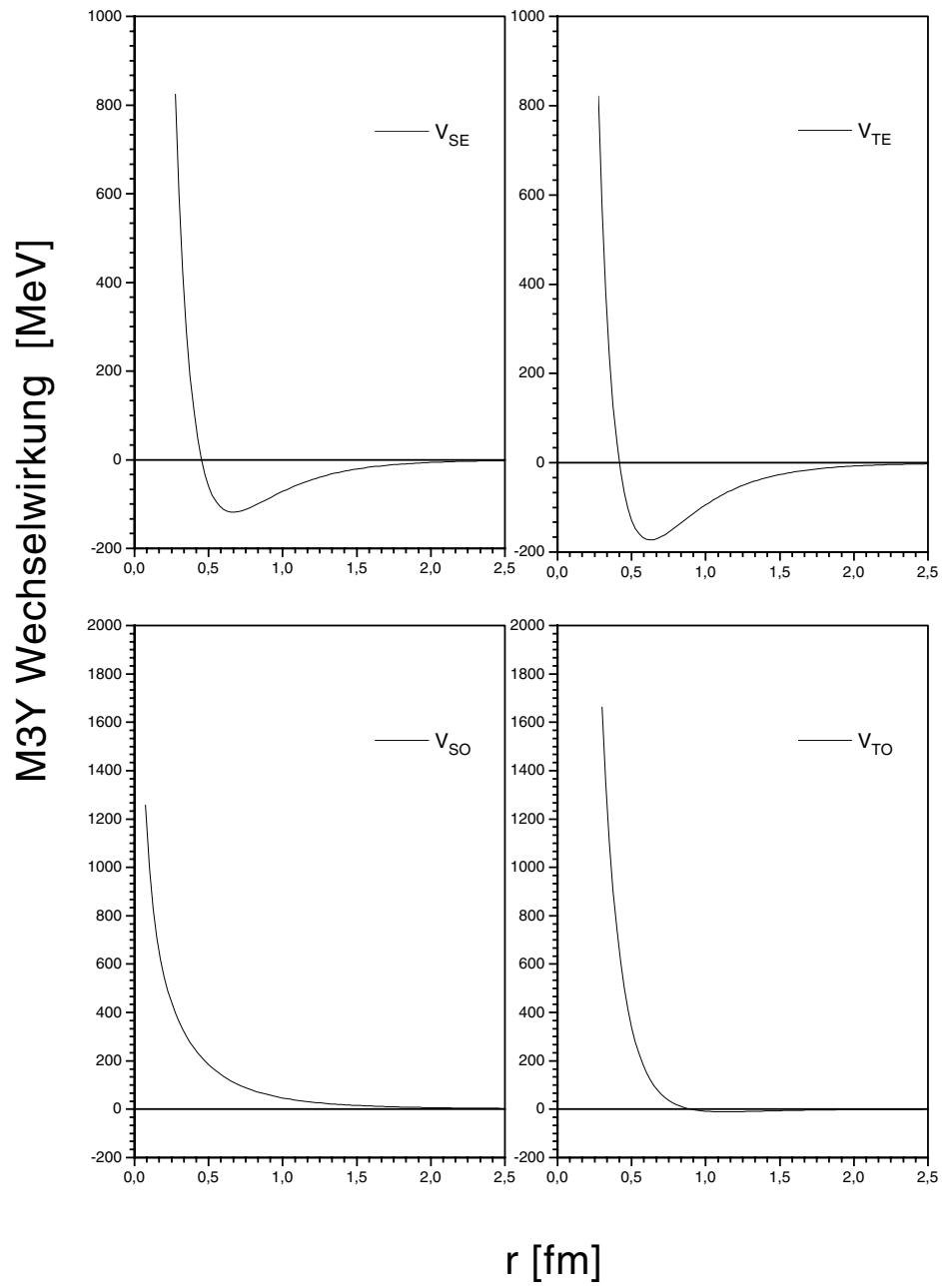


Abbildung 3.3: M3Y-Wechselwirkung

daß sie auch die Eigenschaften von stabilen magischen Kernen wie ^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca oder ^{208}Pb reproduzieren kann, die als Referenzkerne zur Bestimmung der Parameter phänomenologischer Wechselwirkungen wie der Skyrme– oder Gogny–Wechselwirkung benutzt wurden.

Um die M3Y–Wechselwirkung über einen größeren Dichtebereich anwendbar zu machen, ist es deshalb notwendig, sie durch eine realistische explizite Dichteabhängigkeit zu erweitern. Dies wird in Kapitel 4 genauer erläutert.

Kapitel 4

Die dichteabhängige NN–Wechselwirkung

Als erster Test der M3Y–Wechselwirkung sollen nun mit ihr die Eigenschaften unendlicher Kernmaterie berechnet werden.

4.1 Die Zustandsgleichung unendlicher Kernmaterie

Die Grundzustandsenergie ist in Hartree–Fock–Rechnungen nach (2.3) gegeben durch

$$\begin{aligned} E &= T + \frac{1}{2} \langle V \rangle \\ &= \sum_{\sigma\tau} \sum_{k \leq k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\tau_1} \sum_{\sigma_2\tau_2} \sum_{k_1 \leq k_{F_1}} \sum_{k_2 \leq k_{F_2}} \langle \sigma_1\tau_1 \vec{k}_1, \sigma_1\tau_1 \vec{k}_1 | \bar{V}_C | \sigma_1\tau_1 \vec{k}_1, \sigma_1\tau_1 \vec{k}_1 \rangle \end{aligned} \quad (4.1)$$

wobei über alle besetzten Zustände k , die kleiner als der Fermi–Impuls k_F sind, den Spin σ , den Isospin τ und das antisymmetrisierte Zweiteilchenmatrixelement der Zentralwechselwirkung summiert wird. In unendlicher Kernmaterie sind die Einteilchenwellenfunktionen $|\sigma\tau\vec{k}\rangle$ ebene Wellen und man kann die Ortwellenfunktion schreiben als

$$|\vec{k}\rangle = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}}.$$

Aus Gründen der Einfachheit sei das Normierungsvolumen $\Omega \equiv 1 fm^3$. Dadurch erhält man für die Teilchenzahl $A = \rho\Omega \equiv \rho fm^3$. Im Fermi-Gas-Modell nimmt man nun an, daß alle Zustände in einer Fermikugel mit dem Radius k_F homogen verteilt sind und kann so die Summation in (4.1) durch eine Integration ersetzen. Die Anzahl der Teilchen identischen Isospins (also Protonen bzw. Neutronen) pro Volumen ist dann gegeben durch

$$\rho_q = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Theta(k - k_{F_q}) = \frac{k_{F_q}^3}{3\pi^2}. \quad q = p, n$$

Hierbei wurde über die Spinzustände summiert. Der Fermi-Impuls ist also $k_{F_q} = (3\pi^2\rho_q)^{1/3}$, für symmetrische Kernmaterie mit $\rho_p = \rho_n = \frac{\rho}{2}$ ist er $k_F = \left(\frac{3\pi^2}{2}\rho\right)^{1/3} = k_{F_q}$.

Die kinetische Energie ist dann gegeben durch

$$T_q = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Theta(k - k_{F_q}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{3}{5} \tau_q \rho_q \quad \text{mit} \quad \tau_q = \frac{\hbar^2 k_{F_q}^2}{2m},$$

die gesamte kinetische Energie durch

$$\begin{aligned} T &= T_p + T_n = \frac{3}{5} [\tau_p \rho_p + \tau_n \rho_n] \\ &= \frac{3}{5} \tau \rho \quad \text{falls} \quad \rho_p = \rho_n = \frac{\rho}{2} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Zur Berechnung der potentiellen Energie schreibt man die NN-Wechselwirkung, wie in Anhang A.2 gezeigt wird, in spingemittelte Wechselwirkungen für den pp- (Proton-Proton) und den pn- (Proton-Neutron) Kanal, jeweils separat für den Hartree- und den Fock-Term, um und erhält nach Summation über Spin und Isospin:

$$\langle V \rangle = \langle V_{pp}^d \rangle + 2\langle V_{pn}^d \rangle + \langle V_{nn}^d \rangle + \langle V_{pp}^e \rangle + 2\langle V_{pn}^e \rangle + \langle V_{nn}^e \rangle \quad (4.3)$$

Dabei stehen die Abkürzungen e und d für den direkten (oder Hartree-) bzw. den Austausch- (oder Fock) Term. Man erhält zum Beispiel

$$\langle V_{pn}^d \rangle = 4 \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \Theta(k_1 - k_p) \int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} \Theta(k_2 - k_n) \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_{pn}^d | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle \quad (4.4)$$

$$\langle V_{pn}^e \rangle = 4 \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \Theta(k_1 - k_p) \int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} \Theta(k_2 - k_n) \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_{pn}^e | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle. \quad (4.5)$$

4.1. DIE ZUSTANDSGLEICHUNG UNENDLICHER KERNMATERIE 23

Für ebene Wellen ist die Berechnung der Matrixelemente in (4.4) und (4.5) trivial. Der direkte Anteil ist durch das Volumenintegral der Wechselwirkung festgelegt

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_{pn}^d | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle = \int d^3 s V_{pn}^d(s) \quad (4.6)$$

und aus der Antisymmetrisierung erhält man den Austauschanteil

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_{pn}^e | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle = \int d^3 s j_0(sk_1) j_0(sk_2) V_{pn}^e(s), \quad (4.7)$$

wobei j_0 eine sphärische Besselfunktion der Ordnung $n = 0$ ist [AS 65]. Setzt man dieses Ergebnis nun in (4.4) und (4.5) ein, so erhält man nach Integration über die Fermikugel

$$\begin{aligned} \langle V_{pn}^d \rangle &= \rho_p \rho_n \frac{1}{4} \int d^3 s V_{pn}^d(s) \\ &= \rho_p \rho_n \frac{1}{4} U_{pn}^d \end{aligned} \quad (4.8)$$

und

$$\begin{aligned} \langle V_{pn}^e \rangle &= \rho_p \rho_n \frac{1}{4} \int d^3 s \rho_{SL}(sk_p) \rho_{SL}(sk_n) V_{pn}^e(s) \\ &= \rho_p \rho_n \frac{1}{4} U_{pn}^e(\rho_p, \rho_n). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Wie man leicht sieht, ist die Größe der potentiellen Energie im direkten Term proportional zum Volumenintegral über die Wechselwirkung, während im Austauschterm dieses noch mit einem zusätzlichen Beitrag aus der sogenannten *Slater-Dichte* $\rho(r) \rho_{SL}(sk_F)$ gewichtet wird, die durch den Fermi-Impuls direkt von der Kerndichte abhängt. Sie ist die Dichtematrix $\rho(r, r')$ in Kernmaterie und definiert durch

$$\rho_{SL}(sk_F) = \frac{3}{sk_F} j_1(sk_F) = \left(\frac{4\pi}{3} k_F^3 \right)^{-1} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \Theta(k - k_F) j_0(sk) \quad (4.10)$$

Die gesamte potentielle Energie lautet somit

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \left[\rho_p^2 U_{pp}^d + 2\rho_p \rho_n U_{pn}^d + \rho_n^2 U_{nn}^d \right] \\ &+ \left[\rho_p^2 U_{pp}^e(\rho_p) + 2\rho_p \rho_n U_{pn}^e(\rho_p, \rho_n) + \rho_n^2 U_{nn}^e(\rho_n) \right] \end{aligned} \quad (4.11)$$

U_{SE}	U_{TE}	U_{SO}	U_{TO}
-980.280	-1324.020	1600.770	823.433

U_0	U_σ	U_τ	$U_{\sigma\tau}$
131.173	155.397	241.332	295.531

U_{pp}^d	U_{pn}^d	U_{pp}^e	U_{pn}^e
372.505	-110.159	-862.645	-1127.930

U_0^d	U_τ^d	U_0^e	U_τ^e
131.173	241.332	-995.285	132.640

Tabelle 4.1: Volumenintegrale in MeV der M3Y-Wechselwirkung in den unterschiedlichen Kanälen

Für symmetrische Kernmaterie vereinfacht sich dieser Ausdruck unter Benutzung von (A.9) zu

$$\begin{aligned}
\langle V \rangle &= \frac{1}{4} \rho^2 [U_{pp}^d + 2U_{pn}^d + U_{nn}^d] + \frac{1}{4} \rho^2 [U_{pp}^e(\rho) + 2U_{pn}^e(\rho) + U_{nn}^e(\rho)] \\
&= \rho^2 [U_0^d + U_0^e(\rho)],
\end{aligned} \tag{4.12}$$

mit

$$U_0^d = \int d^3s V_0^d(s) \quad \text{und} \quad U_0^e(\rho) = \int d^3s \rho_{SL}^2(sk_F) V_0^d(s).$$

Die Bindungsenergie E/A pro Nukleon in Abhängigkeit von der Dichte bezeichnet man als Zustandsgleichung unendlicher Kernmaterie oder EoS (equation of state). Man erhält mit obigen Gleichungen für symmetrische Kernmaterie:

$$\frac{E}{A} = \frac{3}{5} \tau + \frac{1}{2} \rho [U_0^d + U_0^e(\rho)] \tag{4.13}$$

Von der EoS weiß man, daß sie ein Minimum bei einer Dichte von ungefähr $\rho_0 = 0.16 - 0.17 fm^{-3}$ besitzt [PB 75]. Dies entspricht in etwa der Dichte im Innern stabiler Kerne. An diesem Sättigungspunkt beträgt die Bindungsenergie pro Teilchen etwa $E/A = -15.85 MeV = -a_V$. a_V ist der Volumenkoeffizient der semiempirischen Massenformel von Bethe und Weizsäcker [We 35].

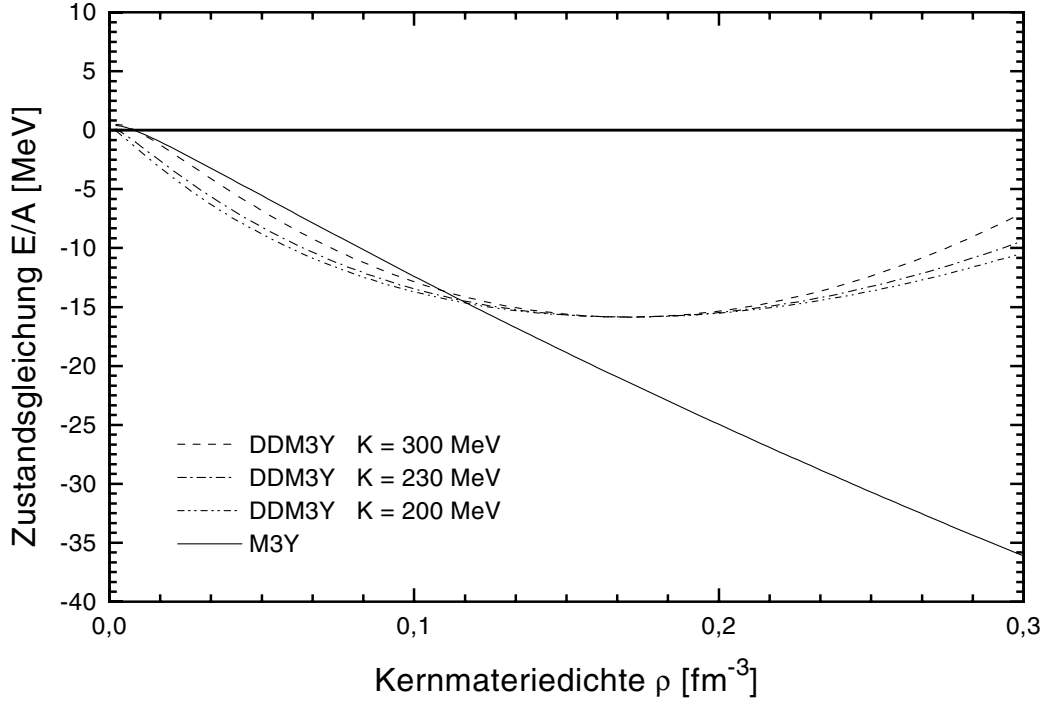


Abbildung 4.1: Die Zustandsgleichung für Kernmaterie für verschiedene Kompressibilitäten K der M3Y-Wechselwirkung (DDM3Y steht für die dichteabhängige M3Y-Wechselwirkung)

Tabelle 4.1 zeigt die Volumenintegrale der M3Y-Wechselwirkung. Es fällt auf, daß sie nur im Austauschterm attraktiv ist, dort allerdings viel stärker, als der direkte Term repulsiv ist. Für hohe Dichten wird deshalb der potentielle Beitrag zur Bindungsenergie dominant und überkompensiert bei weitem die Repulsion durch die kinetische Energie. Aus diesem Grund wird die Sättigungsbedingung von der M3Y-Wechselwirkung nicht erfüllt, die Kernmaterie kollabiert. Man sieht dies in Abbildung 4.1. Dies ist ein allgemeines Problem in nichtrelativistischen Hartree-Fock-Rechnungen für Kernmaterie mit dichteunabhängigen Wechselwirkungen. Im relativistischen Walecka-Modell [SW 86] tritt dieses Problem nicht auf, da die Sättigungsbedingung auf natürliche Weise durch die Neutralisations des attraktiven skalaren Feldes mit dem repulsiven vektoriellen Feld erfüllt wird.

Durch eine Verbesserung der M3Y-Wechselwirkung läßt sich dieses Problem allerdings lösen. Wie schon erwähnt wurde, besitzt diese aufgrund des Fits an

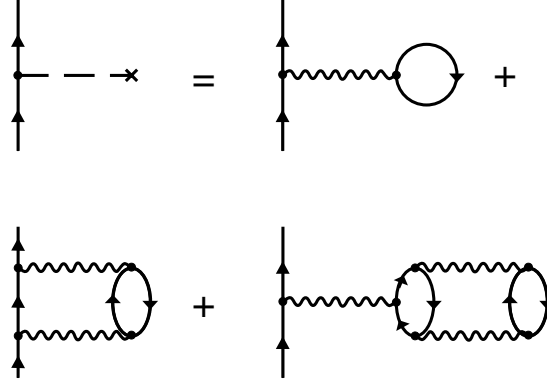


Abbildung 4.2: Diagramme, die zum Meanfield beitragen

die G -Matrix-Elemente eines einzelnen Kernes keine Dichteabhängigkeit. Es erscheint deshalb sinnvoll, durch die Einführung einer explizit dichteabhängigen Funktion diese Dichteabhängigkeit nachträglich wieder herzustellen, und dadurch eine verbesserte Beschreibung von Kernmaterie (und endlichen Kernen) über einen großen Dichtebereich zu erhalten.

Dies geschieht auf einfache physikalische Weise durch eine Korrektur der Nukleon-Meson-Kopplungskonstanten, die die Stärke der Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen bestimmt [FL 95]. Nimmt man an, daß die Kopplungskonstante ihre Stärke mit der Dichte des Mediums ändert, und versucht, diese Abhängigkeit durch eine dichteabhängige Funktion zu parametrisieren, so erhält man analog zu (3.1) für die Form der Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = g(\rho(\vec{r}_1)) V_0 \frac{e^{-\mu|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{\mu|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} g(\rho(\vec{r}_2)). \quad (4.14)$$

Dabei ist $g(\rho)$ die noch zu bestimmende Funktion. Zu beachten ist, daß die modifizierte Wechselwirkung nicht länger nur vom Relativabstand der Nukleonen abhängt. Dies gilt insbesondere für endliche Kerne.

Die Dichteabhängigkeit des Vertex führt zur Berücksichtigung zusätzlicher Diagramme bei der Berechnung des Einteilchenmittelfeldes [Ne 82, Kö 75], das man durch Variation der G -Matrix erhält. Man sieht dies in Abbildung 4.2. Dabei entspricht das erste Diagramm auf der rechten Seite der Gleichung dem einfachen Hartree-Fock-Meanfield, während die beiden anderen Diagramme, die sogenannten Rearrangementdiagramme, die Abhängigkeit der G -Matrix von der Dichte bzw. den Einteilchenenergien berücksichtigen.

4.2 Fit an symmetrische Kernmaterie

Die Bestimmung der dichteabhängigen Funktion $g(\rho)$ erfolgt in symmetrischer Kernmaterie, für die aufgrund ihrer Isotropie weiterhin $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ gilt. Dazu bestimmt man $g(\rho)$ so, daß die Zustandsgleichung die allgemein bekannten Eigenschaften unendlicher Kernmaterie korrekt beschreibt. Da man in symmetrischer Kernmaterie aufgrund (4.13) nur Aussagen über den isoskalaren Kanal der Wechselwirkung machen kann, soll auch nur dieser durch die Funktion $g(\rho)$ modifiziert werden. Da Kernmaterie isotrop ist, und die Dichte also überall gleich ist und die Stärke der Wechselwirkung nicht vom Ort abhängt, macht man sowohl für den direkten als auch für den Austauschterm den Ansatz

$$\begin{aligned} V_0^d(\vec{r}) &\rightarrow f_0(\rho) V_0^d(\vec{r}) = V_0^d(\vec{r}, \rho) \\ V_0^e(\vec{r}) &\rightarrow f_0(\rho) V_0^e(\vec{r}) = V_0^e(\vec{r}, \rho), \end{aligned} \quad (4.15)$$

wobei $g(\rho(\vec{r}_1)) g(\rho(\vec{r}_1))$ durch $f(\rho) = g^2(\rho)$ ersetzt wurde. Für endliche Kerne wird wieder der ursprüngliche Ansatz benutzt.

Die Eigenschaften unendlicher Kernmaterie, durch die die Funktion $f_0(\rho)$ nun bestimmt werden soll, sind

die Bindungsenergie

$$\frac{E}{A} = \frac{3}{5}\tau + \frac{1}{2}\rho f(\rho) [U_0^d + U_0^e(\rho)]$$

der Druck

$$P = -\frac{d(E/A)}{dV} = \rho^2 \frac{d(E/A)}{d\rho}$$

und die Kompressibilität

$$K = k_F^2 \frac{d^2(E/A)}{dk_F^2} = 9\rho^2 \frac{d^2(E/A)}{d\rho^2}.$$

Die Sättigungsdichte ist dadurch charakterisiert, daß für diese Dichte die EoS ein Minimum besitzt, der Druck P also verschwindet. Die Kompressibilität K definiert den Krümmungsradius der EoS in Abhängigkeit von der Dichte. Der Wert von K an der Sättigungsdichte wird in der Literatur nicht eindeutig spezifiziert, man unterscheidet zwischen *harten* und *weichen* EoS, die eine Kompressibilität im Bereich von 200 MeV bzw. 350 MeV haben [BG 88, Ai 91].

Funktion	a	b	c	$\rho_0 [\text{fm}^{-3}]$	$K [\text{MeV}]$	$(E/A) [\text{MeV}]$
(a)	0.876	-1.993	-4.418	0.17	230	-15.85
(a)	0.876	1.993	-2.215	0.17	200	-15.85
(a)	0.876	-1.993	-9.556	0.17	300	-15.85
(a)	0.899	-2.138	-4.840	0.16	230	-15.85
(a)	0.899	-2.138	-2.430	0.16	200	-15.85
(a)	0.899	-2.138	-10.462	0.16	300	-15.85
(b)	1.159	-1.585	-0.302	0.17	230	-15.85
(b)	1.497	-2.261	0.640	0.17	200	-15.85
(b)	0.370	-0.008	-0.486	0.17	300	-15.85
(b)	1.305	-1.752	-0.346	0.16	230	-15.85
(b)	1.660	-2.462	0.701	0.16	200	-15.85
(b)	0.476	-0.095	-0.482	0.16	300	-15.85
(c)	1.428	0.387	0.000	0.17	230	-15.85
(c)	1.479	0.392	0.000	0.16	219	-15.85
$f_0(\rho) \equiv 1$				0.17	38.5	-21.35
$f_0(\rho) \equiv 1$				0.16	38.6	-20.12

Tabelle 4.2: Parametrisierung von $f_0(\rho)$ für verschiedene Sättigungspunkte und Kompressibilitäten

Man nimmt jedoch an, daß ein realistischer Wert von K zwischen diesen beiden Extrema, etwa bei $K = 230 \text{ MeV}$ liegt. Aufgrund der Unsicherheit dieses Wertes werden Rechnungen mit unterschiedlichen Kompressibilitäten durchgeführt. Die Bedingungen zur Bestimmung von $f(\rho)$ lauten somit:

$$\left. \frac{E}{A} \right|_{\rho=\rho_0} \simeq -15.85 \text{ MeV} \quad (4.16)$$

$$P|_{\rho=\rho_0} = 0 \quad (4.17)$$

$$K|_{\rho=\rho_0} = 200 - 350 \text{ MeV} \quad \rho_0 = 0.16 - 0.17 \text{ fm}^{-3} \quad (4.18)$$

Diese drei Werte erlauben die Wahl einer Funktion mit drei freien Parametern. Angenommen wird, daß der Wert von $f(\rho)$ abhängig ist vom Verhalten

des Fermi-Impulses k_F . Wir wählen deshalb $f(\rho)$ als ein Polynom in k_F bzw. in $\rho^{1/3}$. Verschiedene Funktionen wurden untersucht:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad f_0(\rho) &= a + b \left(\rho^{1/3} - \rho_0^{1/3} \right) + b \left(\rho^{1/3} - \rho_0^{1/3} \right)^2 \\ \text{(b)} \quad f_0(\rho) &= 1 + a \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1/3} + b \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{2/3} + c \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) \\ \text{(c)} \quad f_0(\rho) &= a \left[1 - b \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{2/3} \right] \end{aligned}$$

Da Funktion (c) nur zwei Parameter besitzt, wurde für sie die Kompressibilität nicht angefitet. Tabelle 4.2 zeigt für die verschiedenen Funktionen für verschiedene Sättigungsdichten und Kompressibilitäten Werte der Parameter a , b und c . Abbildung 4.1 zeigt die Zustandsgleichung für die dichteabhängige M3Y-Wechselwirkung (DDM3Y) im Vergleich mit der ursprünglichen Wechselwirkung (M3Y). Zur Bestimmung der Parameter rechnet man (4.16) bis (4.18) aus, und löst diese Gleichungen nach den Funktionswerten der Funktion $f(\rho_0)$ und deren Ableitungen auf. Dies erlaubt eine einfache Berechnung der Parameter für eine beliebige Struktur von $f_0(\rho)$.

