

Untersuchung und Weiterentwicklung eines relativistischen Punktkopp- lungsmodells zur Anwendung in der Kernstrukturphysik

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik
der Johann Wolfgang Goethe–Universität
in Frankfurt am Main

von
Thomas Bürvenich
aus Langen

Frankfurt am Main, 2001

(D F 1)

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	9
1 Quantenmechanik, Vielkörpertheorie und Quantenfeldtheorie	13
1.1 Quantenmechanik	13
1.1.1 Axiomatische Formulierung der Quantenmechanik	13
1.1.2 Holismus und EPR Korrelationen	14
1.1.3 Einführung des Begriffs <i>Elementarsystem</i>	15
1.2 Relativistische Wellengleichungen	15
1.2.1 Die Klein-Gordon-Gleichung	16
1.2.2 Die Proca-Gleichungen	16
1.2.3 Die Maxwell-Gleichungen	17
1.2.4 Die Dirac-Gleichung	17
1.3 Die Formulierung des Vielkörperproblems	18
1.3.1 Zweite Quantisierung und der Fock-Raum	18
1.3.2 Darstellung von Operatoren in zweiter Quantisierung	18
1.3.3 Slater-Determinanten	19
1.4 Feldtheorie	19
1.4.1 Kanonische Quantisierung	19
1.4.2 Quantisierung mit Pfadintegralen	21
1.5 Zur Interpretation des Formalismus	22
2 Das Punktkopplungsmodell: Formalismus	23
2.1 Beschreibung von Kernen mit relativistischen Mean-Field-Modellen	23
2.1.1 Rechtfertigung effektiver Modelle	23
2.1.2 Erste Ansätze: das Duerr-Teller und das Walecka-Modell	24
2.2 Modelle mit endlicher Reichweite: RMF-FR	25
2.2.1 Der Ansatz	25
2.2.2 Terme mit ungerader Parität	26
2.2.3 Die Lagrange-Dichte	27
2.2.4 Die Bewegungsgleichungen	28
2.2.5 Parametersätze für das RMF-FR-Modell	29
2.3 Punktkopplungsmodelle: RMF-PC	30
2.3.1 Die Punktkopplungsnaherung	30
2.3.2 Eine Parametrisierung der T-Matrix	31
2.3.3 Motivation der Terme	32
2.4 Die Lagrange-Dichte	33
2.5 Die Näherungen	33
2.5.1 Die Mean-Field Näherung	33

2.5.2	Die No-Sea Näherung	34
2.5.3	Weitere Näherungen	34
2.5.4	Das Verhalten der Terme unter Zeitumkehrinvarianz und Raumspiegelung	35
2.6	Die Bewegungsgleichungen in Hartree-Näherung	36
2.7	Die Bewegungsgleichungen in Hartree-Fock-Näherung	37
2.7.1	Fierz-Transformationen	37
2.7.2	Transformation auf Quasiteilchen	38
2.7.3	Erwartungswerte mit Austauschtermen	38
2.7.4	Die Terme mit Ableitungen	39
2.8	Erweiterungen des Hartree-Modells	40
2.8.1	Einführung eines nichtlinearen isovektoriell-vektoriellen Terms	40
2.8.2	Einführung eines linearen isovektoriell-skalaren Terms	40
2.8.3	Eine Vektor-Ableitungs-Kopplung	40
2.8.4	Der Coulomb-Austauschterm in der Slater-Näherung	41
2.8.5	Gemischte Terme höherer Ordnung	41
2.8.6	Terme mit Ableitungen höherer Ordnungen und Hybrid-Modelle	41
2.8.7	Produkte isoskalarer und isovektorieller Terme	42
2.9	Zusammenhang mit Dichtefunktionaltheorien	42
2.10	Der nichtrelativistische Grenzfall des Modells	43
2.11	Die Frage nach Dynamik	44
3	Paarkorrelationen	45
3.1	Superfluidität in Kernen	45
3.2	Der BCS-Formalismus	46
3.3	Transformation auf Quasiteilchen	46
3.4	Constant-Strength-Pairing	47
3.5	Constant-Gap-Pairing	48
3.6	δ -Kraft-Pairing	48
3.6.1	Der Energie-Cutoff	49
3.6.2	Dichteabhängiges δ -Kraft-Pairing	50
3.7	Relativistic Hartree-Bogolyubov	50
4	Observablen	53
4.1	Energetische Observablen	53
4.2	Observablen des Formfaktors	54
4.2.1	Der Ladungsradius	54
4.2.2	Der Diffraktionsradius	54
4.2.3	Die Oberflächendicke	55
4.3	Observablen zur Beschreibung der Deformation des Kerns	55
4.4	Observablen der Paarkraft	56
5	Numerische Methoden	57
5.1	Der gedämpfte Gradientenschritt	57
5.2	Konvergenzkriterien	58
5.3	Zwangsbedingungen	58
5.3.1	Die Implementation	58
5.3.2	Zwangsbedingungen mit Multipolmomenten	59
5.3.3	Diskussion der Methode	60
5.3.4	Andere Arten von Zwangsbedingungen	61

5.4	Die Programme	61
5.4.1	Die Mean-Field-Programme	61
5.4.2	Das Programm zur Berechnung von Kernmaterie	62
5.4.3	Das Fitprogramm	62
5.4.4	Das Perl-Skript zum Testen einer Parameteranpassung	63
6	Das Fitten der Modell-Parameter	65
6.1	Globale versus lokale Optimierung	65
6.2	Die Philosophie des Fittens	65
6.3	Die Methode kleinster mittlerer Quadrate	66
6.4	Klassifizierung von Fitalgorithmen	66
6.5	Die Vorstellung der Fitalgorithmen	66
6.5.1	Der Gradientenschritt	66
6.5.2	Die quadratische Modellierung der Umgebung des Minimums	67
6.5.3	Die Levenberg-Marquardt-Methode	68
6.5.4	Der Bevington-Curved-Step	68
6.5.5	Unkorrelierte und Korrelierte Fehler	69
6.5.6	Die Gittersuche	69
6.5.7	Die Methode nach Powell	70
6.5.8	Bemerkungen zu den direkten Methoden	72
6.5.9	Monte-Carlo basierte Methoden	72
6.6	Teststudien	75
6.6.1	Eine einfache Testfunktion	75
6.6.2	Endliche Kerne	75
6.7	Die Fitstrategien	77
6.7.1	Endliche Kerne	77
7	Das Punktkopplungsmodell: Parametersätze	81
7.1	Kräfte mit weicher Zustandsgleichung in symmetrischer Kernmaterie	81
7.2	Kräfte für endliche Kerne	83
7.2.1	Die Kraft PC-LA	83
7.2.2	Die erste neue Kraft: PC-Fx	84
7.2.3	Die Kraft PC-F1	85
7.2.4	Die gefitteten Paarkraftstärken	86
7.2.5	Beschreibung der angefitteten Kerne mit PC-F1	86
7.2.6	Parameterkorrelationen in PC-F1	86
7.3	Parametersätze für die erweiterten RMF-PC Modelle	89
7.3.1	Ein linearer Term in der isovektoriellen skalaren Dichte: PC-F2	89
7.3.2	Ein nichtlinearer Term in der isovektoriellen-vektoriellen Dichte: PC-F3	90
7.3.3	Ein Satz mit vier Ableitungstermen: PC-F4	90
7.3.4	Reduzierung der Parameter und Zusammenhang mit Walecka-artigen Modellen	92
7.3.5	Kräfte mit Coulomb-Austauschterm	95
8	Tests des Punktkopplungsmodells	97
8.1	Testkriterien und Auswahl an Observablen	97
8.2	Symmetrische, unendliche Kernmaterie	97
8.3	Neutronenmaterie	101
8.4	Kernmaterie mit beliebiger Asymmetrie	102
8.5	Energetische Observablen	105