4.3 Bestimmung der Symmetrieenergie

Betrachtet man nun nicht mehr symmetrische Kernmaterie, sondern Kernmaterie mit unterschiedlicher Protonen- und Neutronendichte, so erlaubt dies auch Rückschlüsse auf das Verhalten der M3Y-Wechselwirkung für asymmetrische Systeme. Dies ist, wie schon anfangs erwähnt, von besonderem Interesse für die Beschreibung exotischer Kerne. Das Verhalten der Bindungsenergie von Kernen bezüglich Proton/Neutron-Asymmetrie wird durch den Koeffizienten a_S (S für Symmetrie) beschrieben. Man definiert ihn durch eine Erweiterung von Gleichung (4.13) [PB 75]:

$$\frac{E(\rho, \rho_\tau)}{A} = \frac{E(\rho, 0)}{A} + \left(\frac{\rho_\tau}{\rho} \right)^2 \epsilon_\tau(\rho) \quad \rho_\tau = \rho_n - \rho_p \quad (4.19)$$

Dabei sind $\frac{E(\rho_0, 0)}{A} = -a_V$ und $\epsilon_\tau(\rho_0) = a_S$ die Volumen- bzw. Symmetriekoeffizienten, letzteren erhält man durch Differentiation der Bindungsenergie bezüglich der isovektoriellen Dichte ρ_τ :

$$a_S = \left. \frac{\partial E(\rho_0, \rho_\tau)}{\partial \rho_\tau^2} \right|_{\rho_\tau=0} \quad (4.20)$$

Der Wert von a_S liegt zwischen 28 MeV und 32 MeV, wie man aus Kernmaterierechnungen weiß [PB 75]. Die Anpassung der M3Y-Wechselwirkung an diesen Wert erfolgt nun analog zu (4.14) durch eine Vertexkorrektur mittels einer dichteabhängigen Funktion $f_\tau(\rho)$, die zusätzlich den isoskalaren Kanal modifiziert. Ihre Form wird analog zu f_0 gewählt:

$$\begin{aligned} V_\tau^d(\vec{r}) &\rightarrow f_\tau(\rho) V_\tau^d(\vec{r}) = V_\tau^d(\vec{r}, \rho) \\ V_\tau^e(\vec{r}) &\rightarrow f_\tau(\rho) V_\tau^e(\vec{r}) = V_\tau^e(\vec{r}, \rho), \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$f_\tau(\rho) = 1 + d \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1/3} \quad (4.22)$$

Zur Bestimmung von a_S startet man mit der allgemeinen Form der Bindungsenergie pro Teilchen,

$$\begin{aligned} \frac{E(\rho, \rho_\tau)}{A} &= \frac{3}{5} \frac{\tau_p \rho_p + \tau_n \rho_n}{\rho} \\ &+ \frac{1}{2\rho} \left[\rho_p^2 \tilde{U}_{pp}^d(\rho) + 2\rho_p \rho_n \tilde{U}_{pn}^d(\rho, \rho_n) + \rho_n^2 \tilde{U}_{nn}^d(\rho) \right] \\ &+ \frac{1}{2\rho} \left[\rho_p^2 \tilde{U}_{pp}^e(\rho; \rho_p) + 2\rho_p \rho_n \tilde{U}_{pn}^e(\rho; \rho_p, \rho_n) + \rho_n^2 \tilde{U}_{nn}^e(\rho; \rho_n) \right] \end{aligned} \quad (4.23)$$

und entwickelt diese um $\rho = \rho_n + \rho_p$ mit dem Entwicklungsparameter $\rho_\tau = \rho_n - \rho_p$. Dabei ist zu beachten, daß die Volumenintegrale $\tilde{U}(\rho)$ nun sowohl von f_0 als auch von f_τ abhängen, da die pp- und pn-Wechselwirkungen nach Anhang A.2 jetzt in der folgenden Form definiert sind:

$$\begin{aligned} V_{pn}(\vec{r}) &\rightarrow f_0(\rho) V_0(\vec{r}) - f_\tau(\rho) V_\tau(\vec{r}) \\ V_{pp}(\vec{r}) &\rightarrow f_0(\rho) V_0(\vec{r}) + f_\tau(\rho) V_\tau(\vec{r}). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Die Anteile an der Symmetrieenergie $\epsilon_\tau(\rho)$ lassen sich für den kinetischen Term $\epsilon_\tau^T(\rho)$ und den Beitrag vom direkten Term der potentiellen Energie $\epsilon_\tau^D(\rho)$ auf einfache Weise analytisch bestimmen, da sie nicht vom isoskalaren Kanal der Wechselwirkung abhängen. Man findet:

$$\epsilon_\tau^T(\rho) = \frac{1}{3} \tau(k_F(\rho)) \quad \epsilon_\tau^D(\rho) = \frac{1}{2} \rho f_\tau(\rho) U_\tau^d \quad (4.25)$$

Für den Beitrag vom Austauschterm ist eine Separation bezüglich des isoskalaren und des isovektoriellen Kanals jedoch nicht mehr möglich, da diese Kanäle durch die Slater-Dichten $\rho_{SL}(k_p)$ und $\rho_{SL}(k_n)$ gemischt werden. Man kann sich leicht überlegen, daß $\epsilon_\tau^E(\rho)$ auch vom Koeffizienten V_0^e abhängen

$\rho_0 = 0.17$	d	a_s [Mev]
$f_0 \in \{(1), (2), (3)\}$	0	31.27
	-0.177	28
	-0.050	32
$f_0 \equiv 1$	0	32.04
	-0.309	28
	-0.003	32

$\rho_0 = 0.16$	d	a_s [Mev]
$f_0 \in \{(1), (2), (3)\}$	0	30.00
	-0.159	28
	0.159	32
$f_0 \equiv 1$	0	30.56
	-0.206	28
	0.113	32

Tabelle 4.3: Parametrisierung von $f_\tau(\rho)$ für verschiedene Sättigungsdichten und Symmetriekoeffizienten

muß. Da dieser jedoch durch die dichteabhängige Funktion f_0 modifiziert wird, führt eine Änderung von E/A auch zu einer Änderung von $\epsilon_\tau^E(\rho)$. Man kann $\epsilon_\tau^E(\rho)$ und damit $f_\tau(\rho)$ jedoch numerisch nach Formel (4.20) bestimmen, *nachdem* $f_0(\rho)$ bestimmt wurde. Dies verändert nicht mehr $f_0(\rho)$, da E/A nach Formel (4.13) nicht von $f_\tau(\rho)$ abhängen kann.

Ergebnisse werden in Tabelle 4.3 gezeigt. Man sieht, daß die mit der M3Y-Wechselwirkung berechneten Werte für a_s auch ohne Modifikation im isovektoriellen Kanal sehr gut im theoretisch vorausgesagten Bereich liegen.

Rechnungen, in denen die M3Y durch eine dichteabhängigen Funktion modifiziert wurde, wurden auch von Kobos et. al [Ko 84] und von Khoa und von Oertzen durchgeführt [KO 93]. In diesen Rechnungen wurde jedoch eine andere algebraische Struktur für $f(\rho)$ benutzt und auf die Anpassung der Symmetrieenergie verzichtet. Außerdem erfolgte die Modifizierung der Wechselwirkung unter dem Aspekt, sie zur Berechnung des optischen Potentials zur benutzen.

Im Gegensatz dazu soll die in diesem Kapitel erhaltene modifizierte dichteabhängige Wechselwirkung (DDM3Y) in Paarungsrechnungen und an ge-

bundenen endlichen Systemen getestet werden. Dies wird in den nächsten Kapiteln beschrieben.

Kapitel 5

Hartree–Fock–Bogoliubov in Kernmaterie

Nachdem im vorherigen Kapitel die Eigenschaften der M3Y–Wechselwirkung bezüglich des Einteilchenmittelfeldes, also im Teilchen–Loch–Kanal untersucht wurden, sollen nun die M3Y– und die DDM3Y–Wechselwirkung auf ihr Verhalten in Paarungsrechnungen untersucht werden. Dies erlaubt es, Aussagen über den Teilchen–Teilchen–Kanal der Wechselwirkung zu machen.

5.1 Die HFB–Gleichungen in Kernmaterie

Die in Kapitel 2 hergeleiteten Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen werden nun auf unendlicher Kernmaterie übertragen. Im Fermi–Gas–Modell nimmt man analog Kapitel 4 an, daß alle Zustände in einer Fermikugel mit dem Radius k_F homogen verteilt sind und ersetzt deshalb wieder die Summation über alle Zustände durch eine Integration über k :

$$\sum_k \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

Da die Nukleonen durch ebene Wellen beschrieben werden können, vereinfachen sich die HFB–Gleichungen beträchtlich. Denn aufgrund der Impulserhaltung $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2$, reduzieren sich die Teilchen–Loch- bzw. Teilchen–Teilchen–Matrixelemente aus (2.33) und (2.34) zu

$$V_{kk''k'k''} = \delta_{kk'} V_{kk''kk''} \quad \text{und} \quad V_{\bar{k}\bar{k}'k''\bar{k}''} = \delta_{kk'} V_{k\bar{k}k''\bar{k}''}. \quad (5.1)$$

Nach Summation über Spin und Isospin erhält man daraus die HFB–Gleichungen in Kernmaterie [Ku89a]:

Teilchenzahl

$$\rho(k_F) = 4 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v^2(k, k_F) \quad (5.2)$$

Besetzungswahrscheinlichkeit

$$v^2(k, k_F) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\epsilon(k, k_F) - \lambda}{\sqrt{(\epsilon(k, k_F) - \lambda)^2 + \Delta^2(k, k_F)}} \right\} \quad (5.3)$$

Einteilchenenergien

$$\epsilon(k, k_F) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 4 \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \langle kk' | V | kk' - k'k \rangle v^2(k', k_F) \quad (5.4)$$

Gap-Gleichung

$$\Delta(k, k_F) = - \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \langle k - k | V_{SE} | k' - k' \rangle u(k', k_F) v(k', k_F) \quad (5.5)$$

Die Paarwahrscheinlichkeit $u(k, k_F)v(k, k_F)$ erhält man aus $u^2(k, k_F) + v^2(k, k_F) = 1$, es folgt sofort, daß

$$u(k, k_F)v(k, k_F) = \frac{1}{2} \frac{\Delta(k, k_F)}{\sqrt{(\epsilon(k, k_F) - \lambda)^2 + \Delta^2(k, k_F)}}. \quad (5.6)$$

Dabei ist k_F der zur Dichte ρ , für die die Rechnungen durchgeführt werden, korrespondierende Fermi-Impuls. Im ungepaarten Fall ($\Delta = 0$) entspricht die Einteilchenenergie an der Fermikante $\epsilon(k_F, k_F)$ gerade dem chemischen Potential λ , so daß sich die Besetzungswahrscheinlichkeiten durch $v^2(k, k_F) = \Theta(k - k_F)$ gegeben sind. Damit reduzieren sich die obigen Gleichungen zu den HF-Gleichungen.

Die Hartree-Fock-Matrixelemente $\langle kk' | V | kk' - k'k \rangle$ wurden schon in Kapitel 4 berechnet, die Berechnung der Einteilchenenergien erfolgt analog wie für den ungepaarten Hartree-Fock-Grundzustand. Der einzige Unterschied ist, daß die HF-Matrixelemente mit der Besetzungswahrscheinlichkeit $v^2(k)$ gewichtet werden, und deshalb über alle möglichen Zustände k integriert werden muß.

Die Berechnung der Paarmatrixelemente in Kernmaterie ist trivial, da dort die Wellenfunktionen $|\vec{k}\rangle = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$ schon bekannt sind. Man erhält sofort, wenn man wieder das Normierungsvolumen $\Omega \equiv 1$ setzt:

$$\begin{aligned} \langle k - k | V_{SE} | k' - k' \rangle &= \int V_{SE}(r) e^{i\vec{r}(\vec{k} - \vec{k}')} \\ &= \int V_{SE}(r) j_0(|\vec{k} - \vec{k}'|r) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Da zur Lösung der HFB-Gleichungen über alle $\vec{k}$ integriert wird und aufgrund der Isotropie der Kernmaterie das Ergebnis nicht vom Winkel zwischen $\vec{k}$ und $\vec{k}'$ abhängen kann, darf man in (5.7) über die Winkel mitteln und erhält

$$\langle k - k | V_{SE} | k' - k' \rangle = \int V_{SE}(r) j_0(kr) j_0(k'r). \quad (5.8)$$

Für die M3Y-Wechselwirkung, die aus einer Überlagerung von Yukawa-Funktionen besteht ($V_{SE}(r) = \sum_i V_i \frac{e^{-\mu_i r}}{\mu_i r}$), kann dieses Integral analytisch berechnet werden. Das Ergebnis lautet:

$$\langle k - k | V_{SE} | k' - k' \rangle = \sum_i I_0(i) \frac{\mu_i^3}{4kk'} \ln \left[\frac{\mu_i^2 + (k + k')^2}{\mu_i^2 + (k - k')^2} \right] \equiv \tilde{V}_{SE}(k, k') \quad (5.9)$$

Dabei ist $I_0(i) = V_i \frac{4\pi}{\mu_i^3}$ das Volumenintegral der einzelnen Yukawa-Terme. Im freien Raum geht damit wegen $k, k' \rightarrow 0$ das Matrixelement $\tilde{V}_{SE}(k, k') \rightarrow \sum_i I_0(i)$ in das Volumenintegral des Singlett-Even-Kanals der Wechselwirkung über.

Bei Rechnungen mit der dichteabhängigen M3Y ist zu beachten, daß die Matrixelemente nun auch dichteabhängig sind. Man erhält die Dichteabhängigkeit des SE-Kanals durch Umrechnung der mit $f_0(\rho)$ und $f_\tau(\rho)$ modifizierten Koeffizienten $V_0^d(\rho)$, $V_\tau(\rho)^d$, $V_0^e(\rho)$ und $V_\tau(\rho)^e$ mit Hilfe der in (A.11) angegebenen Formel.

Die HFB-Gleichungen müssen nun simultan gelöst werden, da die Teilchenzahl bzw. Dichte ρ , die Einteilchenenergien und der Gap von den Bestzungswahrscheinlichkeiten $v^2(k)$ abhängen, diese jedoch aus den vorherigen Größen berechnet werden. Dies wird im nächsten Abschnitt genauer erklärt.

5.2 Ergebnisse

Die selbstkonsistente numerische Lösung der Gleichungen (5.2) - (5.5) erfolgt nach dem folgendem iterativen Schema:

1. Starte mit den HF-Einteilchenenergien und geeigneten Werten für $\Delta(k)$.
2. Berechne λ und $v^2(k)$ aus der Bedingungen, daß ρ den geforderten Wert annimmt, die Teilchenzahl also erhalten bleibt.
3. Berechne die Einteilchenenergien neu.
4. Löse die Gap-Gleichung
5. Gehe zurück zu Schritt 2 bis sich λ nicht mehr ändert.

Zur Lösung der Gap-Gleichung (5.5) diskretisiert man das Integral. Man erhält so ein nichtlineares Gleichungssystem. Dessen Lösung ist numerisch aufwendig, da der Integrand uv an der Stelle $k = k_F$, wo die Einteilchenenergie gerade dem chemischen Potential λ entspricht, ein ausgeprägtes Maximum besitzt, dessen Breite durch den Gap gegeben ist. Für kleine bzw. große Impulse dagegen fällt der Integrand sehr schnell auf Null ab. Im Grenzfall $\Delta \rightarrow 0$ verhält er sich wie eine δ -Funktion. Es ist daher notwendig, die Schrittweite für die numerische Integration im Bereich von k_F sehr klein zu wählen. Auf der anderen Seite kann man nicht nur den Impulsbereich um den Fermi-Impuls für die Rechnungen benutzen, da zu einer korrekten Berechnung der Einteilchenenergien nach Formel (5.4) alle Impulse mit nichtverschwindenden v^2 betrachtet werden müssen — und dies erfordert auch die Berücksichtigung kleiner Impulse. Allerdings ist es möglich, hohe Impulse abzuschneiden, da für diese sowohl v^2 als auch uv sehr klein werden. Als Integrationsbereich wurde daher der Bereich $0 \leq k \leq 2k_F$ gewählt. Als obere Grenze wurde $2k_F$ gewählt, da dies der maximale Relativimpuls zweier Teilchen innerhalb der Fermikugel ist. Insbesondere für Rechnungen bei sehr hohen Dichten, die als Lösung einen sehr kleinen Gap besitzen, ist daher eine sehr große Zahl von Stützstellen erforderlich. Um die Rechnung zu vereinfachen und ihre Konvergenz zu beschleunigen ist es aus diesem Grunde notwendig, einen guten Startwerte für λ und $\Delta(k)$ zu wählen. Dies ist durch eine Approximation der Gap-Gleichung möglich.

Eine erste Näherung wäre, daß Paarungsmatrixelement $\tilde{V}_{SE}(k, k')$ in (5.5) durch das Diagonalelement an der Fermi-Kante zu ersetzen, da man nur an dieser Stelle einen großen Beitrag von uv erwartet. Die Gap-Gleichung lautet dann

$$\Delta(k_F, k_F) = -\frac{1}{2} \tilde{V}_{SE}(k_F, k_F) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\Delta(k_F, k_F)}{\sqrt{(\epsilon(k, k_F) - \lambda)^2 + \Delta^2(k_F, k_F)}} \quad (5.10)$$

Da $\tilde{V}_{SE}(k_F, k_F)$ weder von k noch k' abhängt, muß auch der Gap zustandsunabhängig sein. Man erhält auf natürliche Weise das gleiche Ergebnis für das

Matrizelement, wenn man eine δ -Kraft mit konstanter Stärke im Paarkanal annimmt. Dies trifft zum Beispiel auf die Skyrme–Wechselwirkung zu, die exakt von dieser Struktur ist.

Die numerische Lösung von (5.10) reduziert sich, da nur noch ein Wert für Δ berechnet werden muß, zu einer einfachen Nullstellensuche und vereinfacht sich dadurch erheblich. Das Problem ist jedoch, daß das Integral wegen $\epsilon(k) \sim k^2$ linear divergiert. Eine Lösung dieses Problemes ist nur durch die Einführung eines Cut-offs k_c im Impulsraum möglich. Da dieser Cut-off jedoch den Wert des Integrals beeinflußt, ändert er auch den Wert des Gaps, so daß keine allgemeingültige modellunabhängige Aussage mehr über dessen Größe oder die Stärke der Paarkraft möglich ist. Hartree–Fock–Bogoliubov–Rechnungen mit Skyrme–Kräften wurden von Takahara et. al [Ta 94] sowie Jiang und Kuo [JT 88] durchgeführt. Insbesondere untersuchten sie die Abhängigkeit des Gaps von der Cut-off-Energie (bzw. -impuls). Benutzt man dagegen eine Paarkraft mit endlicher Reichweite, deren Matrizelemente für große k hinreichend schnell auf null abfallen, konvergiert das Integral in der Gap–Gleichung und die Einführung eines Cut-offs ist nicht mehr nötig.

Da aus dem oben angegebenen Grund die Näherung mit einer konstanten Paarkraft unzuverlässig ist, wird $\tilde{V}_{SE}(k, k')$ durch das Matrizelement mit $k = k'$ ersetzt. Auch in diesem Fall kann der Gap nicht mehr vom Zustand abhängen, da die Nichtdiagonalelemente der Paarmatrix durch die Diagonalelemente angenähert werden. Diese beschreiben jedoch korrekt das globale Verhalten der Paarkraft. Man erhält aus (5.5)

$$\Delta(k_F, k_F) = -\frac{1}{2} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \tilde{V}_{SE}(k', k') \frac{\Delta(k_F, k_F)}{\sqrt{(\epsilon(k', k_F) - \lambda)^2 + \Delta^2(k_F, k_F)}} \quad (5.11)$$

Diese Gleichung ist von der gleichen einfachen Struktur wie (5.10). Sie konvergiert jedoch, da (5.9) für große k verschwindet. Diese Approximation wird als Startwert zur Lösung der exakten HFB-Gleichungen benutzt. Die Güte dieser Näherung ist erstaunlich gut, wie man in Abbildung 5.1 erkennen kann. Diese zeigt jeweils für die M3Y als auch für die DDM3Y den Gap an der Fermikante in Abhängigkeit vom Fermi–Impuls, bei dem die Rechnungen durchgeführt wurden

Es wurden nun Rechnungen mit der dichteabhängigen M3Y für unterschiedliche Kompressibilitäten sowie mit der ursprünglichen M3Y durchgeführt und die Ergebnisse verglichen. Abbildung 5.2 zeigt die exakte Lösung der HFB–Gleichungen für die DDM3Y mit Kompressibilitäten zwischen 200 MeV und 300 MeV.

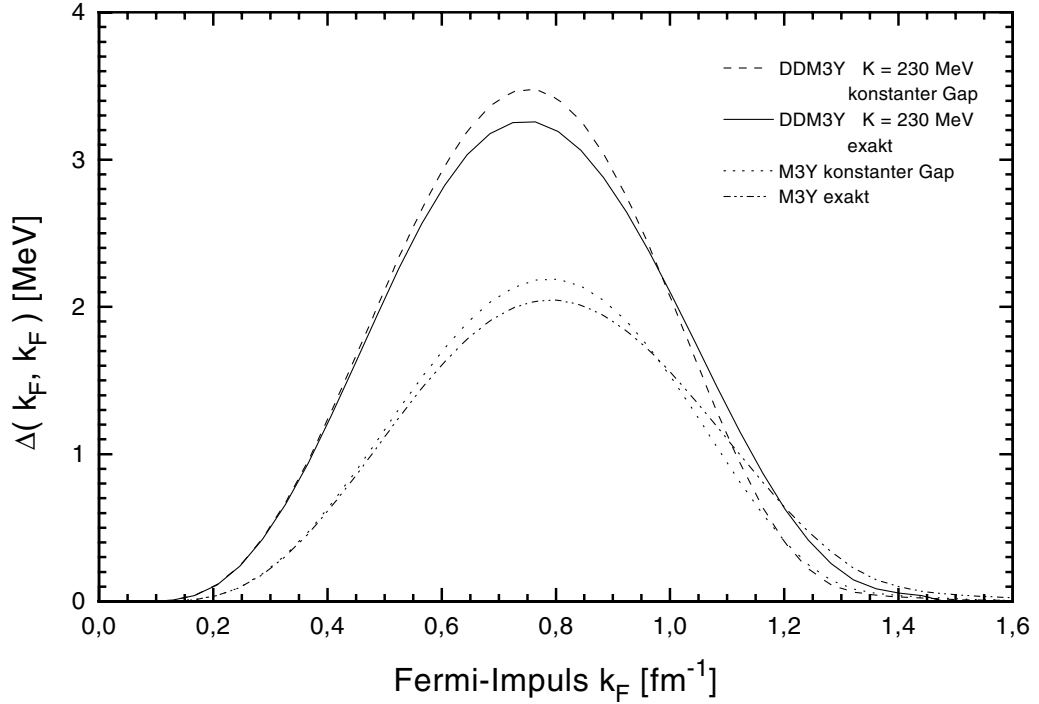


Abbildung 5.1: Vergleich vom Gap $\Delta(k_F)$ der Approximation aus Gleichung (5.11) und der exakten Lösung $\Delta(k_F, k_F)$ an der Fermi-kante im Abhängigkeit vom Fermi-Impuls

Man erkennt, daß alle Kurven ein Maximum im Bereich von $k_F \sim 0.8 \text{ fm}^{-1}$ besitzen. Dies entspricht einer Kernmateriedichte von $\rho = 0.035 \text{ fm}^{-3}$, also etwa einem Fünftel der Sättigungsdichte $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$. Dies stimmt mit den von Takahara et. al für verschiedene Skyrme-Parametrisierungen erhaltenen Ergebnissen überein [Ta 94]. Tendenziell erkennt man, daß sich das Maximum der Rechnungen mit der DDM3Y für größere Kompressibilitäten geringfügig zu kleinen Dichten verschiebt.