8.5.1	Sphärische Rechnungen	106
8.5.2	Deformierte Rechnungen	107
8.6	Observablen der Schalenstruktur	109
8.6.1	Separationsenergien	109
8.6.2	Spin-Bahn-Aufspaltungen	111
8.6.3	Einteilchenspektren	113
8.7	Observablen der Dichteverteilung	115
8.7.1	Radien und Oberflächendicken	115
8.7.2	Dichteprofile	115
8.8	Deformationseigenschaften	117
8.8.1	Deformationsenergien von Magnesium-Isotopen	117
8.8.2	Die Spaltbarriere von ^{240}Pu	118
8.8.3	Grundzustandsdeformationen leichter und schwerer Kerne	119
9	Extrapolationen zu überschweren Elementen	123
9.1	Die Extrapolationsfähigkeit des Modells	123
9.2	Überschwere Elemente	123
9.2.1	Frühere Rechnungen	124
9.2.2	Schalenstruktur	125
9.2.3	Spaltbarrieren	132
10	QCD Scaling	137
10.1	Der Zusammenhang von effektiven Modellen mit der Quantenchromodynamik	137
10.2	Naive Dimensionale Analyse	137
10.3	Die skalierte Lagrange-Dichte	138
10.4	Die skalierten Parameter	138
10.5	Schlußfolgerungen	139
	Zusammenfassung	141
A	Die Bewegungsgleichungen in verschiedenen Symmetrien	143
A.1	Sphärische Symmetrie	143
A.2	Axiale Symmetrie	144
B	Fierz-Transformationen	147
B.1	Fierz-Transformationen für Isospinoren	147
B.1.1	4-Fermionen-Terme	147
B.1.2	6-Fermionen-Terme	147
B.1.3	8-Fermionen-Terme	147
B.2	Fierz-Transformationen für Dirac-Spinoren	148
B.2.1	4-Fermionen-Terme	148
B.2.2	6-Fermionen-Terme	148
B.2.3	8-Fermionen-Terme	148
C	Parametersätze mit Coulomb-Austauschterm in Slater-Näherung	151
	Literaturverzeichnis	153
	Danksagung	161

Einleitung

Die Situation in der Kernstrukturphysik

”The map is not the territory.“
(Alford Korzybski)

Dieses Zitat beschreibt gut die Situation, in der sich die theoretische Kernstruktur-Physik befindet¹. Sie befasst sich mit der Beschreibung von Grund- und niedrigen Anregungszuständen von Atomkernen durch geeignete Modelle und versucht so, eine möglichst genaue Karte von den Kernen zu entwerfen. Während sich Experimentalphysiker mit immer aufwendigeren Experimenten in das Gebiet begeben, entwerfen die Theoretiker Landkarten (gemeint sind die Kernmodelle), die möglichst genau die Landschaft beschreiben. Eine Karte ist erfolgreich, wenn möglichst viele Aspekte der Landschaft beschrieben werden. Wird die Beschreibung in gewissen Bereichen der Landschaft schlechter, ist die Karte (das theoretische Modell) dort nicht mehr anwendbar. Die mikroskopischen selbstkonsistenten Modelle, um die es in dieser Arbeit geht, erheben den Anspruch, in akzeptablem Rahmen für die gesamte Landschaft der Nuklidkarte gültig zu sein.

Die Modelle sind aber mehr als eine Karte: sie erlauben den Blick in unerforschtes Gelände, man kann mit ihnen *extrapolieren*. Man muss hier jedoch vorsichtig sein und Kriterien finden, um die Extrapolationsfähigkeit beurteilen zu können. Allgemeiner noch ist die Frage, wie und nach welchen Gesichtspunkten ein mikroskopisches Modell zu beurteilen ist. Darum wird es unter anderem in dieser Arbeit gehen.

Der Atomkern, wie er sich nach heutigem Kenntnisstand darstellt, ist ein System aus wechselwirkenden Nukleonen, den Protonen und Neutronen, die wiederum aus Quarks zusammengesetzt sind. Vermittelt wird diese Wechselwirkung durch die starke Kernkraft. Übertragungsteilchen sind nach der (nicht-abelschen) Theorie für die starke Wechselwirkung, der *Quantenchromodynamik* (QCD), die Gluonen. Quarks und Gluonen besitzen eine Eigenschaft, die man als *Farbe* bezeichnet. Es sind in der Natur drei Farben (und deren Antifarben) realisiert. Beobachtbar sind nur farblose Objekte.

Ein Atomkern ist ein Vielkörpersystem, die Anzahl der Nukleonen kann zwischen zwei und einigen Hundert betragen. Nun liegt aber gerade diese Anzahl an Teilchen in einem kritischen Bereich: Es sind zu viele Nukleonen², als dass man das System durch Koordiantentransformation zu einem effektiven Einkörperproblem machen und damit exakt lösen könnte: Es sind andererseits zu wenige, um statistische Methoden der Physik anwenden zu können. Der Ansatz *par excellence* ist natürlich die Aufstellung der Lagrangedichte \mathcal{L} der QCD für ein System aus Quarks und Gluonen und die Beschreibung des Atomkerns als gebundenes Multi-Quark-System. Dieses Ziel zu erreichen ist eine enorme Herausforderung, da der Niederenergie-Bereich der QCD das Gebiet ist, wo störungstheoretische Methoden fragwürdig oder unmöglich sind (die Kopplungskonstanten sind deutlich größer als Eins). Demzufolge müssten für die Lösung des Problems nichtperturbative Methoden wie etwa die Gittereichtheorie herangezogen werden. Die Quantenchromodynamik gibt uns auch heute noch

¹Allgemeiner gilt dies auch für die gesamte Naturwissenschaft.