Die Höhe des Maximums hängt dagegen stark von der Kompressibilität der Kernmaterie ab. So liegt das Maximum für $K = 200 \text{ MeV}$ bei $\Delta(k_F, k_F) = 3.7 \text{ MeV}$, während es für $K = 300 \text{ MeV}$ nur $\Delta(k_F, k_F) = 2.45 \text{ MeV}$ beträgt. Für den realistischeren Wert von $K = 230 \text{ MeV}$ findet man $\Delta(k_F, k_F) = 3.25 \text{ MeV}$. Dieser Medieneffekt ist eine direkte Folge der Dichteabhängigkeit der Paarkraft. Die M3Y läßt sich nicht in diese Systematik einordnen. Das Maximum liegt bei nur 2.1 MeV , während ihre Kompressibilität mit $K \sim 40$

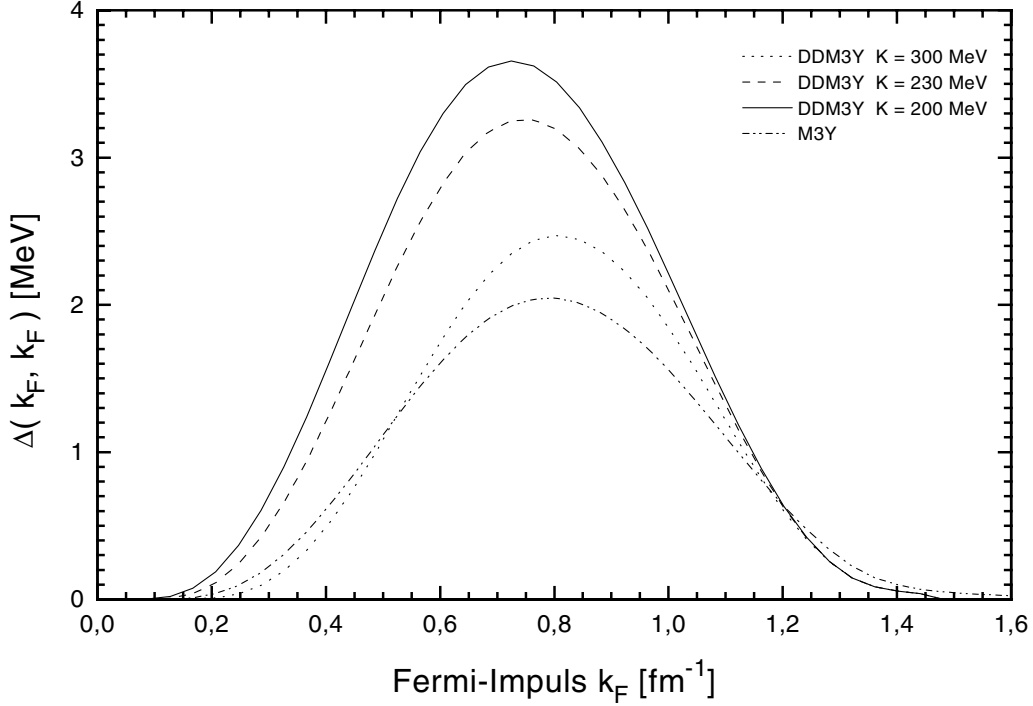


Abbildung 5.2: Exakte Lösung der HFB-Gleichungen für DDM3Y mit unterschiedlichen Kompressibilitäten. Gap an der Fermikante in Abhängigkeit vom Fermi-Impuls

MeV verschwindend gering ist. Das andere Verhalten der M3Y ist jedoch leicht verständlich, da sie einerseits vollkommen andere Einteilchenenergien besitzt (kein Sättigungspunkt!) und andererseits im Falle der DDM3Y die Stärke der Paarkraft durch die Dichteabhängigkeit verändert wurde. Man erkennt dies an der Stelle $k_F \sim 1.2 \text{ fm}^{-1}$. Dort hat die Funktion $f_0(\rho(k_F))$ ungefähr den Wert 1, demzufolge schneiden sich alle Kurven an dieser Stelle.

Die Tatsache, daß $\Delta(k_F, k_F)$ sein Maximum bei kleinen Fermi-Impulsen annimmt, bestätigt die Erwartung, daß Paarkorrelationen bei kleinen Dichten eine wichtige Rolle spielen und nicht vernachlässigt werden dürfen. Übertragen auf endliche Kerne bedeutet dies, daß Paarungskräfte in der Oberfläche am stärksten sind und von deren Eigenschaften abhängen. Man kann auch umgekehrt sagen, daß die Oberflächenstruktur durch die Paarkraft beeinflusst wird. Es daher anzunehmen, daß insbesondere die Eigenschaften leichter, oberflächendominierter Kerne von dem Verhalten des Teilchen-Teilchen-

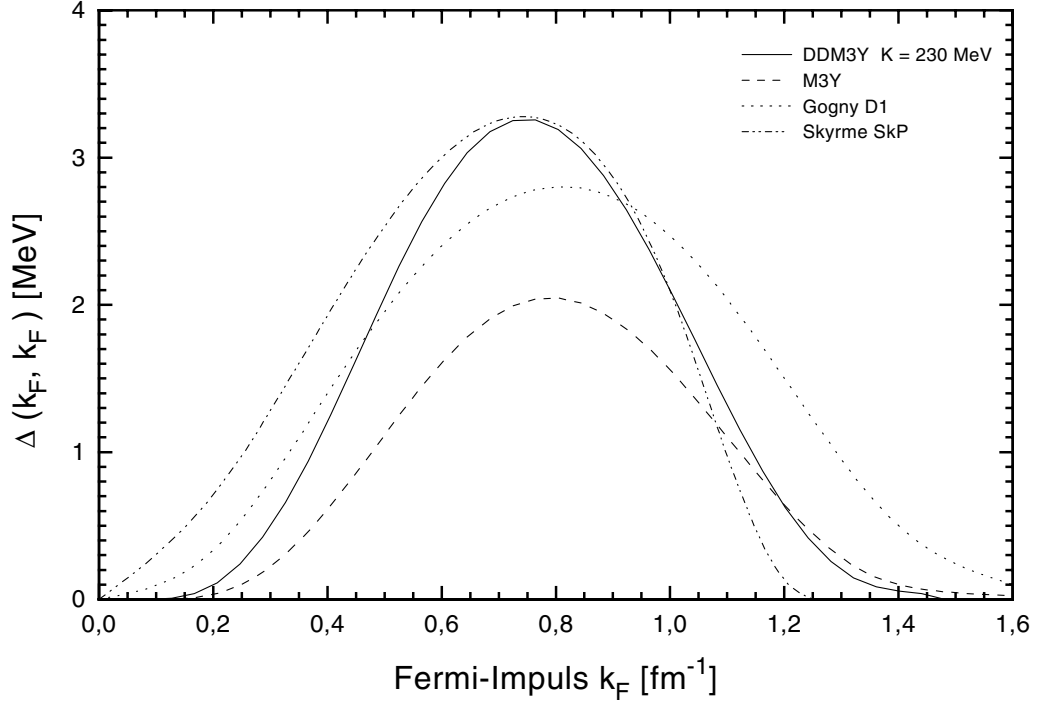


Abbildung 5.3: Vergleich der Dichteabhängigkeit des Gaps $\Delta(k_F, k_F)$ zwischen der DDM3Y, der Gogny D1 und der SkP Wechselwirkung.

Kanals der Wechselwirkung abhängen. Dies ist bei der Beschreibung exotischer Kerne von besonderer Wichtigkeit.

Im Gegensatz dazu verschwindet $\Delta(k_F, k_F)$ für die Sättigungsdichte ρ_0 fast vollständig, so daß sich bei Berücksichtigung von Paarkorrelationen die Eigenschaften der Zustandsgleichung am Sättigungspunkt nicht sehr stark ändern. Es wurde deshalb darauf verzichtet, die Funktion $f_0(\rho)$ in einer HFB-Rechnungen nachzujustieren, da die Unsicherheiten über die genaue Lage des Sättigungspunktes größer sind als die durch die Berücksichtigung der Paarkraft entstehenden Korrekturen. So beträgt der Wert von $\Delta(k_F, k_F)$ bei $\rho_0(k_F = 1.36 \text{ fm}^{-1}) = 0.17 \text{ fm}^{-3}$ nur 0.09 MeV für die DDM3Y bzw. 0.15 MeV für die M3Y.

Es ist nun interessant, sich die Quasiteilchen-Besetzungswahrscheinlichkeiten $v^2(k)$ bzw. die Paarungswahrscheinlichkeiten $u(k)v(k)$ für die Extremfälle des maximalen bzw. fast verschwindenden Gaps anzuschauen. Man sieht dies in

Abbildung 5.4. Während bei hohen Dichten die Besetzungswahrscheinlichkeit einer Θ -Funktion gleicht, also eine fast scharfe Fermi-Kante wie im reinen HF-Grundzustand existiert, erstreckt sich für ein großes Δ die Paarungswahrscheinlichkeit über den gesamten Impulsbereich.

Abschließend sollen noch die erhaltenen Ergebnisse mit Resultaten aus Rechnungen mit anderen Wechselwirkungen verglichen werden. Ähnliche Rechnungen wurden, wie schon erwähnt, mit der Skyrme-Wechselwirkung durchgeführt [Ta 94]. Kutscharek, Ring und Schuck haben HFB-Rechnungen mit der Gogny D1 Wechselwirkung durchgeführt [Ku89a, Ku89b]. Da die Gogny-Kraft wie die M3Y eine endliche Reichweite besitzt, ist es nicht notwendig, einen die Größe des Gaps verändernden Cut-Off einzuführen. Das macht den Vergleich der Ergebnisse mit der Gogny-Kraft besonders wichtig, da er qualitative Rückschlüsse auf die Eigenschaften des Teilchen-Teilchen-Kanal der (DD)M3Y erlaubt. Abbildung 5.3 vergleicht die DDM3Y, die M3Y, die Gogny D1 und die Skyrme SkP Wechselwirkung miteinander. Die phänomenologische SkP Wechselwirkung wurde unter besonderer Berücksichtigung der Paarungseigenschaften von Dobaczewski et al. bestimmt [Do 84].

Die Abhängigkeit des Gaps von der Dichte stimmt bei allen Rechnungen qualitativ sehr gut überein. Insbesondere die Lage des Maximums der Kurven ist fast identisch und bestätigt so das vernünftige Verhalten der DDM3Y im Paarungskanal. Die Größe des Maximums läßt sich für die Skyrme SkP nur bedingt vergleichen, da, wie schon erwähnt, dieser Wert nicht eindeutig bestimmt werden kann. Die gute Übereinstimmung mit der Gogny D1 Wechselwirkung ist allerdings sehr befriedigend, da sich diese Wechselwirkung mit großem Erfolg in HFB-Rechnungen für stabile Kerne bewährt hat [DG 80].

Unterschiede bestehen allerdings im Verhalten im Bereich der Sättigungsdichte. Während der mit der Skyrme SkP berechnete Gap für hohe Dichten zu schnell gegen Null geht und bei ρ_0 völlig verschwindet, besitzt die Gogny D1 an dieser Stelle den überraschend hohen Wert von ~ 0.6 MeV. Das mit der DDM3Y erhaltene Resultat liegt zwischen diesen beiden Extremen. Damit scheint die DDM3Y auch in diesem Dichtebereich physikalisch vernünftige Ergebnisse zu liefern. Allerdings ist noch nicht vollständig geklärt, welche Ergebnisse in diesem Dichtebereich wirklich zu erwarten sind, wenn auch die meisten Rechnungen einen Gap $\Delta(\rho_0) < 0.5$ MeV favorisieren [Ch 86, Ke 66].

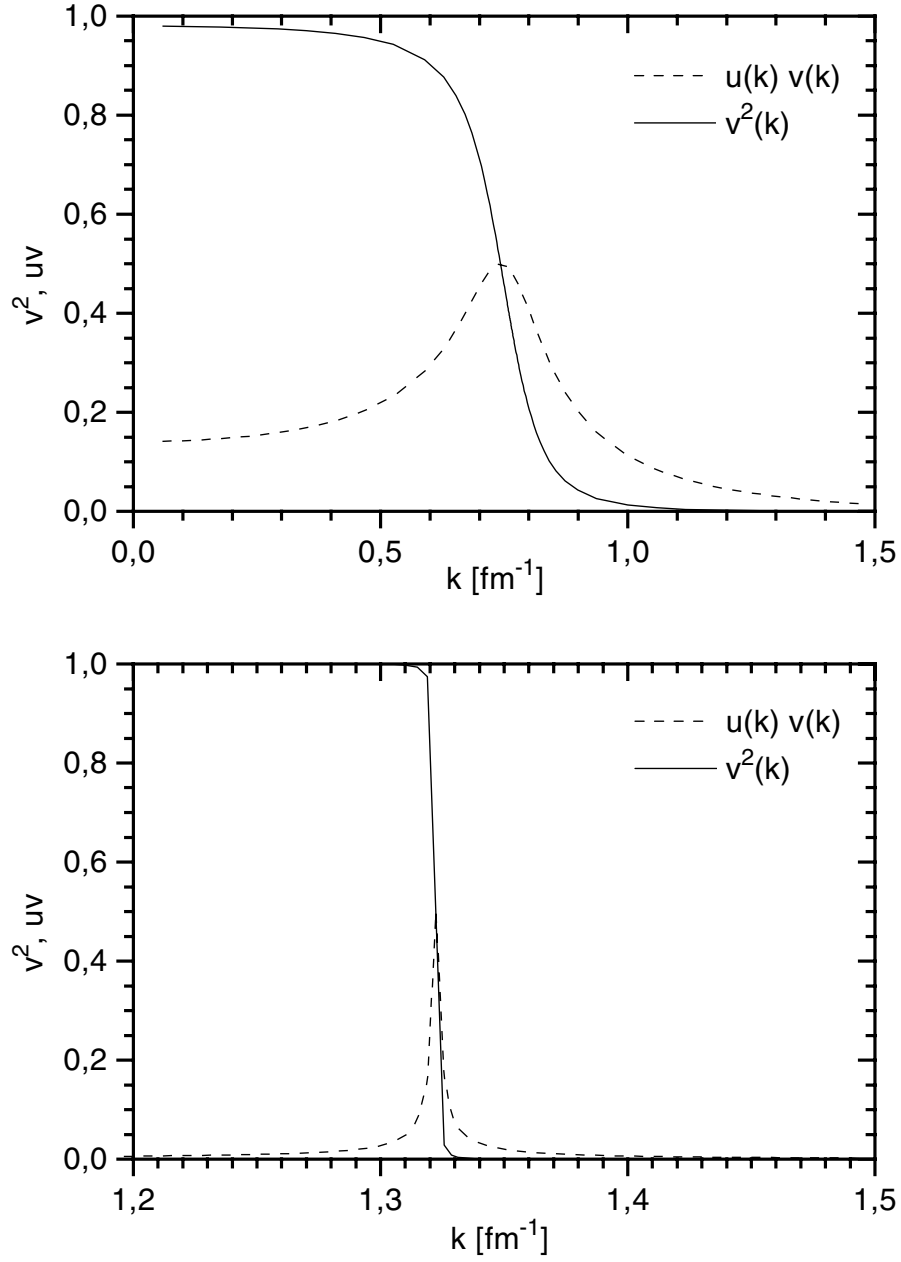


Abbildung 5.4: v^2 und uv in Abhängigkeit vom Teilchenimpuls k bei einer Kerndichte von $\rho(k_F = 0.76 \text{ fm}^{-1}) = 0.03 \text{ fm}^{-3}$ (oben) und $\rho(k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}) = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ (unten).

Kapitel 6

Die HF + BCS Gleichungen für endliche Kerne

In den vorherigen Kapiteln wurde die DDM3Y in Kernmaterie bezüglich ihrer Eigenschaften im Teilchen–Loch- und im Teilchen–Teilchen–Kanal untersucht. Der nächste Schritt ist nun, sie auf reale physikalische Systeme anzuwenden und zu überprüfen, ob sich mit Hilfe der in Kernmaterie bestimmten Eigenschaften auch endliche Systeme korrekt beschreiben lassen. Dazu muß die Hartree–Fock–Theorie zuerst für dichteabhängige Wechselwirkungen verallgemeinert werden.

In diesem Kapitel sollen die HF + BCS Gleichungen im Ortsraum hergeleitet werden. Es ist zwar numerisch vorteilhaft, daß Problem durch Diagonalisierung des Hamiltonoperators in einer beliebigen vollständigen Basis zu lösen, insbesondere weil dies auch die exakte Behandlung des Austauschterms für eine Wechselwirkung endlicher Reichweite vereinfacht. Für die Gogny–Kraft wurden diese Rechnungen etwa in einer harmonischen Oszillator Basis durchgeführt [DG 80] und so die gebundenen Zustände des Kerns bestimmt. Der Nachteil dieser Methode ist aber, daß die Beschreibung der Kontinuumszustände schlecht ist, selbst wenn eine sehr große Anzahl von Basiszuständen benutzt wird. Zur richtigen Behandlung von Kernen an der Neutronen- oder Protonen–Dripline ist allerdings die korrekte Beschreibung der Kontinuumszustände wichtig, da diese durch die Paarkraft an den Kern angekoppelt werden. Dadurch können ohne Paarkraft ungebundene Zustände gebunden werden oder ungebundene Zustände mit der Wahrscheinlichkeit v_k^2 besetzt sein. Dies erklärt, warum HFB bzw. HF+BCS Rechnungen für exotische Kerne im Ortsraum durchgeführt werden sollten. Da die Skyrme–Kraft durch ihre δ -Reichweite die Rechnungen dort extrem vereinfacht, wird sie in der Regel für diese Rechnungen verwendet [Do 84]. Das Problem ist jedoch, wie im letzten

Kapitel gezeigt wurde, daß gerade aufgrund dieser δ -Kraft im Paarungskanal ein unphysikalischer Cuttoff eingefügt werden muß, der es erlaubt, auf beliebige Weise die Größe des Gaps in Kernmaterie anzupassen. Dies trifft zwar so nicht mehr auf endliche Kerne zu, allerdings ist es wünschenswert, auch die Paarkraft durch eine realistische effektive Wechselwirkung endlicher Reichweite zu beschreiben. Deshalb soll nun versucht werden, eine Beschreibung zu finden, die es erlaubt, im Ortsraum sowohl den Austauschterm als auch die Paarkraft zuverlässig zu behandeln.

6.1 Kinetische und potentielle Energie

Die kinetische Energie eines Systems mit A Nukleonen ist nach (2.3) gegeben durch

$$T = \sum_{k \leq A} \langle k | \frac{p^2}{2m} | k \rangle = \int d^3r \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\vec{r}) = \int d^3r \frac{\hbar^2}{2m} \{ \tau_p(\vec{r}) + \tau_n(\vec{r}) \}. \quad (6.1)$$

Dabei ist die kinetische Energiedichte $\tau(\vec{r})$ definiert durch

$$\tau_q(\vec{r}) = \sum_{k, \sigma} \left| \vec{\nabla} \phi_k(\vec{r}, \sigma, q) \right|^2 \quad (6.2)$$

Für den Beitrag zur potentielle Energie vom Zentralpotential erhält man analog Gleichung (2.3):

$$\langle V_C \rangle = \left[\sum_{k_1 k_2} \langle k_1 k_2 | V | k_1 k_2 \rangle - \langle k_1 k_2 | V | k_2 k_1 \rangle \right] \quad (6.3)$$

Schreibt man nun die NN-Wechselwirkung wieder mit Hilfe der spingemittelten Wechselwirkung aus Anhang A.2 separat für die pp- und pn-Kanäle des Hartree- und des Fock-Terms auf und summiert über Spin, Isospin und alle besetzten Zustände k_1, k_2 , so erhält man mit $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

$$\begin{aligned} \langle V_C \rangle &= \langle V_{pp}^d \rangle + 2\langle V_{pn}^d \rangle + \langle V_{nn}^d \rangle + \langle V_{pp}^e \rangle + 2\langle V_{pn}^e \rangle + \langle V_{nn}^e \rangle \\ &= \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left\{ \rho_p(\vec{r}_1) \rho_p(\vec{r}_2) V_{pp}^d(r_{12}) + \right. \\ &\quad \left. 2\rho_p(\vec{r}_1) \rho_n(\vec{r}_2) V_{pn}^d(r_{12}) + \rho_n(\vec{r}_1) \rho_n(\vec{r}_2) V_{nn}^d(r_{12}) \right\} \\ &+ \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left\{ \rho_p^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{pp}^e(r_{12}) + \right. \\ &\quad \left. 2\rho_p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rho_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{pn}^e(r_{12}) + \rho_n^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{nn}^e(r_{12}) \right\} \\ &= \langle V_C^d \rangle + \langle V_C^e \rangle. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Die Dichtematrizen sind definiert durch

$$\rho_q(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{k, \sigma} \phi_k^*(\vec{r}_1, \sigma, q) \phi_k(\vec{r}_2, \sigma, q) \quad \text{und} \quad \rho_q(\vec{r}) = \rho_q(\vec{r}, \vec{r}). \quad (6.5)$$

Die Wechselwirkungen hängen nun, da die DDM3Y verwendet wird, von der Dichte ab. Mit (A.2), (4.14), (4.15) und (4.21) folgt sofort:

$$\begin{aligned} V_{pp}^d(r_{12}, \rho) &= g_0(\rho(\vec{r}_1)) V_0^e(r_{12}) g_0(\rho(\vec{r}_2)) + g_\tau(\rho(\vec{r}_1)) V_\tau^e(r_{12}) g_\tau(\rho(\vec{r}_2)) \\ V_{pn}^d(r_{12}, \rho) &= g_0(\rho(\vec{r}_1)) V_0^e(r_{12}) g_0(\rho(\vec{r}_2)) - g_\tau(\rho(\vec{r}_1)) V_\tau^e(r_{12}) g_\tau(\rho(\vec{r}_2)). \end{aligned}$$

Die Austauschwechselwirkungen erhält man auf die gleiche Weise.

6.2 Dichtematrixentwicklung des Austauschterms

Da die Variation des Austauschterms in (6.4), wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, zu einem gekoppelten System von Integrodifferentialgleichungen führen würde, die numerisch nur sehr aufwendig zu lösen sind, soll hier ein anderer Weg gewählt werden. Zuerst führt man in (6.4) die Koordinatentransformation $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$ und $\vec{s} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ durch. Analog zu dem Verfahren von Negele und Vautherin [NV 72, NV 75] entwickelt man die Dichtematrix $\rho(\vec{R} + \vec{s}/2, \vec{R} - \vec{s}/2)$ bezüglich der Schwerpunkts- und Relativkoordinaten $\vec{R}$ und $\vec{s}$ und mittelt über den Raumwinkel. Dies wird in Anhang B ausführlich erläutert. Das Ergebnis für die winkelmittelte Dichtematrix (DME) lautet:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} \left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2} \right) &= \rho_{SL}(sk_F) \rho(\vec{R}) \\ &+ \frac{35}{2sk_F^3} j_3(sk_F) \left[\frac{1}{4} \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{R}) - \tau(\vec{R}) + \frac{3}{5} k_F^2 \rho(\vec{R}) \right] \end{aligned} \quad (6.6)$$

Die Güte dieser Entwicklung hängt nun entscheidend vom Entwicklungsparameter k_F ab. Die einfachste Wahl ist der Fermi-Impuls des Thomas-Fermi-Modells $k_F = (3/2\pi^2\rho)^{1/3}$. Damit entspricht der Term in (6.6), der proportional der Slater-Dichte ist, der Dichtematrix in Kernmaterie, während der Term proportional j_3 die Korrekturen beschreibt, die von der Oberfläche des Kernes stammen. Dieser Term muß zusätzlich in den Rechnungen berücksichtigt werden, um so eine verbesserte Beschreibung des Austauschterms zu erhalten. Der oben angegebene Fermi-Impuls wurde von Negele und Vautherin [NV 72] für ihre Rechnungen gewählt. Hier soll jedoch eine andere Wahl getroffen werden.

Da nicht anzunehmen ist, daß sich der Fermi-Impuls eines Nukleons für oberflächenbehaftete endliche Systeme genauso verhält wie in Kernmaterie, erscheint es sinnvoll, die Oberflächenkorrekturen direkt in seiner Definition zu berücksichtigen. Eine natürliche Wahl für diesen *modifizierten* Fermi-Impuls ist

$$k_F^2(\vec{R}) = \frac{5}{3} \frac{\tau(\vec{R}) - \frac{1}{4} \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{R})}{\rho(\vec{R})}. \quad (6.7)$$

Durch diese Wahl verschwindet der zweite Term der DME exakt und (6.6) vereinfacht sich zur wohlbekannten Slater-Approximation des Austauschterms, jetzt jedoch mit einem modifizierten Fermi-Impuls:

$$\hat{\rho} \left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2} \right) = \rho_{SL}(sk_F) \rho(\vec{R}) \quad (6.8)$$

Anders ausgedrückt kann man auch sagen, daß k_F die Oberflächenkorrekturen bis zur ersten Ordnung beinhaltet. Diese Wahl des Fermi-Impulses bringt den Vorteil, daß sich die Beschreibung des Austauschterms vereinfacht da dieser nun genauso wie in den Rechnungen für Kernmaterie behandelt werden kann.

Die Wahl von k_F wird auch durch die Tatsache gerechtfertigt, daß sich k_F in Kernmaterie zum normalen Fermi-Impuls des Thomas-Fermi-Modells reduziert, da dort $\vec{\nabla}^2 \rho = 0$ ist.