²Bereits das mechanische Dreikörperproblem ist nicht mehr allgemein exakt lösbar.

etliche Fragen auf, z.B. warum Quarks jeweils nur in gebundenen Systemen auftreten (die Frage des Quark-Einschlusses oder *confinement*). Die nicht-abelsche Struktur der Farb-SU(3), die der QCD zugrunde liegt, sorgt für ein Verhalten der Kopplung, das als *asymptotische Freiheit* bezeichnet wird: für große Impulsüberträge wird die Kopplung geringer und geht gegen Null, während sie bei schwachen Impulsen theoretisch beliebig groß werden kann, was zu dem erwähnten Quark-Einschluß führt. Damit in Zusammenhang steht auch die Frage, ob ein Materiezustand möglich ist, bei dem dieser Einschluss aufgehoben wird. Dieser als *Quark-Gluon-Plasma* bezeichnete Zustand der Materie sollte bei hohen Dichten und Temperaturen auftreten und könnte kurz nach dem Urknall existiert haben.

Das geschilderte Problem, also die Beschreibung des Atomkerns mit Quarks und Gluonen als elementaren Freiheitsgraden, ist heutzutage weder analytisch noch mit modernen numerischen Methoden handhabbar. Um dennoch eine Beschreibung des Atomkerns zu ermöglichen, werden in der Kernstruktur *effektive Modelle* verwendet. Die historisch gesehen ersten Modelle, z.B. die Bethe-Weizsäcker Massenformel bzw. das Tröpfchenmodell [Wei35, Bet36], modellieren den Kern als geladenen Flüssigkeitstropfen. Andere *kollektive Modelle* parametrisieren die Kernoberfläche durch Deformationsparameter. Sie erlauben die Modellierung kollektiver Anregungszustände des Kerns: es können Vibrationen, Rotationen sowie Kopplungen zwischen ihnen beschrieben werden [Fae62, Fae64, Fae65].

Ein anderes Ziel soll mit *mikroskopischen Modellen* erreicht werden. Der erste Schritt zu einer mikroskopischen Beschreibung des Kerns auf der Basis von wechselwirkenden Nukleonen geschah durch Einführung der phänomenologischen Schalenmodelle. Dabei wurde die experimentelle Erkenntnis genutzt, dass sich Nukleonen in mancher Hinsicht als voneinander unabhängige, nicht wechselwirkende Teilchen in einem gemeinsamen, mittleren Potenzial beschreiben lassen. Dafür wurden unterschiedliche Parametrisierungen entworfen, z.B. Kasten-Potenzial, Oszillator-Potenzial oder die Parametrisierung nach Woods-Saxon. Die Wellenfunktionen der Nukleonen werden analytisch bzw. numerisch in diesem Potenzial berechnet und die Nukleonen in diese möglichen Einteilchenzustände gemäß dem Pauli-Prinzip gefüllt. Diese Modelle konnten erfolgreich die Schalenstruktur von Atomkernen beschreiben: Essentiell wichtig dafür erwies sich die Einführung einer starken Spin-Bahn-Kraft. Die quantitative Vorhersage von deformierten Grundzuständen und Spaltbarrieren gelang jedoch erst mit Hilfe der *makroskopisch-mikroskopischen* Methode, bei der der Trend der Bindungsenergie mit Z und N durch ein Tropfenmodell berechnet wird und aus einem phänomenologischen Schalenmodell mit Hilfe der *Strutinski*-Methode die Schalenkorrekturenergie extrahiert wird. Die Summe von beiden Anteilen ergibt gerade die Bindungsenergie des Kerns. Das *Zweizentrenschalenmodell* erweiterte das Konzept auf die Möglichkeit, die Spaltung des Kerns vom Grundzustand bis zur vollständigen Separation in zwei getrennte Fragmente zu beschreiben [Mar72]. Heutzutage versteht man unter Schalenmodellrechnungen Rechnungen, in denen die Wellenfunktion für die Valenznukleonen bzw. bei kleinen Kernen die Gesamtwellenfunktion durch eine Entwicklung in ein vollständiges Basissystem und eine Diagonalisierung des Hamilton-Operators in der gewählten Basis quasi exakt berechnet wird. Für die großen numerischen Berechnungen werden oft Monte-Carlo-Methoden verwendet, die die exakte Diagonalisierung umgehen. Die Wechselwirkungen bei diesen Modellen sind oftmals relativ einfache Parametrisierungen der Nukleon-Nukleon-(NN)-Wechselwirkung.

Mikroskopische selbstkonsistente Modelle haben meistens als Ansatz für die Wellenfunktion des Kerns nur eine einzelne Slater-Determinante, deren Einteilchenwellenfunktionen durch ein Variationsprinzip so bestimmt werden, dass die Energie des Systems minimal wird. Diese Näherung wird aufgewogen durch die Form der effektiven Wechselwirkung, die eine Reihe der vernachlässigten Korrelationen und Effekte absorbiert.

Der wesentliche Unterschied zwischen den frühen Schalen- und Kollektivmodellen einerseits und den modernen selbstkonsistenten Kernmodellen andererseits, wie es auch das in dieser Arbeit untersuchte relativistische Punktkopplungsmodell darstellt, ist, dass in selbstkonsistenten Kernmodellen keine Einschränkungen an das Kern-Potenzial und die Dichteverteilung des Atomkerns gestellt wer-

den. Das Potenzial wird aus den Wellenfunktionen selbstkonsistent berechnet, aus dem wiederum die Wellenfunktionen bestimmt werden. Diese Vorschrift wird iteriert, bis Konvergenz erzielt ist. Um Potenzialenergieflächen zu berechnen ist es erforderlich, die Energie des Kerns in verschiedenen Konfigurationen zu berechnen. Um dies zu erreichen wird der Kern durch *Zwangsbedingungen* in die gewünschte Konfiguration gebracht.

In dieser Arbeit wird ein relativistisches, mikroskopisches, selbstkonsistentes Modell beschrieben: das Punktkopplungsmodell. Während relativistische Modelle, die durch den Austausch von Mesonen die Kernkraft parametrisieren, in der Vergangenheit intensiv untersucht und erfolgreich auf Probleme der Kernstruktur angewendet wurden, gab es ähnliche Untersuchungen für das Punktkopplungsmodell in dieser Form bisher nicht. Die entstandene Lücke soll durch die vorliegende Arbeit gefüllt werden. Frühere Anwendungen umfassen die Berechnung von Grundzuständen endlicher Kerne in sphärischer Symmetrie [Nik92], die Bedeutung von QCD-Scaling [Fri96] sowie die Untersuchung der Pseudospin-Symmetrie [Gin98].

Im Gegensatz zu dem herkömmlichen Relativistic-Mean-Field-(RMF)-Modell besitzt das relativistische Punktkopplungsmodell zusätzlich zu den nukleonischen keine mesonischen Freiheitsgrade. Die Potentiale bestehen aus Dichten der Nukleonen bzw. deren Ableitungen. Diese Eigenschaft macht es nichtrelativistischen Skyrme-Hartree-Fock-(SHF)-Rechnungen ähnlich. Mit Hilfe des relativistischen Punktkopplungsmodells ist es möglich, den Einfluss unterschiedlicher Aspekte von Mean-Field-Modellen auf die Vorhersagen von Observablen zu studieren. Im Vergleich zu RMF-Modellen mit Mesonenaustausch lässt sich die Bedeutung von endlicher Reichweite untersuchen. Der Vergleich mit SHF-Rechnungen erlaubt es, die Wichtigkeit einer relativistischen Formulierung zu überprüfen. Formal lassen sich dabei im nichtrelativistischen Grenzfall des Punktkopplungsmodells Schlüsse bezüglich der Struktur der unterschiedlichen Ansätze und Relevanz ihrer spezifischen Terme ziehen.

Wir wollen das RMF-Modell, das die Kernkraft durch den Austausch von Mesonen parametrisiert, als RMF-FR-Modell bezeichnen (FR steht für *finite range*). Das Punktkopplungsmodell nennen wir RMF-PC-Modell (PC steht für *point coupling*). Beide Modelle sind relativistische Modelle, die in der Mean-Field-Näherung betrieben werden, weshalb die Bezeichnung RMF-Modell für beide Modelle gerechtfertigt ist.