Entscheidend ist jedoch, daß die Dichtematrixentwicklung die Relativkoordinate von der Dichte separiert, so daß $\vec{s}$ ausintegriert werden kann. Dies erlaubt es, eine Austauschwechselwirkung endlicher Reichweite (was bei der M3Y durch die Yukawaabhängigkeit der Fall ist) durch eine effektive δ -Wechselwirkung zu ersetzen, deren Stärke vom Fermi-Impuls am Ort der Wechselwirkung abhängt:

$$V^e(s) \rightarrow \delta^3(\vec{s}) \tilde{V}^e(k_F(\vec{R})) \quad (6.9)$$

mit

$$\tilde{V}^e(k_F(\vec{R})) = \int d^3s V^e(s) \rho_{SL}^2(sk_F(\vec{R})) \quad (6.10)$$

Man sieht dies sofort durch Einsetzen beider Seiten von (6.9) und (6.8) in ein Integral der Form

$$\langle V^e \rangle = \int d^3R \int d^3s \rho^2(\vec{R} + \vec{s}/2, \vec{R} - \vec{s}/2) V^e(s). \quad (6.11)$$

Zur Berechnung des Austauschtermes in (6.4) wäre es nun eigentlich notwendig, auch die dichteabhängigen Funktionen $g_0(\rho(\vec{R} \pm \vec{s}/2))$ und $g_\tau(\rho(\vec{R} \pm \vec{s}/2))$ in $V_{pp/pn}^e(s, \rho)$ um $\vec{R}$ zu entwickeln. In erster Näherung kann man jedoch $\rho(\vec{R} \pm \vec{s}/2)$ durch $\rho(\vec{R})$ ersetzen, da anzunehmen ist, daß der daraus entstandene Fehler klein ist im Vergleich zum Fehler aus der Entwicklung der Dichtematrix. Diese Näherung ist insbesondere gut, wenn $\vec{\nabla}g(\rho(\vec{R}))$ klein ist. Man erhält

$$\begin{aligned} V_{pp}^e(s, \rho) &= g_0^2(\rho(\vec{R}))V_0^e(s) + g_\tau^2(\rho(\vec{R}))V_\tau^e(s) \\ V_{pn}^e(s, \rho) &= g_0^2(\rho(\vec{R}))V_0^e(s) - g_\tau^2(\rho(\vec{R}))V_\tau^e(s). \end{aligned}$$

Der Austauschterm in (6.4) vereinfacht sich so zu

$$\begin{aligned} \langle V_C^e \rangle &= \int d^3R \left\{ \rho_p^2(\vec{R})\tilde{V}_{pp}^e(\vec{R}) + \right. \\ &\quad \left. 2\rho_p(\vec{R})\rho_n(\vec{R})\tilde{V}_{pn}^e(\vec{R}) + \rho_n^2(\vec{R})\tilde{V}_{nn}^e(\vec{R}) \right\}, \end{aligned} \quad (6.12)$$

wobei die Stärken der Wechselwirkungen zum Beispiel durch

$$\tilde{V}_{pn}^e(k_p^2, k_n^2, \rho; \vec{R}) = \int d^3s V_{pn}^e(s, \rho) \rho_{SL}(sk_p(\vec{R})) \rho_{SL}(sk_n(\vec{R})) \quad (6.13)$$

gegeben sind.

6.3 Variation des Energiefunktional

Um die Hartree-Fock Gleichungen im Ortsraum herzuleiten, muß die Grundzustandsenergie minimiert werden. Dazu schreibt man diese zuerst als ein Integral über die Energiedichte:

$$E_{HF} = T + \frac{1}{2} \langle V \rangle = \int d^3R H(\vec{R}), \quad (6.14)$$

Durch Vergleich mit den Gleichungen aus Abschnitt 6.1 und 6.2 erhält man

$$H_T(\vec{R}) = \frac{\hbar^2}{2m} [\tau_p(\vec{R}) + \tau_n(\vec{R})] \quad (6.15)$$

$$H_{V_C^d}(\vec{R}) = H_{V_C^d}^{pp}(\vec{R}) + H_{V_C^d}^{pn}(\vec{R}) + H_{V_C^d}^{np}(\vec{R}) + H_{V_C^d}^{nn}(\vec{R}) \quad (6.16)$$

$$H_{V_C^e}(\vec{R}) = H_{V_C^e}^{pp}(\vec{R}) + H_{V_C^e}^{pn}(\vec{R}) + H_{V_C^e}^{np}(\vec{R}) + H_{V_C^e}^{nn}(\vec{R}),$$

wobei die Abkürzungen definiert sind durch zum Beispiel

$$H_{V_C^e}^{pn}(\vec{R}) = \frac{1}{2} \rho_p(\vec{R}) \rho_n(\vec{R}) \tilde{V}_{pn}^e(k_p^2, k_n^2, \rho; \vec{R}) \quad (6.17)$$

$$H_{V_C^d}^{pn}(\vec{R}) = \frac{1}{2} \rho_p(\vec{R}) U_{pn}^d(\vec{R}, \rho(\vec{R})). \quad (6.18)$$

U_{pn}^d ist durch ein Faltungsintegral gegeben:

$$\begin{aligned} U_{pn}^d(\vec{R}, \rho(\vec{R})) &= \int d^3x \rho_n(\vec{x}) V_{pn}^d(|\vec{R} - \vec{x}|, \rho) \\ &= g_0(\rho(\vec{R})) \int d^3x \rho_n(\vec{x}) g_0(\rho(\vec{x})) V_0^d(|\vec{R} - \vec{x}|) \\ &\quad - g_\tau(\rho(\vec{R})) \int d^3x \rho_n(\vec{x}) g_\tau(\rho(\vec{x})) V_\tau^d(|\vec{R} - \vec{x}|) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Die Bestimmung der HF-Gleichungen für die Einteilchenwellenfunktionen erfolgt normalerweise durch Variation bezüglich der ϕ_k^* . In unserem Fall jedoch ist die Gesamtenergie kein einfaches Funktional der Dichte bzw. der ϕ_k mehr, da – im Gegensatz zur einfachen Slaterapproximation – der eingeführte effektive Fermi-Impuls k_F in nichtlinearer Form von der Dichte ρ , der kinetischen Energiedichte τ und Termen $\vec{\nabla}^2 \rho$, in denen der Laplaceoperator auf die Dichte wirkt, abhängt. Durch die spezielle Wahl des Fermi-Impulses haben sich zwar die Gleichungen für die Gesamtenergie des Systems vereinfacht, dies wird allerdings durch das Hinzukommen zusätzlicher Rearrangementterme in den HF-Gleichungen erkaufte. Die Rearrangementterme haben ihren Ursprung in der Dichteabhängigkeit der Wechselwirkung und sind eine direkte Folge der korrekten Variation bezüglich der Dichte [Kö 75, Ne 82]. Da sie erst durch die Variation entstehen, beeinflussen sie Gesamtenergie des Systems nicht. Ihre Berücksichtigung in den HF-Gleichungen macht sich aber direkt in den Einteilcheneigenschaften (Wellenfunktionen, Bindungsenergien) bemerkbar.

Die HF-Gleichungen erhält man, indem man ρ , τ und $\vec{\nabla}^2 \rho$ in der Energiedichte durch die ϕ_k und deren Ableitungen ausdrückt und E_{HF} analog Gleichung (2.7) variiert:

$$\int d^3R \delta \left(H(\vec{R}) - \sum_k |\phi_k(\vec{R})|^2 \epsilon_k \right) = 0 \quad (6.20)$$

Zur genaueren Ausführung dieser etwas längeren Rechnung wird auf Anhang C verwiesen. Das Ergebnis für die Variation bezüglich einer Protonenwellenfunktion lautet:

$$\left\{ -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m_p^*(\vec{R})} \vec{\nabla} + U_p^{HF}(\vec{R}) + U_p^R(\vec{R}) \right\} \phi_k(\vec{R}) = \epsilon_k \phi_k(\vec{R}) \quad (6.21)$$

Das reguläre Hartree–Fock–Potential ist gegeben durch

$$U_p^{HF}(\vec{R}) = [U_{pp}^d(\vec{R}) + U_{pn}^d(\vec{R})] + [\rho_p(\vec{R})\tilde{V}_{pp}^e(\vec{R}) + \rho_n(\vec{R})\tilde{V}_{pn}^e(\vec{R})] \quad (6.22)$$

und die effektive Masse durch

$$m_p^*(\vec{R}) = \frac{m}{1 + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{5}{6} \left[\rho_p \frac{\partial \tilde{V}_{pp}^e}{\partial k_p^2} + 2\rho_n \frac{\partial \tilde{V}_{pn}^e}{\partial k_p^2} \right]} \quad (6.23)$$

Die effektive Masse hat ihren Ursprung in der Abhängigkeit des Fermi–Impulses im Austauschterm von der kinetischen Energiedichte τ . Die Variation bezüglich der dichteabhängigen Funktionen $g_0(\rho)$ und $g_\tau(\rho)$ und die Variation bezüglich des Fermi–Impulses führt zu dem zusätzlichen Rearrangementpotential:

$$\begin{aligned} U_p^R(\vec{R}) = & \left[\frac{\partial (H_{V_C^d} + H_{V_C^e})}{\partial g_0} \frac{\partial g_0}{\partial \rho} + \frac{\partial (H_{V_C^d} + H_{V_C^e})}{\partial g_\tau} \frac{\partial g_\tau}{\partial \rho} \right] \\ & - \frac{1}{2} k_p^2 \left[\rho_p \frac{\partial \tilde{V}_{pp}^e}{\partial k_p^2} + 2\rho_n \frac{\partial \tilde{V}_{pn}^e}{\partial k_p^2} \right] \\ & - \frac{5}{24} \vec{\nabla}^2 \left[\rho_p \frac{\partial \tilde{V}_{pp}^e}{\partial k_p^2} + 2\rho_n \frac{\partial \tilde{V}_{pn}^e}{\partial k_p^2} \right] \end{aligned} \quad (6.24)$$

Hervorzuheben ist, daß durch die Wahl des Fermi–Impulses in Gleichung (6.7) die Impulsabhängigkeit der Wechselwirkung berücksichtigt wird, ohne daß ein neuer Parameter eingeführt werden mußte. Diese Impulsabhängigkeit ist eine direkte Folge der τ –Abhängigkeit des modifizierten Fermi–Impulses. In den HF–Gleichungen wird die Impulsstruktur der Wechselwirkung durch die oben angegebene effektive Masse beschrieben.

Die HF–Gleichungen für Neutronen erhält man durch Vertauschen der Indizes $p \leftrightarrow n$. Die Gleichungen (6.21) entkoppeln durch die Dichtematrixentwicklung des Austauschterms und können so separat für jeden einzelnen Zustand gelöst werden.

6.4 Die Einteilchenwellenfunktionen

Die HF-Gleichungen vereinfachen sich weiter, wenn man annimmt, daß der Kern abgeschlossene Schalen besitzt. In diesem Fall ist es möglich, die Einteilchenwellenfunktionen bezüglich den Orts- und Winkelkoordinaten zu separieren. Man macht dazu den Ansatz

$$\phi_k(\vec{r}, \sigma, \tau) = \varphi_\alpha(r) \Psi_{ljm}(\theta, \phi, \sigma) \chi_q(\tau), \quad (6.25)$$

mit

$$\varphi_\alpha(r) = \frac{R_\alpha(r)}{r} \quad (6.26)$$

und

$$\Psi_{ljm}(\theta, \phi, \sigma) = \sum_{m_l m_s} \langle l \frac{1}{2} m_l m_s | j m \rangle Y_{lm_l}(\theta, \phi) i^l \chi_{m_s}(\sigma) \quad (6.27)$$

Dabei sind

- q die Ladungs- bzw. Isospinquantenzahl
- n die Hauptquantenzahl
- l die Drehimpulsquantenzahl
- j die Gesamtdrehimpulsquantenzahl
- m die magnetische Quantenzahl.

Während der Index k für alle Quantenzahlen steht, ist der Index α eine Abkürzung für $\alpha = \{q, n, l, j\}$.

Mit diesem Ansatz lassen sich die Dichte $\rho(\vec{r})$ und die kinetische Energiedichte $\tau(\vec{r})$ stark vereinfachen, da aufgrund der geschlossenen Schalen über m summiert werden kann. Man findet, daß die Dichten sphärisch symmetrisch sind:

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) R_{\alpha}^2(r) \quad (6.28)$$

$$\tau(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) \left[\left(\frac{d\varphi_{\alpha}(r)}{dr} \right)^2 + \frac{l_{\alpha}(l_{\alpha} + 1)}{r^2} \varphi_{\alpha}^2(r) \right] \quad (6.29)$$

Die Potentiale hängen dadurch auch nur noch von r ab, so daß sich (6.21) mit $\vec{\nabla}^2 = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}$ zu einer gewöhnlichen Differentialgleichung zweiter Ordnung reduziert.

6.5 Die Spin-Orbit-Wechselwirkung

Im Gegensatz zu Kernmaterie muß für endliche Kerne auch die Zweiteilchen-Spin-Orbit-Wechselwirkung berücksichtigt werden, die für die Schalenstruktur maßgeblich ist. Die Spin-Orbit-Wechselwirkung ist gegeben durch

$$\begin{aligned} V_{LS} &= V_{LS}(r_{12}) \vec{L} \vec{S} \\ &= \frac{-i}{4} V_{LS}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times (\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2) (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \end{aligned}$$

und wird wie in [VB 72, NV 72] behandelt. $\vec{\sigma} = 2\vec{s}$ sind die Pauli-Spinmatrizen. Der Beitrag von V_{LS} zur potentiellen Energie ist gegeben durch [NV 72]

$$\begin{aligned} E_{SO} &= \int d^3R H_{SO}(\vec{R}) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3R \left\{ \varphi(0) \vec{\nabla} \rho(\vec{R}) \vec{J}(\vec{R}) + \right. \\ &\quad \left. \varphi[k_n(\vec{R})] \vec{\nabla} \rho_n(\vec{R}) \vec{J}_n(\vec{R}) + \varphi[k_p(\vec{R})] \vec{\nabla} \rho_p(\vec{R}) \vec{J}_p(\vec{R}) \right\} \end{aligned} \quad (6.30)$$

mit

$$\varphi(k) = -\frac{2\pi}{3} \int V_{LS}(s) j_0^2(sk) s^4 ds. \quad (6.31)$$

Dabei ist $\vec{J}(\vec{R})$ die Spindichte. Sie wird allgemein definiert durch

$$\vec{J}(\vec{R}) = (-i) \sum_{k, \sigma_1, \sigma_2, q} \phi_k^*(\vec{R}, \sigma_1, q) \left[\vec{\nabla} \phi_k(\vec{R}, \sigma_2, q) \times \langle \sigma_1 | \vec{\sigma} | \sigma_2 \rangle \right]. \quad (6.32)$$

Im Grenzfall einer kurzreichweitigen Wechselwirkung reduziert sich obige Formel zu

$$\varphi(k) \approx \varphi(0) = -\frac{2\pi}{3} \int V_{LS}(s) s^4 ds \equiv W_0 \quad (6.33)$$

Damit erhält man nach partieller Integration für die Energiedichte

$$H_{s.o.}(\vec{R}) = -\frac{1}{2} W_0 \left\{ \rho(\vec{R}) \vec{\nabla} \vec{J}(\vec{R}) + \rho_n(\vec{R}) \vec{\nabla} \vec{J}_n(\vec{R}) + \rho_p(\vec{R}) \vec{\nabla} \vec{J}_p(\vec{R}) \right\}.$$

Variert man die potentielle Energie bezüglich einer Protonenwellenfunktion, so erhält man zwei Terme. Der erste trägt zum Zentralpotential bei

$$V_p^{s.o.}(\vec{R}) = -\frac{1}{2} W_0 \left[\rho(\vec{R}) \vec{\nabla} \vec{J}(\vec{R}) + \rho_p(\vec{R}) \vec{\nabla} \vec{J}_p(\vec{R}) \right], \quad (6.34)$$

während der zweite das Einteilchen–Spin–Orbit–Potential bestimmt:

$$V_p^{\vec{l}\vec{s}}(\vec{R}) = \frac{1}{2}W_0 \left[\vec{\nabla}\rho(\vec{R}) (-i)(\vec{\nabla} \times \vec{\sigma}) + \vec{\nabla}\rho_p(\vec{R}) (-i)(\vec{\nabla} \times \vec{\sigma}) \right]. \quad (6.35)$$

Für geschlossene Schalen und mit dem in (6.25) angegebenen Ansatz für $\phi_k(\vec{R}, \sigma, q)$ reduziert sich die Formel für die Spindichte zu

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{R}) &= \frac{\vec{R}}{R} J(R) \\ &= \frac{1}{4\pi R^3} \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) \left[j_{\alpha}(j_{\alpha} + 1) - l_{\alpha}(l_{\alpha} + 1) - \frac{3}{4} \right] R_{\alpha}^2(R) \end{aligned} \quad (6.36)$$

Dadurch vereinfacht sich das Einteilchen–Spin–Orbit–Potential für sphärisch symmetrische Kerne zu der bekannten Thomas–Formel

$$V_p^{\vec{l}\vec{s}}(R) = \frac{1}{2}W_0 \frac{1}{R} \frac{d}{dR} [\rho(R) + \rho_p(R)] \vec{l} \vec{s}. \quad (6.37)$$

Es ist möglich den Koeffizienten W_0 für den Spin–Orbit–Term aus der vorliegenden Form der M3Y–Wechselwirkung direkt zu berechnen. Sie parametrisiert die Funktion $V_{LS}(r)$ durch eine Überlagerung zweier kurzreichweitiger Yukawa-Funktionen mit den Reichweiten 0.25 fm und 0.4 fm. Die Stärken der Yukawa-Funktionen in der vorliegenden Even–Odd–Parametrisierung kann man Tabelle 6.1 entnehmen [An 83].

Die Spin–Orbit–Wechselwirkung erhält man daraus mit Hilfe der Umrechnung $V_{LS} = \frac{1}{4} (3V^{LSO} + V^{LSE})$ [Be 77]. Mit diesen Werten berechnet man aus (6.33) den Koeffizienten $W_0 = 105 \text{ MeV fm}^5$.

Aus Gründen der Vergleichbarkeit mit Skyrme–Rechnungen wurde jedoch für die HF–Rechnungen der Wert $W_0 = 120 \text{ MeV fm}^5$ aus Referenz [VB 72] gewählt. Dieser Wert reproduziert für eine Skyrme–Wechselwirkung die experimentelle Spin–Orbit–Aufspaltung des Niveaus 1p von ^{16}O und stimmt auch mit dem Spin–Orbit–Potential einer Woods–Saxon–Parametrisierung des Einteilchenpotentials überein.

r_0	V^{LSE}	V^{LSO}
0.25 fm	-5101 MeV	-1897 MeV
0.40 fm	-337 MeV	-632 MeV

Tabelle 6.1: Koeffizienten der Spin–Orbit–Wechselwirkung

6.6 Die Coulomb-Wechselwirkung

Für Protonen muß zusätzlich noch die Coulombwechselwirkung $U_{Coul}(r) = \frac{e^2}{r^2}$ berücksichtigt werden. Aufgrund ihrer endlichen Reichweite ist der Beitrag des direkten Terms zur Gesamtenergie gegeben durch

$$E_{Coul}^d = \frac{1}{2} \iint d^3r_1 d^3r_2 \rho_p(\vec{r}_1) \rho_p(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (6.38)$$

Der Austauschterm könnte nun analog zu dem Beitrag vom Zentralpotential mit Hilfe der Dichtematrixentwicklung für $\rho_p(\vec{r}_1, \vec{r}_1)^2$ berechnet werden. Da dieser Beitrag jedoch relativ klein ist, wird er in der normalen Slaterapproximation berechnet. Dieser Term läßt sich analytisch vereinfachen und man erhält [NV 72]

$$E_{Coul}^e = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e^2 \int d^3r \rho_p(\vec{r})^{4/3}. \quad (6.39)$$

Variation bezüglich einer Protonenwellenfunktion führt zu einem Beitrag im Einteilchenpotential für Protonen der Größe

$$\begin{aligned} U_{Coul}(\vec{R}) &= U_{Coul}^d(\vec{R}) + U_{Coul}^e(\vec{R}) \\ &= \int d^3R_1 \rho_p(\vec{R}_1) \frac{e^2}{|\vec{R} - \vec{R}_1|} - \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e^2 \rho_p(\vec{R})^{1/3}. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Die dichteabhängige Näherung für den Austauschterm führt zu einem Beitrag zur Rearrangementenergie, der bei der Berechnung der Gesamtenergie des Systems beachtet werden muß.

$$E_{Coul}^R = \frac{1}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e^2 \int d^3R \rho_p(\vec{R})^{4/3}. \quad (6.41)$$

6.7 Die Paarungskraft

Die Behandlung der Paarkorrelationen erfolgt im HF + BCS Verfahren.

Man nimmt an, daß auch Kerne mit nichtabgeschlossenen Schalen sphärische Symmetrie zeigen. Dies ist eine direkte Folge der kurzreichweitigen Paarkraft, da diese die Nukleonen in zeitumgekehrten Zuständen aneinander streut und so über den gesamten Drehimpulsbereich m einer Schale gleichmäßig verteilt. Dadurch kann man den in Gleichung (6.25) gemachten Ansatz für die Wellenfunktionen beibehalten, jedoch müssen bei der Berechnung der Dichten die

Wellenfunktionen mit den Besetzungswahrscheinlichkeiten v_α^2 der einzelnen Zustände gewichtet werden.

Gleichung (6.28) verallgemeinert sich dadurch zu

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2 (2j_{\alpha} + 1) R_{\alpha}^2(r) \quad (6.42)$$

Die kinetische Dichte und die Spin–Orbit–Dichte werden auf die gleiche Weise modifiziert.

Die Berechnung der Paarmatrixelemente erfolgt in einer lokalen Impulsnäherung. Die Zeitumkehrung des Zustandes ϕ_k wird durch den Operator K ausgedrückt und wirkt nicht auf den Radialanteil der Wellenfunktion. Mit der in Gleichung (6.27) gegebenen Definition für Ψ_{ljm} erhält man:

$$K \Psi_{ljm} = (-)^{j+m} \Psi_{lj-m} = \Psi_{lj\bar{m}} \quad (6.43)$$

Die Wellenfunktion ϕ_k wird nun um die Schwerpunktskoordinate $\vec{R}$ der wechselwirkenden Teilchen entwickelt, indem im Translationsoperator der Gradient durch den lokalen Impuls ersetzt wird:

$$\phi_k(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}) = e^{\frac{\vec{s}}{2} \vec{\nabla}} \phi_k(\vec{R}) = e^{i \frac{\vec{s}}{2} \vec{k}_k(\vec{R})} \phi_k(\vec{R}) \quad (6.44)$$

Zeitumgekehrte Zustände besitzen entgegengesetzte Impulse, so daß:

$$K \phi_k(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}) = e^{-i \frac{\vec{s}}{2} \vec{k}_k(\vec{R})} \phi_{\bar{k}}(\vec{R}). \quad (6.45)$$

Für das Matrixelement erhält man in dieser Näherung

$$\begin{aligned} \langle k\bar{k} | V | k'\bar{k}' \rangle &= \int d^3 R \phi_k^*(\vec{R}) \phi_{\bar{k}}^*(\vec{R}) \phi_{k'}^*(\vec{R}) \phi_{\bar{k}'}^*(\vec{R}) \times \\ &\quad \int d^3 s V(s) e^{i \frac{\vec{s}}{2} (-\vec{k}_k(\vec{R}) - \vec{k}_{\bar{k}}(\vec{R}) + \vec{k}_{k'}(\vec{R}) + \vec{k}_{\bar{k}'}(\vec{R}))}. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Nach Integration und Mittelung über den Raumwinkel läßt sich das Integral über $d^3 s$ analog zu Kernmaterierechnungen auch als $\delta^3(\vec{s}) \tilde{V}^p(\vec{R})$ mit

$$\tilde{V}^p(\vec{R}) = \int d^3 s V(s) j_0(s k_k(\vec{R})) j_0(s k_{k'}(\vec{R})) \quad (6.47)$$

schreiben. Dieses Integral wird zustandsunabhängig, wenn man den Impulsübertrag durch den Fermi–Impuls der Nukleonen ersetzt oder über die

Fermi–Kugel mittelt. Man erhält dann eine Paarkraft mit der dichte- bzw. ortsabhängigen Stärke

$$\tilde{V}^p(k_F(R)) = \int d^3s V(s) j_0^2(sk_F(R)) \quad (6.48)$$

oder

$$\tilde{V}^p(k_F(R)) = \left(\frac{1}{\frac{4\pi}{3} k_F^3} \right)^2 \int d^3s V(s) \rho_{SL}^2(sk_F(R)). \quad (6.49)$$

Zu beachten ist, daß für diese Rechnung keine speziellen Anforderungen an den Fermi–Impuls gestellt wurden. Zur Berechnung des Integrals kann deshalb auch der modifizierte Fermi–Impuls aus (6.7) benutzt werden, um so die Oberflächeneffekte besser zu beschreiben.

Für die Paarkraft wird angenommen, daß sie zwei Nukleonen zum Gesamtdrehimpuls $J = 0$ koppelt und deshalb, wie schon erwähnt wurde, durch den Singlett-Even-Kanal gegeben ist, der gerade durch den Projektionsoperator P_{SE} auf diesen Zustand projiziert. Betrachtet man nur den Winkelanteil der Wellenfunktion, so ergibt sich für die Kopplung zweier Zustände

$$\begin{aligned} P_{SE} [\Psi_{ljm} \Psi_{lj\bar{m}}] &= (-)^{j+m} \sum_{JM} (jjm - m | JM) P_{SE} [\Psi_{ljm} \Psi_{lj-m}]_{JM} \quad (6.50) \\ &= (-)^{j+m} (jjm - m | 00) [\Psi_{ljm} \Psi_{lj-m}]_{00} \\ &= (-)^{j+m} \frac{(-)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} [\Psi_{ljm} \Psi_{lj-m}]_{00}. \end{aligned}$$

Dies erlaubt die einfache Berechnung der Paarmatrixelemente. Man erhält

$$\begin{aligned} V_{\alpha\alpha'}^p &= \langle k\bar{k} | V_{SE} P_{SE} | k'\bar{k}' \rangle \\ &= \frac{\int_0^\infty dr r^2 |\varphi_\alpha(r)|^2 |\varphi_{\alpha'}(r)|^2 \tilde{V}_{SE}(k_F(r))}{\sqrt{(2j_\alpha + 1)(2j_{\alpha'} + 1)}} \quad (6.51) \end{aligned}$$

Die BCS–Gleichungen lauten dann

$$N_q = \sum_\alpha (2j_\alpha + 1) v_\alpha^2 \quad (6.52)$$

$$\epsilon_\alpha = \epsilon_\alpha^0 + V_{\alpha\alpha}^p v_\alpha^2 \quad (6.53)$$

$$\Delta_\alpha = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha'} (2j_{\alpha'} + 1) V_{\alpha\alpha'}^p u_{\alpha'} v_\alpha \quad (6.54)$$

mit

$$v_{\alpha}^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\epsilon_{\alpha} - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_{\alpha} - \lambda)^2 + \Delta_{\alpha}^2}} \right\} \quad u_{\alpha}^2 + v_{\alpha}^2 = 1. \quad (6.55)$$

N_q steht für die Anzahl der Protonen bzw. Neutronen im Kern, ϵ_{α}^0 steht für die zu dem entsprechenden Quantenzahlen n , j und l gehörenden HF-Einteilchenenergien.