Die untersuchten Fragestellungen

Da das relativistische Punktkopplungsmodell ein relativ neuer Ansatz für Anwendungen in der Kernstruktur ist ³, ergeben sich zu diesem Modell folgende Untersuchungsschwerpunkte:

- Erlaubt die Struktur des Modells eine mikroskopische Beschreibung von Grundzuständen von Atomkernen auf dem Niveau moderner Mean-Field-Modelle?
- Was können wir im Vergleich zum RMF-FR-Modell und der SHF-Methode über den Einfluss endlicher Reichweite bzw. relativistischer Dynamik lernen?
- Was sind die essentiellen Bestandteile einer Parametrisierung der effektiven Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung in Atomkernen?
- Können wir etwas über den Zusammenhang von effektiven Kernstruktur-Modellen für den Niederenergiebereich der QCD mit der Struktur und den Symmetrien der Quantenchromodynamik lernen?

³Seine generische Struktur ist dagegen nicht neu: wir finden sie beim Nambu-Jona-Lasinio-Modell und in der Fermi-theorie der schwachen Wechselwirkung.

- Ergeben sich Perspektiven für zukünftige Verbesserungen der Mean-Field-Modelle, bzw. vorher noch: wo sind ihre Schwächen?

Alle diese Fragen konnten im Rahmen der Arbeit beantwortet werden. Es tauchen dabei noch weitere Fragen auf, insbesondere Detailfragen zu den Modellen, die noch auf eine Beantwortung warten.

Gliederung der Arbeit

Das erste Kapitel enthält die physikalischen Grundlagen zu selbstkonsistenten mikroskopischen Kernmodellen, beginnend bei der axiomatischen Formulierung der Quantenmechanik bis hin zur zweiten Quantisierung und Formulierung der Quantenfeldtheorie. Die ausführliche und vielleicht ungewöhnlich erscheinende Behandlung der Quantenmechanik und später der Quantenfeldtheorie ist bewusst so gestaltet, um die folgenden Beschreibungen der Modelle in den großen Zusammenhang einzubetten.

Im darauf folgenden Kapitel werden das RMF-FR- und das RMF-PC-Modell vorgestellt und detailliert beschrieben. Dabei wird insbesondere der Zusammenhang zwischen beiden Modellen berücksichtigt. Das Punktkopplungs-Modell wird in der Hartree-Näherung formuliert, Erweiterungen des Ansatzes und die Formulierung des Modells in der Hartree-Fock-Näherung werden vorgestellt.

Das dritte Kapitel enthält die Beschreibung der Paarkraft im BCS-Formalismus. Nach zwei einfachen Vorschriften werden moderne Verfahren beschrieben, die im Rahmen dieser Arbeit in den numerischen Rechnungen verwendet werden.

Im vierten Kapitel werden die wichtigsten Observablen diskutiert, die sich aus den Rechnungen der RMF-Modelle extrahieren lassen. Dies betrifft Größen, die mit der Bindungsenergie des Kerns zusammenhängen sowie Observablen des Formfaktors und der Paarkraft.

Die numerischen Methoden, die zur Lösung der Bewegungsgleichungen der RMF-Modelle auf dem Computer verwendet werden, werden in Kapitel 5 diskutiert. Es folgt eine kurze Beschreibung der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten und entwickelten Programme.

Im sechsten Kapitel werden die Fit-Algorithmen, die zur Bestimmung der Kopplungskonstanten des Modells verwendet werden, dargestellt und anhand einiger einfacher Systeme demonstriert. Es wird die Fitstrategie, d.h. die Auswahl von Observablen, die zur Erstellung der in dieser Arbeit erschaffenen Parametersätze verwendet werden, diskutiert.

Kapitel 7 enthält die Parametersätze für das Punktkopplungsmodell, die sich aus den Optimierungen herauskristallisierten, sowie eine Analyse ihrer Qualität und physikalischen Relevanz.

Die Anwendbarkeit des Punktkopplungsmodells auf Fragestellungen der Kernstrukturphysik wird im achten Kapitel ausführlich durch Betrachtung einer Vielzahl nukleonischer Systeme und Observablen getestet und dokumentiert. Dabei werden Vergleiche zu experimentellen Daten und anderen Mean-Field-Modellen, insbesondere aber dem RMF-FR Modell mit zwei ausgewählten Parametrisierungen, angestellt.

Das darauf folgende neunte Kapitel dokumentiert Extrapolationen des Modells zu überschweren Kernen. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf der Vorhersage magischer Zahlen und Spaltbarrieren von zwei ausgewählten Kernen.