Kapitel 7

Ergebnisse

Nachdem in dem vorangegangenen Kapitel das Modell zur Behandlung endlicher Kerne in der HF+BCS-Näherung vorgestellt wurde, sollen abschließend die Ergebnisse dieser Rechnungen diskutiert werden. Es wurden Rechnungen für die doppelt magischen Kerne ^{208}Pb , ^{48}Ca , ^{40}Ca und ^{16}O durchgeführt, um die Qualität der dichteabhängigen M3Y-Wechselwirkung zu testen. Da es die Motivation dieser Arbeit ist, eine Wechselwirkung zu finden, die auch in der Lage ist, Kerne an den Protonen- bzw. Neutronenabbruchkanten zu beschreiben, wurden weiterhin Rechnungen für die Sauerstoffisotope bis zu $N = 26$ durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen sowie Ergebnissen aus Skyrme-Rechnungen verglichen.

7.1 Numerische Realisierung

Zuerst soll kurz die numerische Realisierung der Rechnungen beschrieben werden. Die Lösung der HF-Gleichungen ist ein selbstkonsistentes Problem, da zur Berechnung der mittleren Einteilchenpotentiale die Kenntnis der Einteilchenwellenfunktionen vorausgesetzt wird. Die Wahl einer realistischen Protonen- und Neutronendichteverteilung als Initialisierung ist daher entscheidend für die Konvergenz des gesamten Verfahrens.

Als Initialisierung wurde eine Woods-Saxon-Parametrisierung des Einteilchenpotentials der Form

$$V^{W.S.}(r) = -V_0 \left[1 + e^{\frac{r-R_0}{a}} \right]^{-1}$$

mit

$$R_0 = r_0 A^{1/3}, \quad V_0 = 51.5 \text{ MeV}, \quad a = 0.65 \text{ fm} \quad \text{und} \quad r_0 = 1.27 \text{ fm}$$

gewählt. Die Lösung der Schrödingergleichung für dieses Potential liefert die Einteilchenwellenfunktion, die zur Berechnung der Dichte, der kinetischen Energiedichte, der Spindichte und des modifizierten Fermi-Impulses aus (6.7) verwendet werden. Daraus lassen sich mit den in Kapitel 6 angegebenen Formeln die Hartree-Fock- und Rearrangementpotentiale sowie die effektive Masse berechnen.

Mit den berechneten Potentialen wird die Schrödingergleichung aus (6.21) gelöst, in der natürlich zusätzlich der Spin-Orbit- und der Coulombbeitrag aus den Abschnitten 6.5 und 6.6 berücksichtigt werden müssen. Mit den erhaltenen Einteilchenwellenfunktionen werden erneut die Dichteverteilungen, Fermi-Impulse und Potentiale berechnet und wieder (6.21) gelöst. Diese Iteration wiederholt sich, bis die relative Änderung der mittleren quadratischen Radien und der Bindungsenergie $\leq 10^{-3}$ ist. Bei Berücksichtigung von Paarkorrelationen erfolgt die Lösung der BCS-Gleichung nach der Lösung der Schrödingergleichungen, so daß mit den durch die Besetzungswahrscheinlichkeiten modifizierten Dichteverteilungen die Potentiale berechnet werden können.

Die Konvergenz der Rechnungen ist sehr gut, da die Woods-Saxon-Initialisierung realistische Dichteverteilungen liefert. In der Regel kann nach weniger als zehn Iterationen abgebrochen werden. Jedoch können einige numerische Probleme auftreten. Die Rearrangementpotentiale enthalten Ableitungen bezüglich des Fermi-Impulses sowie Terme, in denen der Laplace-Operator auf das Potential wirkt, der Fermi-Impulse enthält Terme, in denen der Laplace-Operator auf die Dichte wirkt. Dies kann bei nicht hinreichend glatten Potentialen und Dichteverteilungen zu numerischen Problemen führen, da Unstetigkeiten auftreten können, die sich im Laufe der Iteration verstärken, und muß mit besonderer Vorsicht behandelt werden. Aus diesen Grund werden die Dichteverteilungen über mehrere Iterationen gemittelt.

Auch der modifizierte Fermi-Impuls bedarf besonderer Vorsicht. Nach Formel (6.7) kann k_F^2 theoretisch negativ werden. Dies kann insbesondere in der Oberfläche des Kernes auftreten, da dort die Änderung der Dichte und damit $\vec{\nabla}^2 \rho$ groß sind und in der Größenordnung der kinetischen Energiedichte τ liegen. Für realistische gebundene Kerne ist dies kein Problem, da nach Abschluß der Rechnungen immer das Ergebnis $k_F^2 > 0$ gefunden wurde. Allerdings kann zu Beginn der Iteration, insbesondere wenn die Initialisierung nicht vorsichtig genug gewählt wurde, k_F komplex werden. Dies ist aber kein physikalisches Problem, da nach Gleichung (B.6) oder (B.8) die Dichtematrixentwicklung und damit auch das Einteilchenpotential eine gerade Funktion in k_F ist. So kann zum Beispiel $j_0(sk_F) = \frac{\sin(sk_F)}{sk_F}$ für ein komplexes k_F durch $i_0(sk_F) = \frac{\sinh(ik_F)}{ik_F}$ ausgedrückt werden. Dies führt jedoch zu einem expo-

nentiellen Anstieg des Potentials in der Oberfläche, der die Iteration zum Divergieren bringen kann und deshalb auch mit besonderer Vorsicht behandelt werden muß.

7.2 Doppelt magische Kerne

Nach dem im vorherigen Abschnitt beschriebenen Verfahren wurden nun Rechnungen für doppelt magische Kerne durchgeführt. Paarkorrelationen spielen hier keine Rolle, da die Paarkraft nicht stark genug ist, um die Energiedifferenz zwischen zwei abgeschlossenen Schalen zu überwinden. Die Rechnungen reduzieren sich damit zu einer einfachen dichteabhängigen Hartree-Fock-Rechnung. Es wurden nun Rechnungen für die Kerne ^{208}Pb , ^{48}Ca , ^{40}Ca und ^{16}O durchgeführt. Dabei wurden verschiedene Parametrisierungen der dichteabhängigen M3Y-Wechselwirkung untersucht. Als Funktion $g_0(\rho(\vec{r}))$ wurde Parametrisierung (b) aus Abschnitt 4.2 gewählt, da diese für $\rho \rightarrow 0$ eins wird und die DDM3Y in die unmodifizierte M3Y übergeht. Die Funktion $g_\tau(\rho(\vec{r}))$ wurde durch einen Wert von $a_S = 28$ MeV in unendlicher Kernmaterie festgelegt.

Es wurden nun verschiedene Parametrisierungen der Dichteabhängigkeit untersucht. Die Funktion $g_0(\rho(\vec{r}))$ wurde dabei an Kompressibilitäten von $K = 230$ MeV bzw. $K = 300$ MeV und Sättigungsdichten von $\rho_0 = 0.17\text{ fm}^{-3}$ bzw. $\rho_0 = 0.16\text{ fm}^{-3}$ der Zustandsgleichung unendlicher Kernmaterie angepaßt (siehe Kapitel 3). Abbildung 7.2 zeigt beispielhaft die Zusammensetzung des gesamten Einteilchenpotentials aus den Beiträgen des Hartree-Fock- und des Rearrangementpotentials. Es wurde ^{40}Ca gewählt, da für diesen Kern aufgrund gleicher Protonen- und Neutronenzahlen $U_0 \simeq U_p \simeq U_n$ ist. Man erkennt, daß die Wechselwirkung im Austauschpotential stark attraktiv ist, während der direkte Beitrag repulsiv ist. Das zum jeweiligen HF-Potential gehörende Rearrangementpotential besitzt dessen umgekehrtes Vorzeichen und führt so zu einer Abschwächung. Man erkennt, daß der Beitrag der Rearrangementterme insgesamt repulsiv ist.

Das mit der dichteabhängigen M3Y-Wechselwirkung berechnete Potential ist tiefer als das als Initialisierung benutzte Woods-Saxon-Potential. Hinzu kommt, daß in der Schrödingergleichung aufgrund der Impulsabhängigkeit des Potentials mit der um etwa 30% reduzierten effektiven Masse m^* gerechnet werden muß, so daß die untersten Einteilchenzustände wesentlich stärker gebunden sind als in einer Woods-Saxon-Rechnung. Abbildung 7.1 zeigt die relativen effektiven Massen m^*/m für die betrachteten Kerne. Im Kerninnern liegt der Wert bei $m^*/m = 0.65 - 0.70$ in sehr guter Übereinstimmung

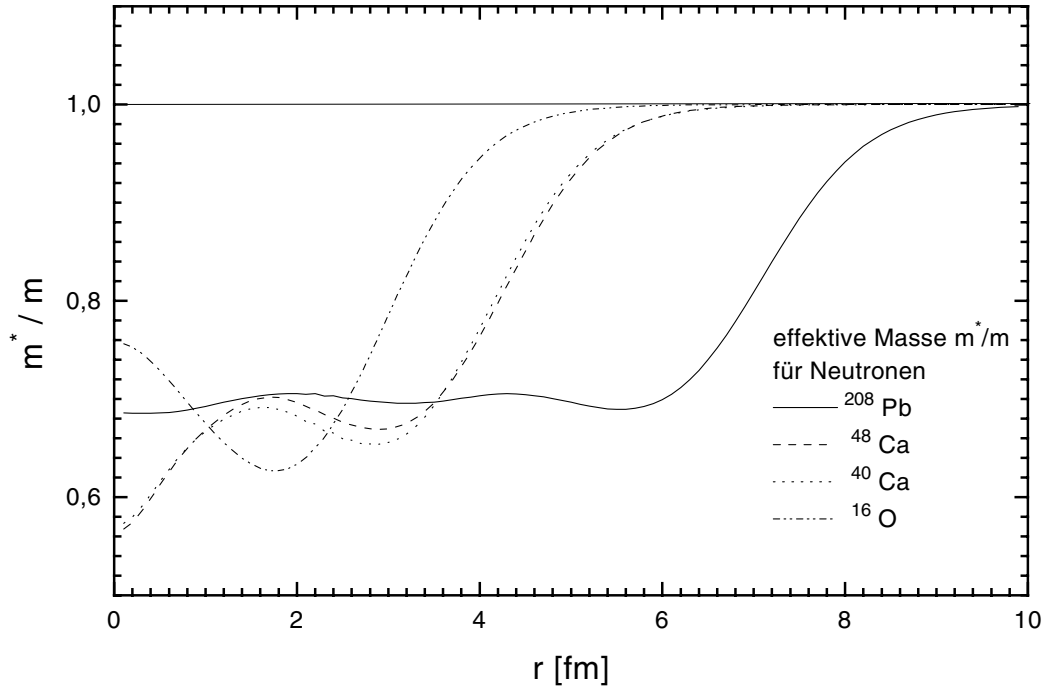


Abbildung 7.1: Effektive Masse m^*/m für Neutronen berechnet mit der DDM3Y, Parametrisierung mit $K = 230$ MeV und $\rho_0 = 0.17 fm^{-3}$.

mit den aus Proton–Kern–Streuung erhaltenen experimentellen Ergebnissen [MR 89]. Man sieht dies besonders gut für ^{208}Pb . Dies zeigt, daß die M3Y–Wechselwirkung eine realistische Impulsstruktur besitzt.

Abbildungen (7.3) bis (7.6) zeigen die aus den HF–Rechnungen erhaltenen Ladungsverteilungen im Vergleich mit den experimentellen Daten aus elastischer Elektronenstreuung [GP 74]. Zur Berechnung der Ladungsverteilungen wurde die theoretische Protonendichteverteilung mit einem Gaußformfaktor mit dem mittleren quadratischen Radius von $\sqrt{\langle r^2 \rangle_p} = 0.8 fm$ gefaltet, um dem Ladungsformfaktor der Protonen Rechnung zu tragen [VB 72].

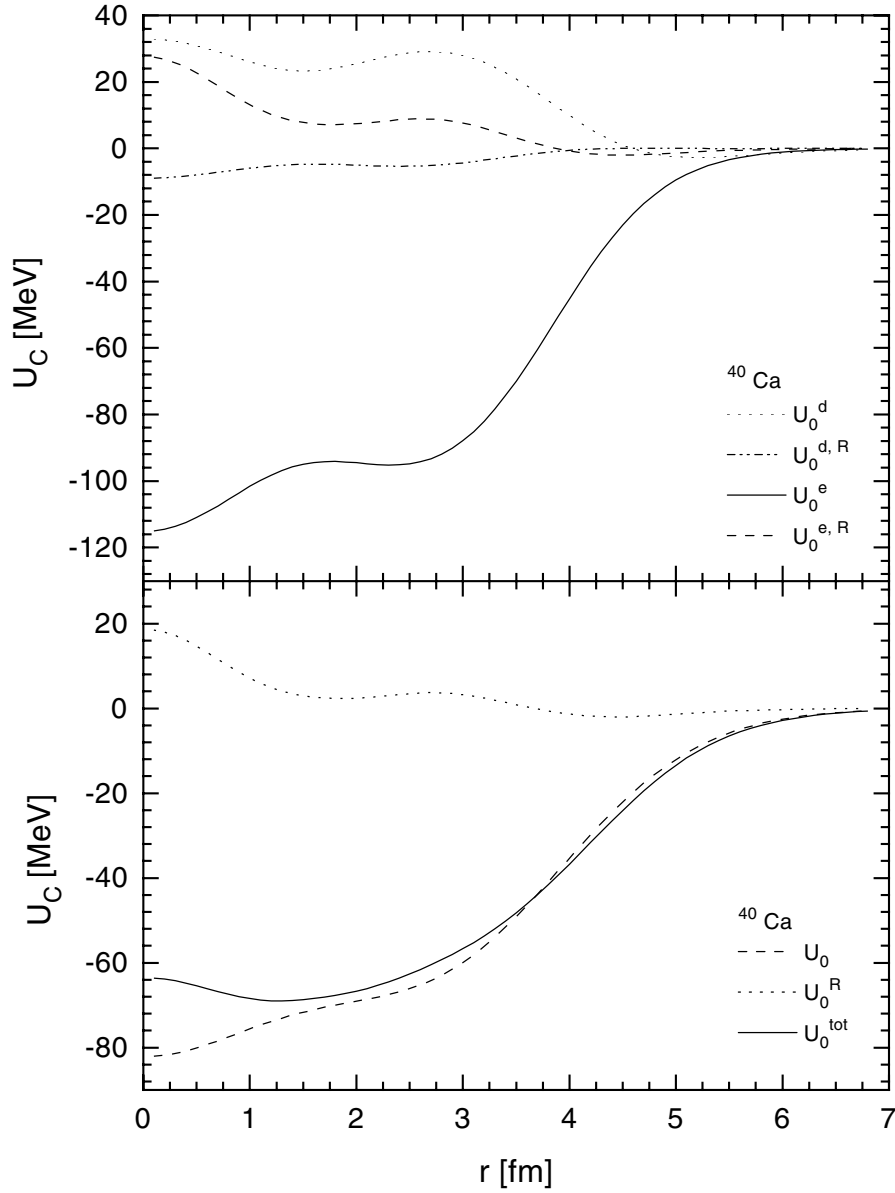


Abbildung 7.2: Mittleres Einteilchenpotential für ^{40}Ca . Beiträge vom direkten U_0^d und Austauschterm U_0^e des regulären HF-Potentials und des Rearrangementpotentials ($U_0^{d,R}$, $U_0^{e,R}$) zum isoskalaren Potential U_0^{tot} (oben). Vergleich des gesamten HF-Potentials (attraktiv) und des gesamten Rearrangementpotentials (repulsiv) (unten).

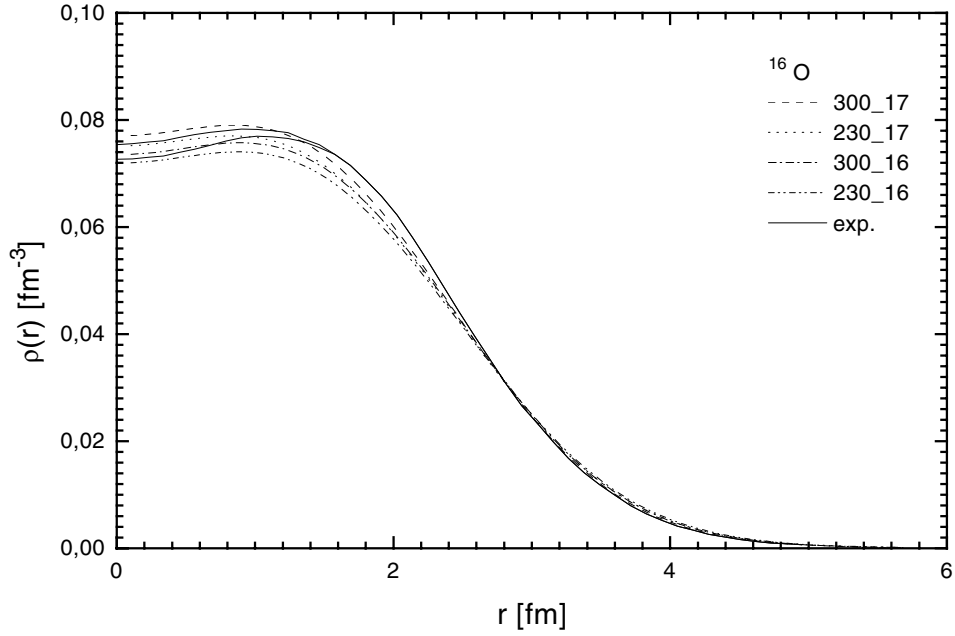


Abbildung 7.3: Ladungsverteilung von ^{16}O für verschiedene Parametrisierungen von $g_0(\rho)$

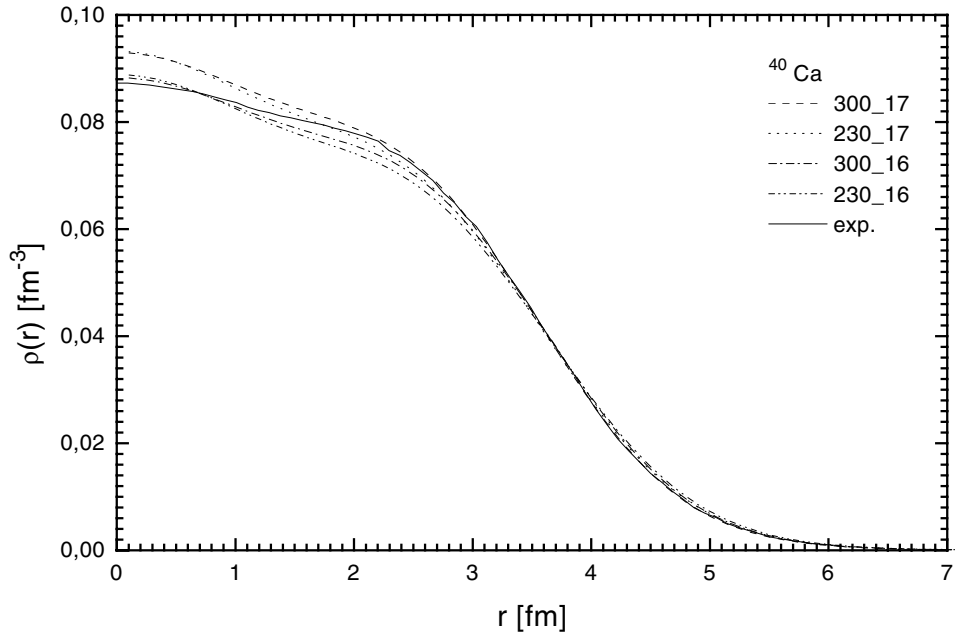


Abbildung 7.4: Ladungsverteilung von ^{40}Ca für verschiedene Parametrisierungen von $g_0(\rho)$. Die erste Zahl in der Legendenbeschriftung steht für die Kompressibilität, die zweite für die Sättigungsdichte in Kernmaterie der verwendeten Parametrisierung.

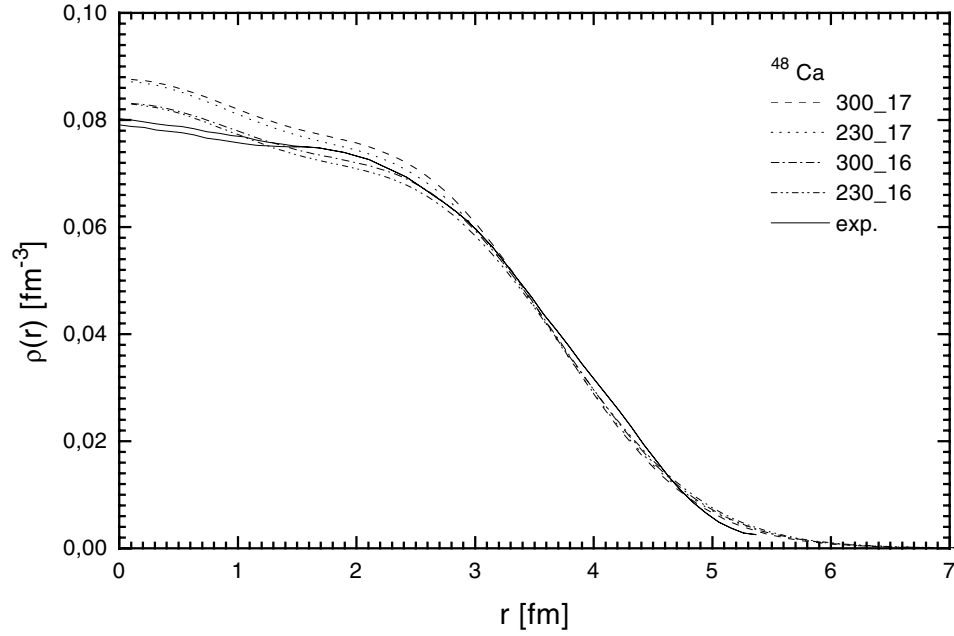


Abbildung 7.5: Ladungsverteilung von ^{48}Ca für verschiedene Parametrisierungen von $g_0(\rho)$

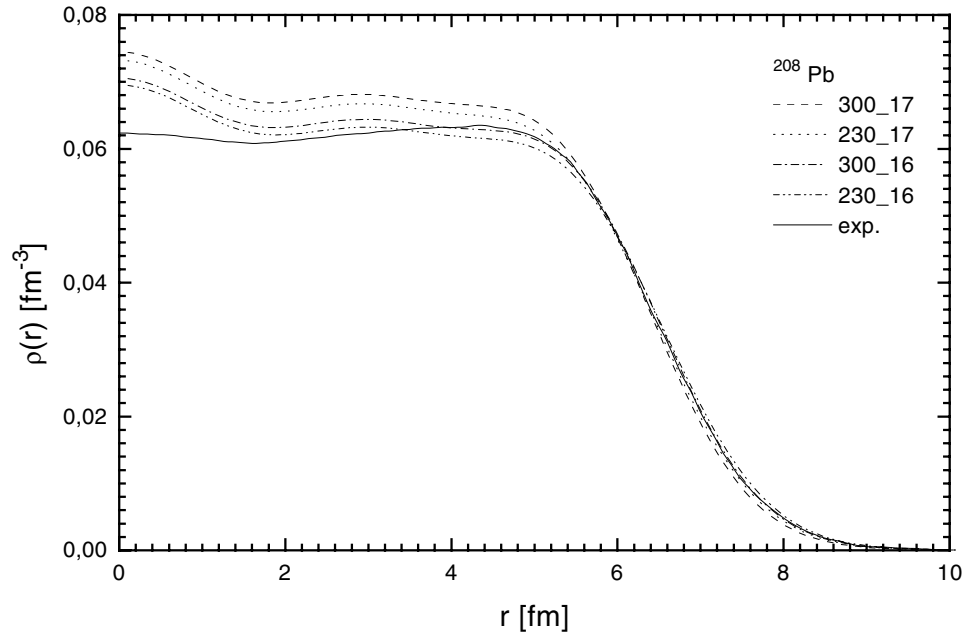


Abbildung 7.6: Ladungsverteilung von ^{208}Pb für verschiedene Parametrisierungen von $g_0(\rho)$

Man erkennt, daß die Ladungsdichte im Kerninnern überschätzt wird, während sie in der Oberfläche insbesondere für die Parametrisierungen mit Sättigungsdichte $\rho_0 = 0.16 fm^{-3}$ (300_16, 230_16) zu gering ist. Die allgemeine Übereinstimmung mit den experimentellen Daten ist jedoch sehr befriedigend, wenn auch die Diskrepanz in der Oberfläche für ^{16}O etwas zu groß ist. Insgesamt beschreibt die Parametrisierung mit $K = 230$ MeV und $\rho_0 = 0.17 fm^{-3}$ (230_17) die Daten am besten. Die Überschätzung der Dichte im Kerninnern ist auch aus Brückner–Hartree–Fock-Rechnungen wohlbekannt. Durch die Hinzunahme verschiedener Rearrangementbeiträge nähern sich diese Rechnungen systematisch der experimentellen Dichteverteilung an [Ne 82]. Das Endergebnis ist in guter Übereinstimmung mit dem hier erhaltenen Resultaten, die Rearrangementbeiträge aus der dichteabhängigen Vertexkorrektur enthalten. Das selbe Verhalten läßt sich auch in relativistischen dichteabhängigen HF-Rechnungen beobachten [FL 95]. Man erkennt die Systematik in dem Verhalten der unterschiedlichen Parametrisierungen: Eine geringere Sättigungsdichte in Kernmaterie führt auch zu einer Reduzierung der Ladungsdichte im Kerninnern. Eine größere Kompressibilität führt dagegen zu einer leichten Erhöhung der Dichte in der Oberfläche.

Tabelle 7.1 zeigt Ergebnisse für den zur jeweiligen Ladungsverteilung gehörenden mittleren quadratischen Radius ρ_C . Man erkennt hier die oben angesprochene Systematik. Die Ladungsradien nehmen für geringe Sättigungsdichten und Kompressibilitäten zu, da für diese die Protonen aus dem Kerninneren gedrückt werden. Die Abweichung von den experimentellen Daten (genommen aus [FL 95]) ist $\leq 2\%$ und damit erstaunlich gut. Dies erlaubt die Aussage, daß die hier vorliegende Form der M3Y–Wechselwirkung die Einteilcheneigenschaften von Kernen mit abgeschlossenen Schalen erfolgreich

	^{16}O	^{40}Ca	^{48}Ca	^{208}Pb
$K = 300 \quad \rho_0 = 0.17$	2.74	3.44	3.45	5.39
$K = 230 \quad \rho_0 = 0.17$	2.76	3.48	3.48	5.43
$K = 300 \quad \rho_0 = 0.16$	2.76	3.49	3.50	5.48
$K = 230 \quad \rho_0 = 0.16$	2.80	3.52	3.53	5.53
Experiment	2.73	3.49	3.47	5.50

Tabelle 7.1: Ladungsradien r_C [fm] für Kerne mit geschlossenen Schalen, berechnet mit verschiedenen Parametrisierungen der dichteabhängigen M3Y-Wechselwirkung

beschreiben kann.

Die gesamte Bindungsenergie E_B des Kerns kann man auf zwei Weisen berechnen. Eine Möglichkeit ist, nach (6.14) das Integral über die Energiedichte $E_B = \int d^3R H(\vec{R})$ auszurechnen. Eine weitere Möglichkeit ist, Gleichung (2.16) zu verwenden, da die Einteilchenenergien und -potentiale bekannt sind. Es ist jedoch zu beachten, daß die Einteilchenenergien Beiträge aus den Rearrangementpotentialen $U_{q=p,n}^R$ aus Gleichung (6.21) enthalten. Da die Rearrangementpotentiale ihren Ursprung in der Variation haben und nicht zur Gesamtenergie beitragen, muß die zugehörige Rearrangementenergie von der Gesamtenergie abgezogen werden. Analog muß die effektive Masse berücksichtigt werden, die aus dem impulsabhängigen Rearrangementpotential stammt. Man erhält nach Berücksichtigung aller Terme

$$E_B = \sum_{i=1}^A \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{q=p,n} \int d^3r \rho_q(r) U_q^{HF}(r) - \sum_{q=p,n} E_q^R, \quad (7.1)$$

wobei die Rearrangementenergie aus (6.21) und (6.23) berechnet wird:

$$E_q^R = \int d^3r \rho_q(r) U_q^R(r) + \int d^3r \tau_q(r) \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_q^*(r)} - \frac{1}{m} \right) \quad (7.2)$$

Die Rearrangementenergie ist insgesamt positiv und erhöht so die totale Grundzustandsenergie. Der erste Term in obiger Gleichung kompensiert auf diese Weise die Abschwächung des Einteilchenpotentials (Abbildung 7.2), während der zweite Term die effektive kinetische Energie verringert. Zu beachten ist, daß in U^{HF} und U^R die entsprechenden Beiträge vom Coulomb- bzw. Spin-Orbit-Potential berücksichtigt werden müssen. Die Grundzustandsenergie wurde auf die beiden beschriebenen Arten berechnet, und so als Test für die Numerik verwendet.

Tabelle 7.2 zeigt die Bindungsenergien pro Nukleon, die mit den verschiedenen Dichteparametrisierungen der M3Y erhalten wurden. Man erkennt, daß im Gegensatz zu den Ergebnissen für die Ladungsradien die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten (genommen aus [FL 95]) nicht sehr befriedigend ist. So fehlen je nach Parametrisierung 0.5 MeV – 1.5 MeV Bindungsenergie pro Nukleon. Mit abnehmender Sättigungsdichte und abnehmender Kompressibilität nehmen die Bindungsenergien um bis zu 0.6 MeV zu. Dies zeigt, daß diese sehr sensitiv auf Wahl der in Kernmaterie angefiteten Funktion $g_0(\rho)$ reagieren. Deshalb können Ergebnisse und Parametrisierungen aus unendlicher Kernmaterie nicht einfach auf endliche gebundene Kerne verallgemeinert werden.

	^{16}O	^{40}Ca	^{48}Ca	^{208}Pb
$K = 300 \quad \rho_0 = 0.17$	-6.30	-7.03	-7.33	-6.86
$K = 230 \quad \rho_0 = 0.17$	-6.69	-7.37	-7.62	-7.08
$K = 300 \quad \rho_0 = 0.16$	-6.56	-7.27	-7.54	-7.06
$K = 230 \quad \rho_0 = 0.16$	-6.94	-7.60	-7.82	-7.28
Experiment	-7.98	-8.55	-8.67	-7.86

Tabelle 7.2: Bindungsenergien pro Nukleon E_B/A [MeV] für Kerne mit geschlossenen Schalen, berechnet mit verschiedenen Parametrisierungen der dichteabhängigen M3Y-Wechselwirkung

Die beobachtete Systematik bei den Bindungsenergien stimmt mit der bei den Ladungsradien überein. Man erkennt, daß eine Vergrößerung des Ladungsradius zu einer Erhöhung der Bindungsenergie führt. Dieses Verhalten ist eine direkte Folge der unterschiedlichen Rearrangementterme der Parametrisierungen und wurde auch in vergleichbaren relativistischen Rechnungen beobachtet [FL 95].

Dies läßt sich in Abbildung 7.7 beobachten. Sie zeigt die Abhängigkeit der Bindungsenergie von der Ladungsdichte im Kerninnern. Die Abbildung beschreibt die Sättigungseigenschaften der berechneten Kerne und entspricht so im weiteren Sinne einer Zustandsgleichung für endliche Kerne. Insbesondere wenn man die Linien zweier Rechnungen mit gleicher Kompressibilität vergleicht, erkennt man daß für geringere Sättigungsdichten die Linien fast parallel zu größeren Bindungsenergien verschoben sind. Der qualitative Verlauf der Linien ist dem der experimentellen Daten sehr ähnlich, wenn man von dem zu ^{16}O gehörenden Datenpunkt absieht, dessen Bindungsenergie viel zu gering ist.

Bemerkenswert ist, daß die experimentellen Ladungsverteilungen und -radien in den Rechnungen sehr gut reproduziert werden, obwohl insgesamt die Kerne zu schwach gebunden sind. Man kann jedoch einfach verstehen, daß diese beiden Eigenschaften nicht sehr stark miteinander korreliert sein müssen. Während die Bindungsenergie eine globale Eigenschaft des Systems ist und sich aus der Summe aller Zweiteilchenwechselwirkungen ergibt, beschreiben Ladungsverteilungen und Einteilchenbindungsenergien die Eigenschaften einzelner Nukleonen und erlauben so direkte Rückschlüsse auf die Qualität des Mean-fields. Insbesondere werden letztere stark durch die Rearrangementterme, die keinen Einfluß auf die Gesamtenergie des Systems haben, beeinflusst.

Die Tatsache, daß trotz zu geringer Bindungsenergien das Mean-field gut beschrieben wird, zeigt wie wichtig es ist, in dichteabhängigen HF-Rechnungen Rearrangement zu berücksichtigen. Auch rechtfertigen die Ergebnisse für die Dichteverteilungen und die effektive Masse im Kerninnern die Wahl des modifizierten Fermi-Impulses aus (6.7) und der daraus resultierenden Rearrangementbeiträge zum Mean-field.

Die dichteabhängige M3Y-Wechselwirkung in der hier vorliegenden Form ist jedoch insgesamt zu schwach und führt deshalb zu einer Unterbindung der Nukleonen. Dies ist insofern erstaunlich, da ihre Stärke in Kernmaterie mit Hilfe der Eigenschaften der Zustandsgleichung angepaßt wurde und dort die Nukleonen nicht zu schwach gebunden waren. Die erhaltenen Ergebnisse zeigen jedoch, daß eine direkte Übertragung der Wechselwirkung aus Kernmaterie auf endliche Systeme nicht möglich ist. Es ist nicht offensichtlich, wo die Bindungsenergie verloren geht. Es ist jedoch anzunehmen, daß dies im Bereich der Oberfläche der Fall ist, da dort die theoretische Nukleonendichte geringer ist als die experimentelle. Bei der Skalierung der Wechselwirkung konnten Oberflächeneffekte nicht berücksichtigt werden, da diese in unendlicher Kernmaterie nicht vorhanden sind. Auch wurde die Wechselwirkung nur an den Sättigungspunkt angepaßt, dessen Dichte in etwa der Dichte im Innern endlicher Kerne entspricht. Über das Verhalten der Zustandsgleichung und der M3Y-Wechselwirkung bei geringen Dichten wurden aber keine Aussagen gemacht. Dieses Verhalten könnte jedoch gerade in der Oberfläche mit ihrer geringeren Dichte eine entscheidende Rolle spielen.

Eine weitere Möglichkeit zur Verbesserung der Bindungsenergien könnte die Berücksichtigung von Dreikörperkräften sein, die in der vorliegenden Form der DDM3Y nicht enthalten sind. Sowohl die Skyrme- als auch die Gogny-Wechselwirkungen berücksichtigen dies durch Einführung einer Dreiteilchenkontaktwechselwirkung bzw. parametrisieren diese durch einen zusätzlichen dichteabhängigen Term. Obwohl Dreikörperkräfte in endlichen Kernen als sehr schwach angenommen werden, könnte die Vernachlässigung dieser und anderer Beiträge höherer Ordnung (wie zum Beispiel Polarisationsdiagramme) zu einer nicht ausreichenden Beschreibung der Wechselwirkung in Kernmaterie führen. Dies könnte sich erst bei der Berechnung endlicher Kerne bemerkbar machen, da dort diese Beiträge geringer bzw. stärker sind.

Insgesamt ist die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten aber zufriedenstellend. Es muß betont werden, daß die Wechselwirkung im isoskalaren Kanal durch die dichteabhängige Funktion $g_0(\rho)$ nur drei Parameter besitzt, die in Kernmaterie bestimmt wurden. Sie wurden nicht durch einen Fit an Bindungsenergien endlicher Kerne bestimmt, wie dies bei der Skyrme- und der Gogny-Wechselwirkung der Fall ist. Insofern ist die Diskrepanz zwi-

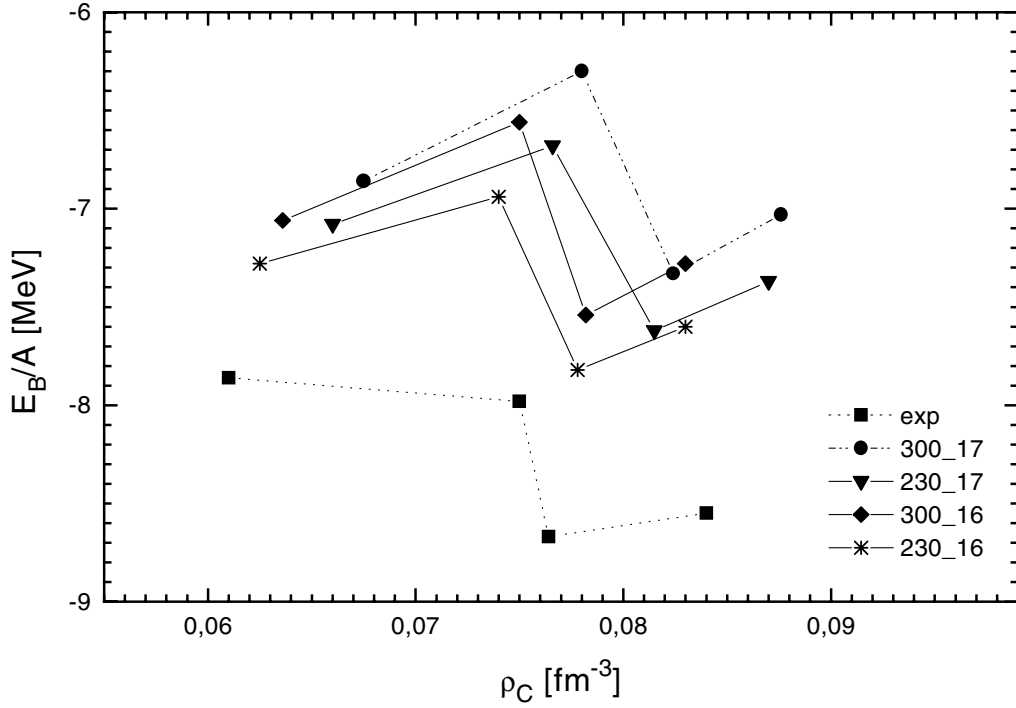


Abbildung 7.7: Die Zustandsgleichung für endliche Kerne: Abhängigkeit der Bindungsenergie pro Nukleon von der Ladungsdichte im Kerninnern für ^{208}Pb , ^{16}O , ^{48}Ca und ^{40}Ca

schen Experiment und Theorie erklärbar und gibt Anlaß zu der Hoffnung, daß durch eine aufwendigere Beschreibung der Dichteabhängigkeit von $g_0(\rho)$ die Ergebnisse noch verbessert werden können.

7.3 Exotische Kerne

Zum Test des isovektoriellen Kanals der DDM3Y-Wechselwirkung wurden die Sauerstoffisotope von ^{16}O bis ^{26}O berechnet. ^{16}O ist ein Kern mit gleicher Protonen- und Neutronenzahl und wegen dieser Isospinsymmetrie bis auf Coulombeffekte insensitiv bezüglich der Isektorwechselwirkung. Mit Zunahme der Neutronenzahl, also mit zunehmender Isospinasymmetrie, gewinnt die Isektorwechselwirkung jedoch an Bedeutung und führt zu Unterschieden in den Dichteverteilungen und Einteilchenenergien von Protonen und Neutronen. Mit zunehmenden Neutronenüberschuß erreicht man die

Neutronenabbruchkante, die sogenannte *dripline*, die den Bereich der stabilen Kerne abschließt. So sind die Neutronen im Isotop ^{24}O noch gebunden, während ^{25}O bzw. ^{26}O nicht mehr stabil sind [Nu 95]. Für dieses Verhalten ist die Isektorwechselwirkung von entscheidender Bedeutung, weil ihre Stärke über die Lage der Abbruchkante entscheidet. Auch Paarkorrelationen müssen nun berücksichtigt werden, da die Neutronenschalen für manche Isotope nicht mehr abgeschlossen sind.

Abbildung 7.8 zeigt die Dichteverteilungen der Neutronen in den unterschiedlichen Isotopen. Da für die Dichtematrixentwicklung des Austauschterms eine gerade Nukleonenzahl vorausgesetzt wurde, wurden auch nur Sauerstoffisotope mit gerader Neutronenzahl berechnet. Zur korrekten Beschreibung ungerader Kerne müßte die Dichtematrixentwicklung verallgemeinert werden. Für die Rechnungen in Abbildung 7.8 wurde die dichteabhängige M3Y-Wechselwirkung mit der Parametrisierung $K = 230 \text{ MeV}$ und $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$ gewählt, da diese bezüglich Ladungsradius und Bindungsenergie für ^{16}O im Mittel die besten Ergebnisse lieferte.

Da jedoch insgesamt die Bindungsenergie von ^{16}O zu gering ist, könnte dies möglicherweise die Aussagen über den isovektoriellen Anteil der Wechselwirkung und die Lage der Neutronenabbruchkante verfälschen, da die Einteilchenenergien und damit das chemische Potential λ zu gering sein könnten. Aus diesem Grund wurde die Stärke des isoskalaren Kanals der Wechselwirkung so skaliert, daß man die experimentelle Bindungsenergie von ^{16}O erhält. Dadurch sollten nur noch die Isektorwechselwirkung und die Paarkraft für die Eigenschaften der Isotope bestimmend sein. Man sieht Dichteverteilungen für die Rechnungen mit der skalierten Wechselwirkung in Abbildung 7.9.

Die Skalierung erfolgte durch Multiplikation der dichteabhängigen Funktion $g_0(\rho)$ mit einem konstanten Faktor g_0^s . Um eine Bindungsenergie für ^{16}O von $E_B/A = -7.96 \text{ MeV}$ zu erhalten, mußte der Wert $g_0^s = 1.0286$ gewählt werden. Dies entspricht einer allgemeinen Skalierung der Wechselwirkungsstärke im isoskalaren Kanal von $1.0286^2 = 1.058$. Die Stärke der Zweiteilchenwechselwirkung V_0 muß also um etwa 6% erhöht werden, damit man die experimentelle Bindungsenergie erhält. Dies ist natürlich nur eine grobe Abschätzung für eine zusätzliche Renormalisierung von V_0 . Da die Wechselwirkung dichteabhängig ist, erwartet man für andere Kerne auch einen anderen Wert für g_0^s . So würden zum Beispiel für $g_0^s = 1.0286$ die Kalziumisotope überbunden werden. Für eine realistische Skalierung von V_0 müßte deshalb $g_0(\rho)$ durch einen Fit an die Bindungsenergien von endlichen Kernen bestimmt werden.

Vergleicht man die beiden Abbildungen, so zeigen diese qualitativ das gleiche Verhalten: Mit zunehmender Neutronenzahl verschieben sich die Ladungs-

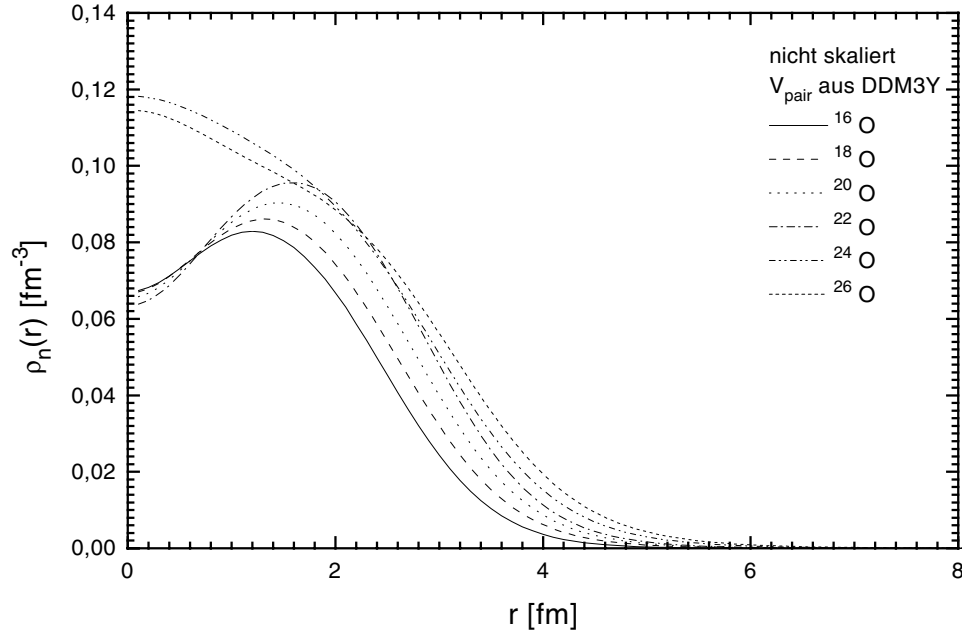


Abbildung 7.8: Neutronendichten der Sauerstoffisotope ^{16}O bis ^{26}O berechnet mit der DDM3Y, Parametrisierung mit $K = 230 \text{ MeV}$ und $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$

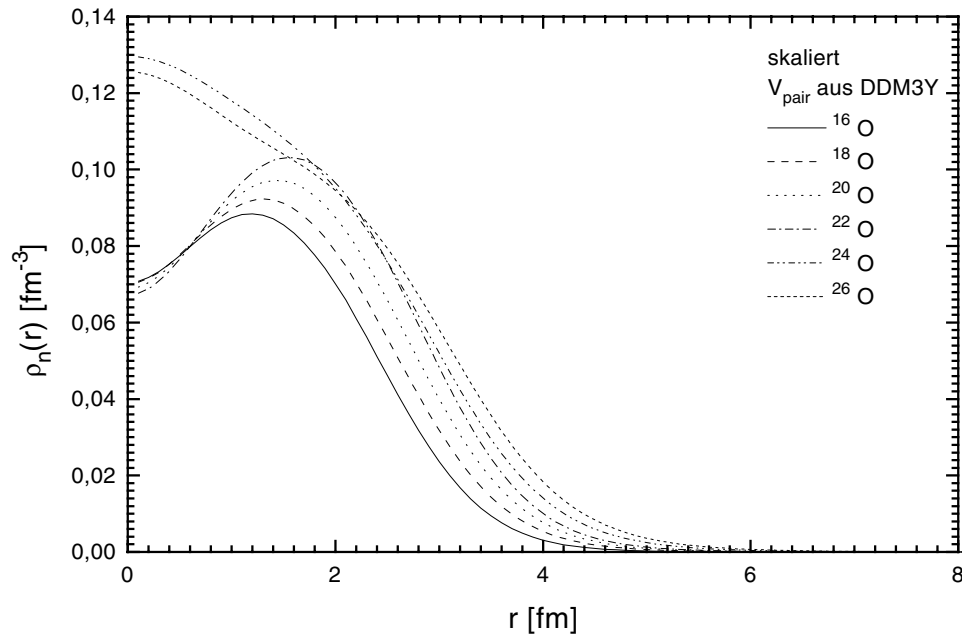


Abbildung 7.9: Neutronendichten der Sauerstoffisotope ^{16}O bis ^{26}O , isoskalärer Kanal V_0 auf Bindungsenergie von ^{16}O skaliert

verteilungen aus dem Kerninnern heraus, die Dichte in der Kernmitte bleibt jedoch fast konstant. Die veränderte Form der Dichteverteilungen für ^{24}O und ^{26}O folgt aus der Tatsache, daß in diesen Kernen der $2s_{1/2}$ Zustand besetzt ist, dessen Wellenfunktion im Ursprung ein Maximum besitzt. Man erkennt, daß die Skalierung der Wechselwirkung auf die experimentelle Bindungsenergie auch die Dichteverteilungen skaliert. So ist in Abbildung 7.9 die Dichte im Kerninnern gegenüber dem unskalierten Fall erhöht.

Allerdings beobachtet man in keinem der beiden Fälle eine Neutronenabbruchkante. Berücksichtigt man Paarkorrelationen, so erhält man aus der HF + BCS Rechnung für ^{26}O im unskalierten Fall ein chemisches Potential von $\lambda = -2.3$ MeV, im skalierten Fall von $\lambda = -3.4$ MeV. In beiden Fällen sind die Nukleonen also zu stark gebunden, die Einteilchenenergien nehmen zu große negative Werte an. Die Neutronenabbruchkante wird dann erreicht, wenn nicht mehr genug gebundene Zustände vorhanden sind, um alle Neutronen aufzunehmen, oder die Neutronen durch die Paarkraft teilweise in die Kontinuumszustände gestreut werden. Das chemische Potential λ , das angibt bis zu welcher Energie Zustände besetzt sind, wird positiv. In keinem der beiden Fälle zeigen die Rechnungen dieses Verhalten. Da die Einteilchenenergien für ^{16}O gut mit den experimentellen Daten übereinstimmen, läßt sich daraus schließen, daß die Wechselwirkung im isovektoriellen Kanal zu schwach und nicht in der Lage ist, die Neutroneneinteilchenenergien genügend zum Kontinuum zu verschieben.

Um abzuschätzen, um welchen Faktor die Isektorwechselwirkung zu schwach ist, wurde analog zum isoskalaren Fall die dichteabhängige Funktion $g_\tau(\rho)$ mit einem konstanten Faktor g_τ^s skaliert. g_τ^s wurde so gewählt, daß die experimentelle Neutronenabbruchkante getroffen wurde, λ also für ^{24}O noch negativ, für ^{26}O aber positiv wird. Man findet, daß $g_\tau^s = 1.414$ ist, die Isektorwechselwirkung V_τ ist also insgesamt etwa um den Faktor 2 zu schwach.

Abbildung 7.10 zeigt die Dichteverteilungen, die man mit der im isovektoriellen Kanal skalierten Wechselwirkung erhält. Die chemischen Potentiale für ^{24}O bzw. ^{26}O sind $\lambda = -1.1$ MeV bzw. $\lambda = +0.3$ MeV. Im Vergleich zu Abbildungen 7.8 und 7.9 erkennt man, daß die Neutronendichten nun auch im Kerninnern mit steigender Neutronenzahl zunehmen und insbesondere für ^{24}O bzw. ^{26}O weiter ausgedehnt sind.