In Kapitel 10 untersuchen wir das Kriterium der Natürlichkeit mit Hilfe der *naiven dimensional analysis* und seine Anwendbarkeit auf das Punktkopplungsmodell.

Die Zusammenfassung rundet die Arbeit ab.

Kapitel 1

Quantenmechanik, Vielkörpertheorie und Quantenfeldtheorie

”Die ’Bahn’ des Elektrons entsteht erst dadurch, dass wir sie beobachten ...“
(W. Heisenberg)

”Kein elementares Phänomen ist ein reales Phänomen, bis es ein beobachtetes Phänomen geworden ist.“
(John. A. Wheeler)

1.1 Quantenmechanik

Die für die folgenden Untersuchungen grundlegende und zugleich empirisch am besten getestete Theorie ist die Quantenmechanik. Sie beschreibt die Dynamik mikroskopischer Objekte und ihrer Wechselwirkungen. Die ursprüngliche Formulierung der Quantenmechanik gilt streng genommen nur für von ihrer Umgebung vollständig isolierte Systeme bei Temperatur Null. Der Formalismus wurde jedoch auf offene Systeme und endliche Temperaturen erweitert.

Wir wollen im Folgenden die Grundsätze der nichtrelativistischen Quantenmechanik in axiomatischer Form niederschreiben. Dabei orientieren wir uns an den Referenzen [Jel93, Pen95, Bjo64].

1.1.1 Axiomatische Formulierung der Quantenmechanik

Basissatz 1: Ein eigentlicher Zustand eines quantenmechanischen Systems wird beschrieben durch einen Vektor $|\psi\rangle$ im Hilbertraum.

Basissatz 2: Unitäre Entwicklung U Die Dynamik des quantenmechanischen Systems ist gegeben durch den unitären Zeitentwicklungsoperator $U(t - t_0)$, der der Gleichung

$$i\hbar\partial_t U(t - t_0) = \hat{H}U(t - t_0) \quad (1.1)$$

genügt. Dabei ist \hat{H} der Hamiltonoperator, der das System charakterisiert. Er lässt sich schreiben als

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (1.2)$$

dabei ist \hat{T} der Operator der kinetischen und \hat{V} der Operator der potentiellen Energie. Für den Zustand des Systems zur Zeit t folgt daraus

$$|\psi(t)\rangle = U(t - t_0)|\psi(t_0)\rangle. \quad (1.3)$$

Basissatz 3: Observablen werden beschrieben durch hermitesche Operatoren im Hilbertraum.

Basissatz 4: Reduktion des Zustandes R Bei der Messung R der Observablen \hat{A} wird der Zustand reduziert auf eine Eigenfunktion des Operators \hat{A} . Die möglichen Messwerte entsprechen dabei dem Spektrum von \hat{A} . Die Wahrscheinlichkeit p_n für einen bestimmten Messwert a_n ist dabei gegeben durch den Erwartungswert des Projektors \hat{P}_n auf den Eigenzustand, der zu a_n korrespondiert:

$$p_n = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle. \quad (1.4)$$

Die Minimalinterpretation und der Messprozess

In Basissatz 4 haben wir bereits die Minimalinterpretation der Quantenmechanik kodiert. Sie entspricht der Vorschrift, wie aus der Theorie Werte zu gewinnen sind, die mit den möglichen Messwerten verglichen werden können. Möchte man z.B. den Ort eines Teilchens bestimmen, so entspricht

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \psi | \hat{P}_{\vec{r}} | \psi \rangle = \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle = |\psi|^2 \quad (1.5)$$

gerade der Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auffinden des Teilchens am Ort \vec{r} . Die Messung an einem quantenmechanischen System (R) unterbricht dabei die unitäre und reversible zeitliche Entwicklung des Systems.

Die Beschreibung und Interpretation dieses Messprozesses ist immer noch Gegenstand zahlreicher physikalischer und auch philosophischer Diskussionen. Besondere Schwierigkeit macht der sogenannte *Kollaps der Wellenfunktion*, d.h. der Übergang des superponierten Zustandes in einen Eigenzustand des zur Messung korrespondierenden Operators (der oben als R gekennzeichnete Vorgang). Eine mögliche Erklärungsweise besteht in dem Phänomen der *Dekohärenz*, das durch die Wechselwirkung des Systems, das gemessen werden soll, mit seiner Umwelt entsteht. Bei dieser Interaktion mit (quasi) unendlich vielen Freiheitsgraden entwickelt sich das System, das durch eine Dichtematrix beschrieben werden muss, aus einer kohärenten Überlagerung von quantenmechanischen Zuständen in eine inkohärente Überlagerung. Diese Formulierung basiert jedoch zu einem großen Teil auf *common sense* und ist bisher nicht exakt durchgeführt worden.