Das Verfehlen der Neutronenabbruchkante ist allerdings ein generelles Problem bei den gängigen NN-Wechselwirkungen. Insbesondere die Skyrme-Wechselwirkungen tendieren dazu, Protonen- und Neutronendichten auch für starke Isospinasymmetrie aneinander anzupassen. Um dies zu zeigen, wurden auch Rechnungen für die Sauerstoffisotope mit der Skyrme SkM*-

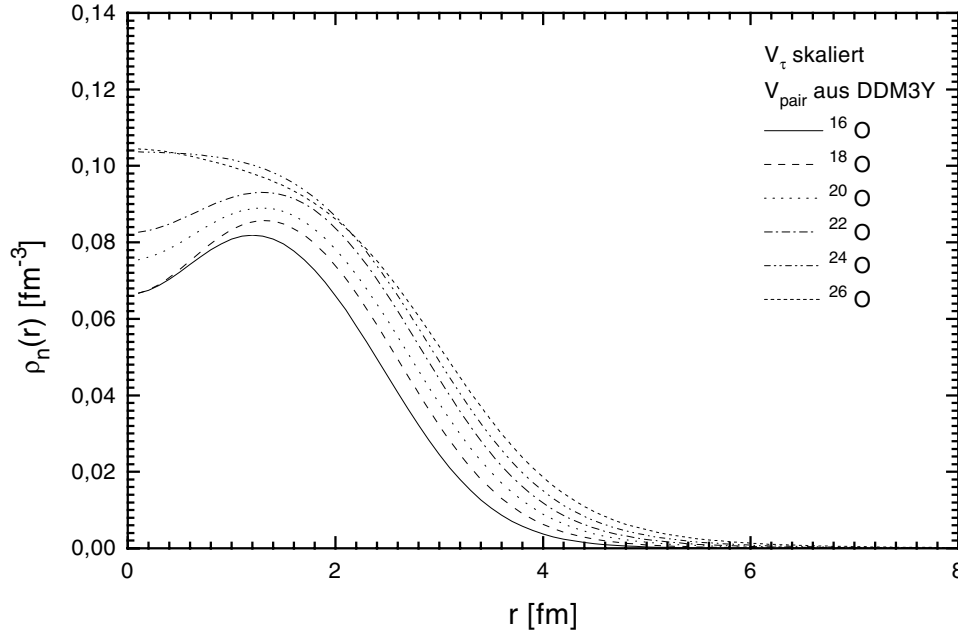


Abbildung 7.10: Neutronendichten der Sauerstoffisotope ^{16}O bis ^{26}O , isovektorieller Kanal V_τ auf Neutronenabbruchkante skaliert

Wechselwirkung und einer konstanten Paarkraft durchgeführt [Re 91]. Tabelle 7.3 zeigt Ergebnisse für Ladungs- und mittlere Neutronenradien der SkM*-Parametrisierung im Vergleich zu den mit der DDM3Y-Wechselwirkung erhaltenen Ergebnissen. Leider existieren zum Vergleich noch keine experimentellen Daten. Tabelle 7.4 zeigt die mit den gleichen Wechselwirkungen erhaltenen Bindungsenergien im Vergleich mit den experimentellen Daten [Nu 95].

Ein Blick auf das mit der SkM*-Wechselwirkung berechnete chemische Potential zeigt, daß auch hier keine Neutronenabbruchkante gefunden wird. Man findet $\lambda = -7.6$ MeV für ^{24}O und $\lambda = -5.6$ MeV für ^{26}O . Also ist auch der isovektorielle Kanal der Skyrme-Wechselwirkung zu schwach. Die Tatsache, daß das chemische Potential noch stärker negativ ist als bei der DDM3Y-Wechselwirkung erklärt sich, wenn man sich die Bindungsenergien in Tabelle 7.4 anschaut: Obwohl die SkM*-Wechselwirkung die experimentelle Bindungsenergie von ^{16}O genau trifft, wird die Diskrepanz mit zunehmender Neutronenzahl immer größer, da die mit der SkM* berechneten Bindungsenergien fast konstant bleiben.

Abbildungen 7.11, 7.12 und 7.13 stellen die Ergebnisse für die Ladungsradi-

	nicht skaliert		V_τ skaliert		V_0 skaliert		Skyrme M*	
	ρ_C	ρ_n	ρ_C	ρ_n	ρ_C	ρ_n	ρ_C	ρ_n
^{16}O	2.76	2.62	2.76	2.62	2.70	2.55	2.78	2.61
^{18}O	2.76	2.83	2.76	2.81	2.70	2.73	2.80	2.80
^{20}O	2.76	2.91	2.77	3.30	2.70	2.82	2.82	2.86
^{22}O	2.77	2.97	2.78	3.39	2.70	2.87	2.84	2.90
^{24}O	2.80	3.16	2.80	3.46	2.74	3.05	2.87	2.93
^{26}O	2.85	3.35	—	—	2.79	3.22	2.91	3.05

Tabelle 7.3: Ladungs- und mittlere Neutronenradien ρ_C [fm] und ρ_n [fm] für die Sauerstoffisotope, berechnet mit verschiedenen dichteabhängigen Wechselwirkungen

	nicht skaliert	V_τ skaliert	V_0 skaliert	Skyrme M*	Exp.
^{16}O	-6.69	-6.69	-7.96	-7.97	-7.98
^{18}O	-6.52	-6.38	-7.80	-8.32	-7.72
^{20}O	-6.43	-5.99	-7.74	-8.33	-7.49
^{22}O	-6.42	-5.85	-7.76	-8.30	-7.26
^{24}O	-6.22	-5.70	-7.54	-8.23	-6.89
^{26}O	-5.83	—	-7.10	-8.02	—

Tabelle 7.4: Bindungsenergien pro Nukleon E_B/A [MeV] für die Sauerstoffisotope, berechnet mit verschiedenen dichteabhängigen Wechselwirkungen

en, die Neutronenmassenradien und die Bindungsenergien grafisch dar. Betrachtet man die Abhängigkeit des Ladungsradius von der Neutronenzahl, so erkennt man, daß dieser mit zunehmender Neutronenzahl anwächst, allerdings nur sehr schwach. Dies ist leicht verständlich, da mit zunehmender Neutronenzahl die Protonen etwas aus dem Kerninnern nach außen gedrückt werden. Insgesamt zeigen alle Wechselwirkung das gleiche Verhalten, wenn auch der Anstieg bei der SkM*-Wechselwirkung am stärksten ist.

Der mittlere Neutronenradius wächst mit zunehmender Neutronenzahl dagegen stärker an. Während die im isovektoriellen Kanal unveränderten Wechselwirkungen qualitativ ein ähnliches Verhalten zeigen, wird der mit der skalierten DDM3Y berechnete mittlere Radius sehr viel schneller größer. Daß für ^{26}O kein Datenpunkt existiert, erklärt sich aus der Tatsache, das die-

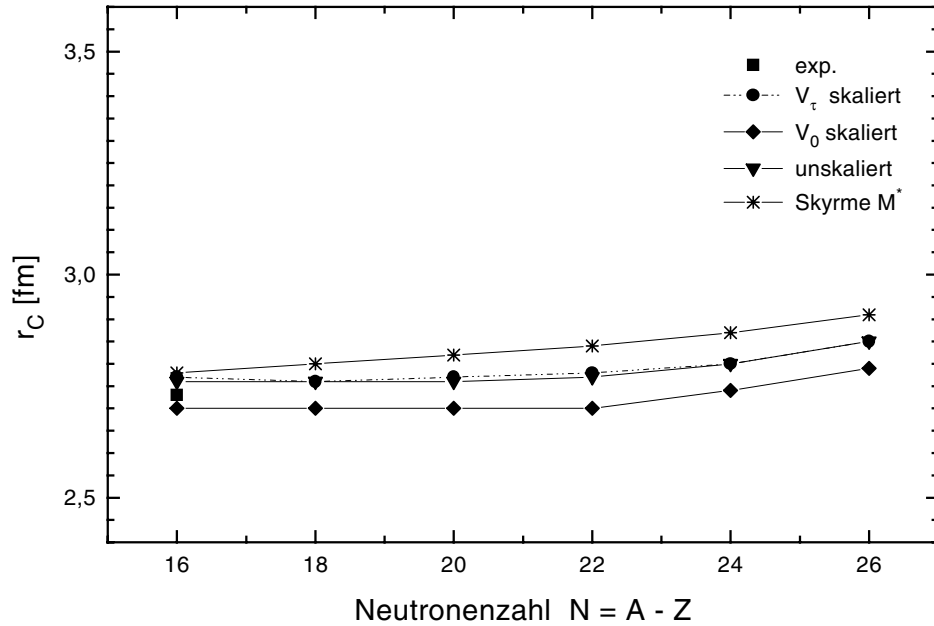


Abbildung 7.11: Abhängigkeit des Ladungsradius der Sauerstoffisotope von der Neutronenzahl

ser Kern nicht mehr gebunden ist. Es fällt auf, daß die Radien der SkM*-Wechselwirkung schwächer anwachsen. Vergleicht man dies mit den Ergebnissen für die Ladungsradien bestätigt dies die oben angesprochene Tatsache, daß die Skyrme-Wechselwirkung dazu neigt, Protonen- und Neutronendichte einander anzupassen.

Man erkennt sehr gut aus Abbildung 7.12, daß die Skalierung im isoskalaren Kanal auch die Neutronenradien skaliert – die Kurven für beide Rechnungen sind parallel verschoben. Das gleiche Verhalten läßt sich auch bei den Bindungsenergien feststellen: Auch in Abbildung 7.13 sind die Kurven für die skalierte und die unskalierte Wechselwirkung parallel verschoben. Das globale Verhalten stimmt aber nicht mit dem der experimentellen Daten überein – die Abnahme der Bindungsenergie für größere Neutronenzahlen ist zu gering. Das qualitative Verhalten der experimentellen Daten wird noch am ehesten von der im isovektoriellen Kanal angepaßten DDM3Y-Wechselwirkung getroffen. Man erkennt, daß eine Verstärkung der Isevektorwechselwirkung die Bindungsenergie reduziert. Dies ist insofern nicht verwunderlich, da V_τ insgesamt repulsiv ist (siehe die Volumenintegrale der Wechselwirkung in Kapitel 4). Durch eine zusätzliche Skalierung von V_0 sollte es möglich sein, auch die

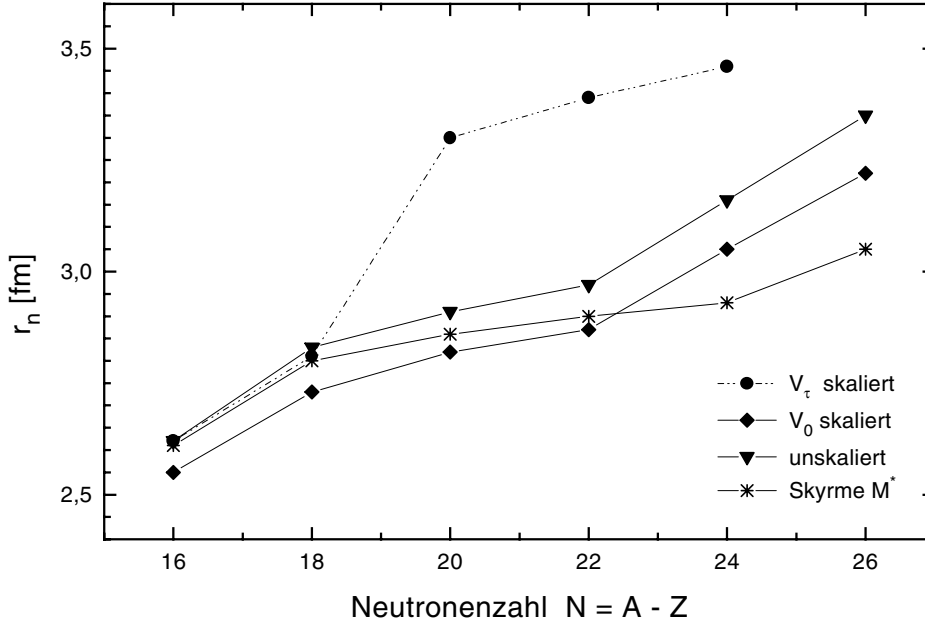


Abbildung 7.12: Abhängigkeit des mittleren Neutronenradius der Sauerstoffisotope von der Neutronenzahl

Größe der Bindungsenergie anzupassen und die experimentellen Daten zu reproduzieren. Dies wurde jedoch nicht durchgeführt, da es nicht das Ziel war, mit zwei neuen Parametern die Isotopenkette anzufitten, sondern herauszufinden, inwiefern sich die in Kernmaterie bestimmten Funktionen $g_0(\rho)$ und $g_\tau(\rho)$ auf endliche Kerne übertragen lassen und in welcher Größenordnung der gemachte Fehler ist.

Da das erhaltene Mean-field in der vorliegenden Parametrisierung der DDM3Y-Wechselwirkung nicht in der Lage ist, die Einteilchenenergien in der Nähe der Fermikante korrekt zu beschreiben, ist es schwierig, Rückschlüsse auf den Paarungskanal in endlichen Kernen zu ziehen. Die Größe der aus dem SE-Kanal berechneten Matrixelemente entspricht jedoch etwa phänomenologischen Werten und liegt zwischen -0.3 MeV und -2 MeV je nach Quantenzahl des Zustandes. Der daraus berechnete Gap liegt in der Größenordnung von 0.5 MeV bis 1 MeV. Skalierung der Isektorwechselwirkung führt zu einer Reduzierung der Paarkraft, wie man leicht aus Formel (A.11) erkennen kann. Insgesamt gesehen stimmen die erhaltenen Ergebnisse mit denen, die man aus einer Rechnung mit konstanter Paarkraft erhält, überein. Ein Unterschied ist, daß insbesondere die Stärke der Matrixelemen-

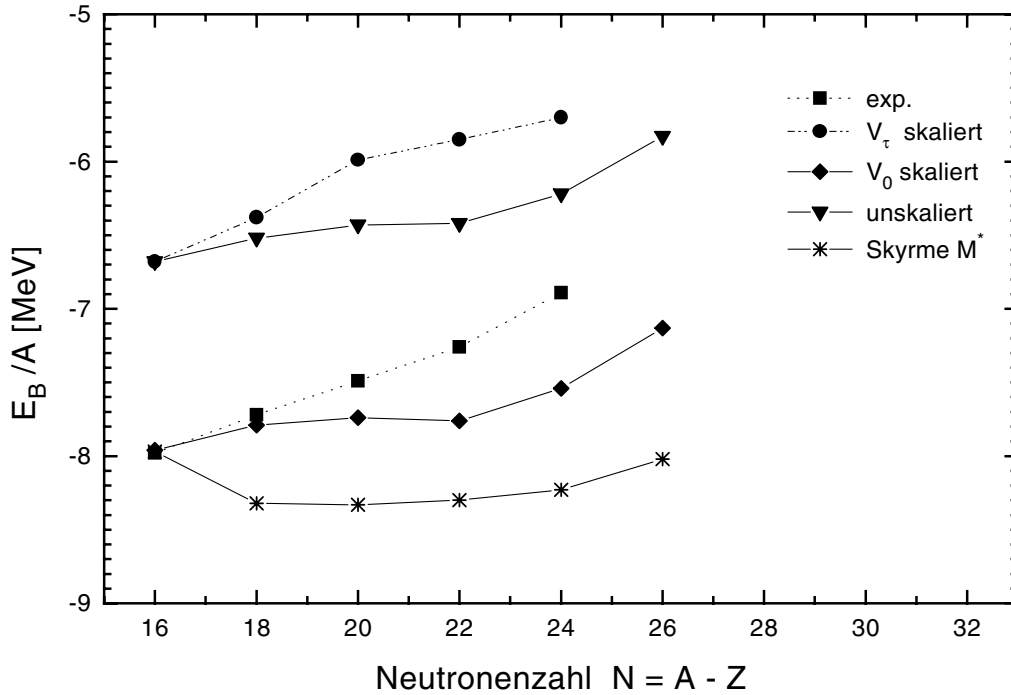


Abbildung 7.13: Abhängigkeit der Bindungsenergien pro Nukleon der Sauerstoffisotope von der Neutronenzahl

te an der Fermikante geringer ist als der in BCS-Rechnungen oft benutzte phänomenologische Wert von 23 MeV/Nukleon. Um die Eigenschaften und die Bedeutung der Paarkraft für Kerne an den Abbruchkanten zu untersuchen, ist es allerdings erst notwendig, die Beschreibung des Mean-fields zu verbessern. Eine Möglichkeit wäre zum Beispiel, die Paarkraft direkt im Rahmen der Hartree-Fock-Bogoliubov-Theorie in die Mean-field-Beschreibung zu integrieren.

Insbesondere der isovektorielle Kanal der DDM3Y-Wechselwirkung ist viel zu schwach, um das Verhalten von Kernen mit starker Ladungsasymmetrie korrekt beschreiben zu können. Dies ist insofern verwunderlich, da der in Kernmaterie berechnete Symmetriekoeffizient sehr gut mit dem Ergebnis aus der phänomenologischen Massenformel übereinstimmt. Andererseits wurde die in der DDM3Y-Wechselwirkung verwendete G-Matrix an den isospinsymmetrischen Kern ^{16}O angefitet, so daß von dieser Seite her keine besondere Sensibilität im Isovektorkanal zu erwarten ist. Auch spielen bei ^{24}O oder

^{26}O mit ihrer starken Isospinasymmetrie Terme höherer Ordnung eine entscheidende Rolle. Da für sie ρ_τ nicht mehr klein gegenüber ρ ist, gewinnen die in Formel für die Bindungsenergie (4.19) vernachlässigte Terme der Ordnung $(\frac{\rho_\tau}{\rho})^4$ und höher an Bedeutung. Diese wurden jedoch nicht berücksichtigt.

Wünschenswert wäre jedoch, wenn man für die HF-Rechnungen eine G-Matrix zur Verfügung hätte, die nicht in symmetrischen Systemen berechnet wurde, und so auf natürliche Weise eine verbesserte Beschreibung der Isovektorwechselwirkung beinhaltet.

7.4 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden im Rahmen der Hartree-Fock-Theorie Grundzustandseigenschaften von endlichen Kernen berechnet. Die dafür verwendete Zweiteilchenwechselwirkung basiert auf einer G-Matrix, die aus dem Paris-Nukleon-Nukleon-Potential erhalten wurde. Die Wechselwirkung ist damit im Gegensatz zu den in der Regel verwendeten phänomenologischen Skyrme- oder Gogny-Wechselwirkungen mikroskopischen Ursprungs. Insbesondere beschreibt ihre algebraische Struktur in der Form eines Yukawapotentials die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen als Austausch von Mesonen.

Die ursprüngliche dichteunabhängige M3Y-Wechselwirkung, die nur für einen relativ begrenzten Dichtebereich charakteristisch ist, wurde durch eine dichteabhängige Korrektur der Meson-Nukleon-Kopplungskonstanten erweitert. Dazu wurden in den isoskalaren und den isovektoriellen Kanälen der Wechselwirkung jeweils Funktionen eingeführt, die explizit von der Nukleonendichte am Ort der Wechselwirkung abhängen. Die Parametrisierung dieser Funktionen wurde in unendlicher Kernmaterie bestimmt, indem die Eigenschaften der Zustandsgleichung wie Sättigungspunkt, Bindungsenergie, Kompressibilität und Symmetrieenergie angepaßt wurden.

Um die durch dieses Vorgehen erhaltene dichteabhängige M3Y-Wechselwirkung auch im Teilchen-Teilchen-Kanal zu testen, wurden Hartree-Fock-Bogoliubov-Rechnungen in unendlicher Kernmaterie durchgeführt. Zu beachten ist, daß der für die Paarkorrelationen verantwortliche Singlett-Even-Kanal der Wechselwirkung nun auch dichteabhängig ist. Ein Vergleich mit äquivalenten Rechnungen mit Skyrme- oder Gogny-Wechselwirkungen zeigt eine gute Übereinstimmung der erhaltenen Ergebnisse, mit am stärksten ausgeprägten Paarkorrelationen bei etwa einem Fünftel der Sättigungsdichte.

Zur Berechnung des Grundzustandes von endlichen Kernen wurde wegen der endlichen Reichweite der Wechselwirkung eine Dichtematrixentwicklung

des Austauschtermes durchgeführt. Durch die Definition eines modifizierten Fermi-Impulses, der die Oberflächenstruktur von endlichen Systemen berücksichtigt, gelang es, auf natürliche Weise die Impulsstruktur der Wechselwirkung zu berücksichtigen.

Aus der Dichteabhängigkeit der Wechselwirkung und der Entwicklung des Austauschtermes erhält man zusätzlichen Rearrangementterme, die in den Hartree-Fock-Gleichungen berücksichtigt werden müssen und zu einer verbesserten Beschreibung des Mean-fields führen.

Rechnungen für Kerne mit abgeschlossenen Schale zeigen, daß die dichteabhängige Wechselwirkung das Mean-field von Kernen mit verschwindender Isospinasymmetrie gut beschreiben kann. Ein Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt, daß insbesondere die Ladungsradien sehr gut reproduziert werden. Die Bindungsenergien pro Teilchen sind allerdings im Vergleich zu den experimentellen Daten systematisch zu gering. Dies läßt darauf schließen, daß der isoskalare Wechselwirkung in endlichen Kernen etwas zu schwach ist.

Rechnungen für exotischen Kernen zeigen, daß die Isektorwechselwirkung zu schwach und ohne nachträgliche Skalierung nicht in der Lage ist, die Position der Neutronenabbruchkante korrekt wiederzugeben. Aus diesem Grunde ist es auch problematisch, Aussagen über den Teilchen-Teilchen-Kanal der Wechselwirkung zu machen, da dieser sich aufgrund der unzureichenden Beschreibung des Mean-fields exotischer Kerne nicht zuverlässig untersuchen läßt.

Die erhaltenen Ergebnisse zeigen, daß es problematisch ist, die in unendlicher Kernmaterie erhaltene Dichteabhängigkeit der Wechselwirkung auf endliche Systeme zu übertragen, da in diesen Oberflächeneffekte eine entscheidende Rolle spielen.

Eine Möglichkeit zur Verbesserung der Dichteabhängigkeit der Wechselwirkung ist die zusätzliche Berücksichtigung von Dreikörperkräften und von Polarisationsdiagrammen, die im jetzigen Formalismus nicht behandelt werden. Auch eine Anpassung der Dichteabhängigkeit durch einen Fit an endliche Kerne ist möglich. Dies würde jedoch die mikroskopischen Fundierung der Wechselwirkung teilweise reduzieren. Eine wünschenswerte Alternative wäre, eine mikroskopische G -Matrix, die eine verbesserte Beschreibung der Isektorkraft beinhaltet, mit dem entwickelten Formalismus zu verwenden und zu testen.

Anhang A

Darstellung der NN–Wechselwirkung

A.1 Die {SE, TE, SO, TO}–Darstellung

Wie in Kapitel 1 bereits beschrieben, läßt sich der Zentralteil der NN–Wechselwirkung ausdrücken als

$$V_C = V_0(r) + V_\sigma(r)(\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2) + V_\tau(r)(\vec{\tau}_1\vec{\tau}_2) + V_{\sigma\tau}(r)(\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1\vec{\tau}_2) \quad (\text{A.1})$$

Definiert man nun die Operatoren

$$P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2), \quad P_\tau = \frac{1}{2}(1 + \vec{\tau}_1\vec{\tau}_2), \quad (\text{A.2})$$

die die Spin und Isospinkoordinaten austauschen, sowie die Projektionsoperatoren

$$\begin{aligned} P_{SE} &= \frac{1}{2}(1 - P_\sigma) \frac{1}{2}(1 + P_\tau) \\ P_{TE} &= \frac{1}{2}(1 + P_\sigma) \frac{1}{2}(1 + P_\tau) \\ P_{SO} &= \frac{1}{2}(1 - P_\sigma) \frac{1}{2}(1 - P_\tau) \\ P_{TO} &= \frac{1}{2}(1 + P_\sigma) \frac{1}{2}(1 - P_\tau) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

so läßt sich (A.1) auch schreiben als

$$V_C = V_{SE}(r)P_{SE} + V_{TE}(r)P_{TE} + V_{SO}(r)P_{SO} + V_{TO}(r)P_{TO} \quad (\text{A.4})$$

Die neuen Wechselwirkungskoeffizienten erhält man durch die Umrechnung zwischen den Projektionsoperatoren. Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned}
V_0 &= \frac{1}{16} [3V_{SE} + 3V_{TE} + 1V_{SO} + 9V_{TO}] \\
V_\sigma &= \frac{1}{16} [-3V_{SE} + 1V_{TE} - 1V_{SO} + 3V_{TO}] \\
V_\tau &= \frac{1}{16} [1V_{SE} - 3V_{TE} - 1V_{SO} + 3V_{TO}] \\
V_{\sigma\tau} &= \frac{1}{16} [-1V_{SE} - 1V_{TE} + 1V_{SO} + 1V_{TO}]
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Dabei projiziert zum Beispiel P_{SE} auf die Ortswellenfunktionen der wechselwirkenden Nukleonen, die gerade (even E) unter Koordinatenaustausch sind und auf das Spin-Singlet (Singlett S) der Zweiteilchenwellenfunktion. Analog projiziert P_{TO} auf das Spin-Triplett (Triplett T) und die ungeraden (odd O) Ortswellenfunktionen.

Diese Darstellung ist in der Streutheorie gebräuchlich [Ma 89].

A.2 Berechnung der HF-Matrixelemente

Für Hartree-Fock-Rechnungen ist es sinnvoll, die NN-Wechselwirkung jeweils für den direkten und den Austauschterm in Kanäle mit gleichen oder verschiedenem Isospin aufzuspalten, also in eine Proton-Proton- (oder Neutron-Neutron-) und eine Proton-Neutron-Wechselwirkung zu separieren.

Dazu berechnet man das antisymmetrische Matrixelement der Wechselwirkung für zwei Zustände $|N\rangle$ und $|M\rangle$. Dabei sei $|N\rangle = \phi_n(\vec{r})\chi_n\tau_n$ die vollständige Einteilchenwellenfunktion inklusive Spin- und Isospinwellenfunktionen, $|n\rangle = \phi_n(\vec{r})$ die reine Einteilchenortswellenfunktion.

Für die Hartree-Fock-Matrixelemente erhält man nach Ausnutzen der Orthonormalität der Spin- und Isospinfunktionen [Ne 70]

$$\begin{aligned}
\langle MN|V_C|MN - NM\rangle &= \frac{1}{4}(1 - \delta_\tau\delta_\chi - \delta_\chi + \delta_\tau)\langle mn|V_{SE}|mn + nm\rangle \\
&+ \frac{1}{4}(1 - \delta_\tau\delta_\chi + \delta_\chi - \delta_\tau)\langle mn|V_{TE}|mn + nm\rangle \\
&+ \frac{1}{4}(1 + \delta_\tau\delta_\chi - \delta_\chi - \delta_\tau)\langle mn|V_{SO}|mn - nm\rangle \\
&+ \frac{1}{4}(1 + \delta_\tau\delta_\chi + \delta_\chi + \delta_\tau)\langle mn|V_{TO}|mn - nm\rangle.
\end{aligned}$$

Nach Mittelung über die Spinzustände erhält man für Teilchen gleichen Isospins ($\delta_\tau = 1$)

$$\langle mn | \frac{1}{4}V_{SE} + \frac{3}{4}V_{TO} | mn \rangle + \langle mn | \frac{1}{4}V_{SE} - \frac{3}{4}V_{TO} | nm \rangle \quad (\text{A.6})$$

und für Teilchen mit verschiedenem Isospin ($\delta_\tau = 0$)

$$\begin{aligned} \langle mn | \frac{1}{8}V_{SE} + \frac{3}{8}V_{TE} + \frac{1}{8}V_{SO} + \frac{3}{8}V_{TO} | mn \rangle + \\ \langle mn | \frac{1}{8}V_{SE} + \frac{3}{8}V_{TE} - \frac{1}{8}V_{SO} - \frac{3}{8}V_{TO} | nm \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Man definiert deshalb jeweils für den direkten- und den Austauschterm eine spingemittelte Proton-Proton- (pp) und Proton-Neutron- (pn) Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} V_{pp}^d &= \frac{1}{8} [2V_{SE} + 6V_{TO}] = V_{nn}^d \\ V_{pn}^d &= \frac{1}{8} [1V_{SE} + 3V_{TE} + 1V_{SO} + 3V_{TO}] \\ V_{pp}^e &= \frac{1}{8} [2V_{SE} - 6V_{TO}] = V_{nn}^e \\ V_{pn}^e &= \frac{1}{8} [1V_{SE} + 3V_{TE} - 1V_{SO} - 3V_{TO}] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Zur Vereinfachung der Rechnung definiert man abschließend jeweils für den direkten und den Austauschterm noch effektive isoskalare- und isovektorielle Wechselwirkungen:

$$\begin{aligned} V_0^d &= \frac{1}{2} [V_{pp}^d + V_{pn}^d] \\ V_\tau^d &= \frac{1}{2} [V_{pp}^d - V_{pn}^d] \\ V_0^e &= \frac{1}{2} [V_{pp}^e + V_{pn}^e] \\ V_\tau^e &= \frac{1}{2} [V_{pp}^e - V_{pn}^e] \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Ausgedrückt in der {SE, TE, SO, TO}-Darstellung erhält man

$$\begin{aligned} V_0^d &= \frac{1}{16} [3V_{SE} + 3V_{TE} + 1V_{SO} + 9V_{TO}] = V_0 \\ V_\tau^d &= \frac{1}{16} [1V_{SE} - 3V_{TE} - 1V_{SO} + 3V_{TO}] = V_\tau \\ V_0^e &= \frac{1}{16} [3V_{SE} + 3V_{TE} - 1V_{SO} - 9V_{TO}] \\ V_\tau^e &= \frac{1}{16} [1V_{SE} - 3V_{TE} + 1V_{SO} - 3V_{TO}]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Das bedeutet, daß die definierten effektiven direkten Wechselwirkungen identisch sind mit den ursprünglichen Ansatz für die Form der Wechselwirkung, für die Austauschterme gibt es jedoch kein Äquivalent.

Bildet man nun die Inverse dieser Transformation, so erhält man die für die Paarungskraft, die durch den Singlet–Even–Kanal bestimmt wird, wichtige Beziehung

$$V_{SE} = 2 \left[V_0^d + V_0^e \right] + 2 \left[V_\tau^d + V_\tau^e \right]. \quad (\text{A.11})$$

Anhang B

Die Dichtematrixentwicklung

Die Entwicklung der Dichtematrix nach Schwerpunkts- und Relativkoordinaten $\vec{R}$ und $\vec{s}$ wurde erstmals von Negele und Vautherin untersucht [NV 72]. Man startet mit

$$\rho\left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}\right) = \sum_k \phi_k^*\left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}\right) \phi_k\left(\vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}\right) \quad (\text{B.1})$$

$$= e^{\vec{s}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2} \sum_k \phi_k^*(\vec{R}_1) \phi_k(\vec{R}_2), \quad (\text{B.2})$$

wobei die Wellenfunktionen und ihre Ableitungen jeweils an den Stellen $\vec{R}_1 = \vec{R}_2 = \vec{R}$ ausgerechnet werden.

Für Kerne mit einer geraden Protonen- oder Neutronenzahl sind die zeitumgekehrten Orbitale jeweils paarweise gefüllt, so daß der lineare Term der exponentiellen Entwicklung verschwindet, da

$$(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2) [\phi_m^*(\vec{R}_1) \phi_m(\vec{R}_2) + \phi_m^*(\vec{R}_2) \phi_m(\vec{R}_1)] = 0.$$

Für die Terme einschließlich zweiter Ordnung kann man deshalb das Winkelintegral über das Quadrat der Dichtematrix durch das Integral über das Quadrat der winkelmittelten Dichtematrix ersetzen. Führt man das Winkelintegral über die Richtung von $\vec{s}$ aus, so findet man

$$\hat{\rho}\left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}\right) = \int d\cos\varphi \exp[\cos\varphi \vec{s}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2] \rho(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \quad (\text{B.3})$$

$$= \frac{\sinh[\vec{s}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2]}{\vec{s}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2} \rho(\vec{R}_1, \vec{R}_2). \quad (\text{B.4})$$

Da eine Dichtematrixentwicklung gesucht wird, deren erster Term der Slater-Dichte entsprechen soll, um dadurch im Spezialfall von ebenen Wellen das Ergebnis für unendliche Kernmaterie reproduzieren zu können, entwickelt man den Term in Gleichung (B.4) nach sphärischen Besselfunktion.

Folgende Entwicklung ist dabei nützlich [AS 65]:

$$\frac{1}{xy} \sinh(xy) = \frac{1}{x} \sum_{k=0}^{\infty} (4k+3) j_{2k+1}(x) Q_k(y^2) \quad (\text{B.5})$$

Dabei ist $Q_k = \frac{P_{2k-1}(iz)}{iz}$ ein modifiziertes Legendrepolynom.

Für eine gute Konvergenz der Entwicklung ist die richtige Wahl des Entwicklungsparameters y entscheidend. An der Kernoberfläche ist der Impulsübertrag $\frac{(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)}{2}$ der wechselwirkenden Nukleonen in der Größenordnung des Fermi-Impulses k_F an der Schwerpunktskoordinate $\vec{R}$. Um gerade diese Beiträge zur Dichtematrix von der Fermioberfläche korrekt zu behandeln, ist $x = sk_F$ und $y = \frac{1}{k_F} \frac{\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2}{2}$ mit $k_F = k_F(R)$ eine vernünftige Wahl. Die genaue funktionelle Abhängigkeit von k_F von R wird später diskutiert.

Setzt man nun (B.5) in (B.4) ein und faßt die Terme proportional k_F und $1/k_F$ zusammen, so erhält man für die winkelgemittelte Dichtematrix [NV 72]:

$$\hat{\rho} \left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2} \right) = \frac{1}{sk_F} \left[\sum_{n=0}^{\infty} (4n+3) j_{2n+1}(sk_F) Q_n \left(\left(\frac{\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2}{2k_F} \right)^2 \right) \right] \rho(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \quad (\text{B.6})$$

Man erkennt sofort, daß diese Funktion gerade in k_F ist. Rechnet man nun die Wirkung des Operators Q_n auf die Dichtematrix in Kernmaterie aus, so verschwinden alle Terme der Ordnung $n \geq 1$ identisch [NV 72]:

$$Q_n \left(\left(\frac{\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2}{2k_F} \right)^2 \right) \rho(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \rho(\vec{R}, \vec{R}) \delta_{n0}.$$

Daraus folgt sofort

$$\hat{\rho} \left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2} \right) = \frac{3}{sk_F} j_1(sk_F) \rho(\vec{R}, \vec{R}) \quad (\text{B.7})$$

Dies entspricht gerade wieder der *Slater*-Dichte $\rho_{SL}(sk_F) \rho(\vec{R})$ die in Kapitel 2 als Ergebnis für den Austauschterm in Kernmaterie gefunden wurde. Die Dichtematrixentwicklung (DME) ist also exakt in Kernmaterie.

Zur korrekten Beschreibung endlicher Systeme, die nicht mehr durch ebene Wellen beschrieben werden können, ist es notwendig, höhere Ordnungsterme in der Entwicklung zu berücksichtigen. Rechnet man (B.6) explizit bis zur Ordnung $n = 1$ aus, so erhält man durch geschickte Umordnung aller Terme die von Negele und Vautherin [NV 72] gefundene Entwicklung der Dichtematrix:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} \left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2} \right) &= \rho_{SL}(sk_F) \rho(\vec{R}) \\ &+ \frac{35}{2sk_F^3} j_3(sk_F) \left[\frac{1}{4} \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{R}) - \tau(\vec{R}) + \frac{3}{5} k_F^2 \rho(\vec{R}) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

mit

$$\rho(\vec{R}) = \rho(\vec{R}, \vec{R}) = \sum_k |\phi_k(\vec{R})|^2$$

und

$$\tau(\vec{R}) = \sum_k |\vec{\nabla} \phi_k(\vec{R})|^2.$$

Der erste Term entspricht der *Slater*-Dichte, während der zweite ein Korrekturterm ist, der die Oberflächenterme berücksichtigt. Die Wahl von $k_F = \left(\frac{3\pi^2}{2} \rho(R) \right)^{1/3}$ analog zu Kernmaterie und die Vernachlässigung des Terms proportional $j_3(sk_F)$ entspricht damit gerade der lokalen Dichtenäherung (LDA). In unendlicher Kernmaterie reduziert sich (B.8) wie gefordert zur *Slater*-Dichte, da dort $\vec{\nabla}^2 \rho = 0$ und $\tau = \frac{3}{5} k_F^2 \rho$ ist, und deshalb der Term proportional $j_3(sk_F)$ exakt null wird.

Man kann den Term proportional $\vec{\nabla}^2 \rho$ auch als eine Modifizierung der kinetischen Energiedichte τ interpretieren, die Oberflächenterme berücksichtigt, wenn man $\tau' = \tau - \frac{1}{4} \vec{\nabla}^2 \rho$ definiert. Weil sich τ und τ' nur durch eine totale Divergenz unterscheiden, die nach Integration über das gesamte Volumen verschwindet, ändert sich dadurch die kinetische Energie nicht.

Anhang C

Variation der Energie

Vor der Variation der Energiedichte werden zuerst ρ , τ , $\vec{\nabla}^2 \rho$ und der modifizierte Fermi-Impuls $k_F(\rho, \tau, \vec{\nabla}^2 \rho)$ durch die ϕ_k und deren Ableitungen ausdrückt:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_k |\phi_k(\vec{r})|^2 \quad (\text{C.1})$$

$$\tau(\vec{r}) = \sum_k |\vec{\nabla} \phi_k(\vec{r})|^2 \quad (\text{C.2})$$

$$\vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) = \sum_k \left\{ \phi_k^* \vec{\nabla}^2 \phi_k + 2 |\vec{\nabla} \phi_k|^2 + \phi_k \vec{\nabla}^2 \phi_k^* \right\} \quad (\text{C.3})$$

$$k_F^2(\phi_k, \vec{\nabla} \phi_k, \vec{\nabla}^2 \phi_k) = \frac{5}{6} \frac{1}{\rho} \sum_k \left\{ |\vec{\nabla} \phi_k|^2 - \frac{1}{2} (\phi_k^* \vec{\nabla}^2 \phi_k + \phi_k \vec{\nabla}^2 \phi_k^*) \right\} \quad (\text{C.4})$$

Die Variation der Gesamtenergie

$$\delta E = \int d^3 R \delta \left(H(\vec{R}) - \sum_k |\phi_k(\vec{R})|^2 \epsilon_k \right) = 0 \quad (\text{C.5})$$

erfordert die Variation der Energiedichte

$$H(\vec{R}) = H(\phi_k, \vec{\nabla} \phi_k, \vec{\nabla}^2 \phi_k) \quad (\text{C.6})$$

$$\delta H(\vec{R}) = \frac{\partial H}{\partial \phi_k^*} \delta \phi_k^* + \frac{\partial H}{\partial \vec{\nabla} \phi_k^*} \delta \vec{\nabla} \phi_k^* + \frac{\partial H}{\partial \vec{\nabla}^2 \phi_k^*} \delta \vec{\nabla}^2 \phi_k^*. \quad (\text{C.7})$$

Da jedoch das Integral über die Energiedichte minimiert wird läßt sich (C.5) nach partieller Integration umschreiben als

$$\delta E = \sum_k \int d^3 R \delta \phi_k \left(\frac{\partial H}{\partial \phi_k^*} - \vec{\nabla} \frac{\partial H}{\partial \vec{\nabla} \phi_k^*} - \vec{\nabla}^2 \frac{\partial H}{\partial \vec{\nabla}^2 \phi_k^*} - \phi_k \epsilon_k \right), \quad (\text{C.8})$$

da die Wellenfunktionen und ihre Ableitungen im Unendlichen verschwinden. Dieser Ausdruck ist genau dann gleich null, wenn die Terme in der Klammer sich für jeden Zustand k und an jeder Stelle $\vec{R}$ kompensieren. Da die Energiedichte nicht nur über die Dichte ρ von ϕ_k abhängt, sondern zusätzlich auch durch die dichteabhängige Funktion $g(\rho)$ und den Fermi-Impuls k_F im Austauschterm, schreibt man in C.8 die partielle Ableitung nach ϕ_k als

$$\frac{\partial H}{\partial \phi_k^*} = \frac{\partial H}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \phi_k^*} + \frac{\partial H}{\partial g(\rho)} \frac{\partial g(\rho)}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \phi_k^*} + \frac{\partial H}{\partial k_F^2} \frac{\partial k_F^2}{\partial \phi_k^*} \quad (\text{C.9})$$

Der erste Term in dieser Formel entspricht dem normalen HF-Einteilchenpotential analog zu (2.8), der zweite Term und dritte Term sind Rearrangementpotentiale, die aus der Dichteabhängigkeit der Wechselwirkung stammen — der zweite Term aus der zusätzlich eingeführten dichteabhängigen Funktion $g(\rho)$, der dritte ganz allgemein aus der Dichtematrixentwicklung des Austauschterms. Analog drückt man die partiellen Ableitungen nach $\vec{\nabla} \phi_k$ und $\vec{\nabla}^2 \phi_k$ durch

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{\nabla} \phi_k^*} = \frac{\partial H}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial \vec{\nabla} \phi_k^*} + \frac{\partial H}{\partial k_F^2} \frac{\partial k_F^2}{\partial \vec{\nabla} \phi_k^*} \quad \text{und} \quad (\text{C.10})$$

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{\nabla}^2 \phi_k^*} = \frac{\partial H}{\partial k_F^2} \frac{\partial k_F^2}{\partial \vec{\nabla}^2 \phi_k^*} \quad (\text{C.11})$$

aus. Während der erste Term in (C.10) wieder der normale impulsabhängige Term aus der kinetischen Energie in den HF-Gleichungen ist, führt der impulsabhängige Rearrangementterm zu einer Modifizierung der dynamischen Eigenschaften des Nukleons. Dies kann durch die Definition einer *effektiven* Masse berücksichtigt werden, die gerade diesen impulsabhängigen Potentialbeitrag beinhaltet. Der Beitrag aus (C.11) ist ein weiterer Beitrag zum Rearrangementpotential.

Es soll nun eine Energiedichte der Form

$$\begin{aligned} H(\vec{R}) &= H_T(\vec{R}; \tau) + H^d(\vec{R}; \rho, g(\rho)) + H^e(\vec{R}; \rho, g(\rho), k_F^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \tau + \frac{1}{2} \rho U^d(\rho, g) + \frac{1}{2} \rho^2 \tilde{V}^e(g, k_F^2) \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

angenommen werden. Setzt man nun (C.9) - (C.11) in (C.8) ein und benutzt die Darstellung in (C.1) - (C.4), so erhält nach einigen algebraischen Umformungen die HF-Gleichungen:

$$\left\{ -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{\nabla} + U^{HF} + U^R \right\} \phi_k = \epsilon_k \phi_k \quad (\text{C.13})$$

Dabei werden das Hartree–Fock–Potential U^{HF} , das Rearrangementpotential U^R und die effektive Masse m^* definiert durch

$$U^{HF}(\vec{R}) = U^d(\rho, g) + \rho \tilde{V}^e(g, k_F^2) \quad (\text{C.14})$$

$$\begin{aligned} U^R(\vec{R}) = & \left[\frac{1}{2} \rho \frac{\partial U^d}{\partial g} \frac{\partial g}{\partial \rho} + \frac{1}{2} \rho^2 \frac{\partial \tilde{V}^e}{\partial g} \frac{\partial g}{\partial \rho} \right] \\ & - \left[\frac{1}{2} \rho k_F^2 \frac{\partial \tilde{V}^e}{\partial k_F^2} + \frac{5}{24} \vec{\nabla}^2 \left(\rho \frac{\partial \tilde{V}^e}{\partial k_F^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

$$m^*(\vec{R}) = \frac{m}{1 + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{5}{6} \rho \frac{\partial \tilde{V}^e}{\partial k_F^2}}. \quad (\text{C.16})$$

Um die Rechnung übersichtlich zu gestalten, wurde hier auf die Verwendung einer isospinabhängigen Wechselwirkung verzichtet. Die Verallgemeinerung ist jedoch trivial, es müssen nur an den entsprechenden Stellen ρ und k_F durch ρ_p und k_p bzw. ρ_n und k_n ersetzt und dies bei der separaten Variation nach den Protonen- bzw. Neutronenwellenfunktionen berücksichtigt werden. Die Struktur der Potentiale ist jedoch identisch.

Literaturverzeichnis

- [Ai 91] J. Aichelin, Phys. Rep. **202** (1991) 233
- [An 83] N. Anantaraman, H. Toki und G. Bertsch, Nucl. Phys. **A398** (1983) 279
- [AS 65] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publ., New York (1965)
- [BCS57] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108** (1957) 1175
- [Be 77] G. Bertsch, J. Borysowicz, H. McMangus und W. G. Love, Nucl. Phys. **A284** (1977) 399
- [BG 88] G. F. Bertsch und S. Das Gupta, Phys. Rep. **160** (1988) 189
- [BM 90] R. Brockmann und R. Machleidt Phys. Rev. **C42** (1990) 1965
- [Br 55] K. A. Brückner, Phys. Rev. **97** (1955) 1353
- [BV 61] N. N. Bogolyubov und J. G. Valatin, Phys. Rev. **122** (1961) 1012
- [Ch 86] J. M. C. Chen, J. W. Clark, E. Krotscheck und R. A. Smith, Nucl. Phys. **A451** (1986) 509
- [Da 67] B. D. Day, Rev. Mod. Phys. **39** (1967) 719
- [DG 80] J. Decharge und D. Gogny, Phys. Rev **C21** (1980) 1568
- [DMS73] K. T. R. Davies, J. McCarthy und P. U. Sauer Phys. Rev. **C7** (1973) 943
- [Do 84] J. Dobaczewski, H. Flocard und J. Treiner, Nucl. Phys. **A422** (1984) 103

- [FL 95] C. Fuchs, H. Lenske und H. H. Wolter, Phys. Rev. **C52** (1995) 3043
- [FR 86] J. Friedrich und P.-G. Reinhardt, Phys. Rev. **C33** (1986) 335
- [GP 74] P. Grange und M. A. Preston, Nucl. Phys. **A219** (1974) 266
- [HJ 62] T. Hamada und I. D. Johnston, Nucl. Phys. **34** (1962) 382
- [JT 88] M. F. Jiang und T. T. S. Kuo, Nucl. Phys. **A481** (1988) 294
- [Ke 66] R. C. Kennedy, Phys. Rev. **144** (1966) 804
- [Ko 84] A. M. Kobos, B. A. Brown, R. Lindsay und G. R. Satchler, Nucl. Phys. **A425** (1984) 205
- [Kö 75] H. S. Köhler, Phys. Rev. **18C** (1975) 217
- [KO 93] D. T. Khoa und W. von Oertzen, Phys. Lett. **B304** (1993) 8
- [Ku89a] H. Kucharek, P. Ring und P. Schuck, Z. Phys. **A334** (1989) 119
- [Ku89b] H. Kucharek, P. Ring, P. Schuck, R. Bengtsson und M. Giro, Phys. Lett. **B216** (1989) 249
- [La 80] M. Lacombe, B. Loiseau, J. M. Richard, R. Vinh Mau, J. Cote, P. Pires und R. de Thourreil, Phys. Rev. **C21** (1980) 861
- [Mc 69] H. M. McGregor, R. A. Arndt und R. M. Wright, Phys. Rev. **169** (1969) 1149, Phys. Rev. **182** (1969) 1714
- [Ma 89] R. Machleidt, Adv. Nucl. Phys. **19** (1989) 189
- [MR 89] C. Mahaux und R. Sartor, Nucl. Phys. **A493** (1989) 157
- [Ne 70] J. W. Negele, Phys. Rev **C1** (1970) 1260
- [Ne 82] J. W. Negele, Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 913
- [Nu 95] *Nuclear Wallet Cards*, National Nuclear Data Center, Fifth Edition, July 1995
- [NV 72] J. W. Negele und D. Vautherin, Phys. Rev **C5** (1972) 1472
- [NV 75] J. W. Negele und D. Vautherin, Phys. Rev **C11** (1975) 1031
- [PB 75] M. A. Preston und R. K. Bhaduri, *Structure of the Nucleus*, Addison-Wesley, Inc. (1975)

- [Re 68] P. V. Reid, *Ann. Phys. (New York)* **50** (1968) 411
- [Re 91] P.-G. Reinhard in
K. Langanke, J. A. Maruhn und S. E. Koonin (Eds.), *Computational Nuclear Physics I*, Springer Verlag (1991) 28
- [Ro 70] D. J. Rowe, *Nuclear Collective Motion*, Methuen and Co. Ltd., London (1970)
- [RS 80] P. Ring und P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer Verlag, New York (1980)
- [Sv 79] J. V. Svenes, *Adv. Nucl. Phys.* **11** (1979) 179
- [Sa 79] G. R. Satchler und W. G. Love, *Phys. Rep.* **55** (1979) 183
- [SF 74] A. deShalit und H. Feshbach, *Theoretical Nuclear Physics Volume I: Nuclear Structure*, John Wiley & Sons, Inc. (1974)
- [Sk56a] T. H. R. Skyrme, *Nucl. Phys.* **9** (1959) 615
- [Sk56b] T. H. R. Skyrme, *Nucl. Phys.* **9** (1959) 635
- [SW 86] B. D. Serot und J. D. Walecka, *The Relativistic Nuclear Many-Body Problem*, *Adv. Nucl. Phys.* **16** (1986) 1
- [Ta 94] S. Takahara, N. Onishi und N. Tajima, *Phys. Lett.* **B331** (1994) 261
- [Tr 74] R. K. Tripathi, A. Faessler und H. Müller, *Phys. Rev.* **C10** (1974) 2080
- [VB 72] D. Vautherin und D. M. Brink, *Phys. Rev* **C5** (1972) 626
- [We 35] C. F. von Weizsäcker, *Z. Phys.* **69** (1935) 431
- [Yu 35] H. Yukawa, *Proc. Phys. Math. Soc. Japan* **17** (1935) 48

Danksagung

An erster Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. Ulrich Mosel für die Aufnahme in sein Institut und die interessante Themenstellung danken.

Mein besonderer Dank gilt Herrn PD Dr. Horst Lenske für die engagierte Betreuung und sein Interesse an meiner Arbeit. Ich möchte ihm auch für das Durchsehen meines Manuskriptes danken.

Ich danke allen Mitgliedern des Institutes für die angenehme Arbeitsatmosphäre und ihre Hilfsbereitschaft, insbesondere der Besatzung des Partyzimmers und dessen regelmäßigen Besuchern.

Auch dem für die Betreuung der Computer zuständigen Team möchte ich für ihre Hilfe bei allen aufgetretenen Rechnerproblemen danken.

Elke Jung und Christiane Pausch danke ich für ihre administrative Hilfe.

Besonderer Dank gebührt meinen Eltern für ihre Unterstützung während meines gesamten Studiums.