Physiker wie Sir Roger Penrose halten im Gegensatz dazu den Messprozess für einen realen physikalischen Vorgang, dessen Beschreibung im Rahmen einer Theorie der Quantengravitation [Bae94] möglich sein könnte [Pen95].

1.1.2 Holismus und EPR Korrelationen

Die Quantenmechanik sagt – bei geeigneter Präparierung – Korrelationen zwischen Teilchen voraus, die sich in beliebiger räumlicher Entfernung voneinander befinden können [Ein35]. Diese sogenannten *EPR*-Korrelationen widersprechen nicht den Prinzipien der speziellen Relativitätstheorie, da durch sie keine Information übertragen werden kann. Die Korrelationen, die der Quantenmechanik eine holistische Natur geben, finden immer mehr Bestätigung auf experimenteller Ebene [Asp]. Erst in jüngster Zeit haben neue Experimente zur Verschränkung von quantenmechanischen Systemen [Row01, Kwi01] gezeigt, dass die experimentelle Verletzung der Bellschen Ungleichungen, welches der Beweis für Korrelationen darstellt, die nicht auf verborgenen Variablen beruhen können, nicht durch experimentelle Ungenauigkeit zustande kommt¹.

Die EPR-Korrelationen widersprechen damit nicht den Experimenten, sondern lediglich einem Realitätsverständnis, wie es von Einstein, Podolski und Rosen in deren bekannter Veröffentlichung

¹Eine Kritik an den Experimenten von Aspect et al. war, dass nicht alle erzeugten Photonenpaare detektiert werden, so dass die Verletzung der Bellschen Ungleichungen zwar in der detektierten Untermenge gegeben war, nicht aber notwendigerweise im gesamten Ensemble.

formuliert wurde. Für manche Autoren ist gerade dieser holistische Aspekt das wesentlich Neue an der Quantenmechanik. So bezeichnet Thomas Görnitz [Goe99] die Quantenmechanik als *Physik der Beziehungen* im Gegensatz zur klassischen Mechanik, die er als *Physik der Objekte* kennzeichnet. EPR-Korrelationen finden in theoretischen Untersuchungen Anwendung z.B. in der *Quantenkryptographie* [Bou00].

Diese Sichtweise der Quantenmechanik führt uns zu einer angemessenen Definition der Systeme, die Hauptgegenstand quantenmechanischer Untersuchungen sind. Der Begriff des Teilchens wird von dieser Stelle an fallengelassen und durch ein adäquateres Wort ersetzt, dessen Definition und Rechtfertigung nun folgen.

1.1.3 Einführung des Begriffs *Elementarsystem*

Definition

Unter *Elementarsystemen* [Pri00] verstehen wir im Folgenden Systeme, die durch quantenmechanische Zustandsgleichungen beschrieben werden und deren vollständige Beschreibung im Rahmen der Quantenmechanik durch den Zustand $|\psi\rangle$ gegeben ist.

Begründung

Der Begriff des *Teilchens*, wie er in den meisten Arbeiten verwendet wird, hat seine begriffliche Begründung in der klassischen Mechanik. Mit *Teilchen* und insbesondere *Punktteilchen* wird dort ein aus der Erfahrung abstrahiertes *Objekt* bezeichnet, dem als intrinsische Eigenschaften nur Masse und Ladung zukommen. Zudem besteht seine vollständige Beschreibung in der Kenntnis seiner Trajektorie $\vec{r}(t)$. Diesen Begriff für quantenmechanische Systeme zu verwenden ist in zweierlei Hinsicht problematisch:

Erstens ist der Begriff *Objekt* auf quantenmechanische Systeme nicht mehr ohne weiteres anwendbar, da eine konsistente Beschreibung nur noch im Zusammenhang mit ihrer Wechselwirkung mit anderen Systemen gegeben werden kann.

Zweitens überwindet die Quantenmechanik bzw. Quantenfeldtheorie den *Welle-Teilchen-Dualismus*, und der gänzlich anderen Natur von quantenmechanischen Systemen wird durch die Assoziationen, die mit dem Begriff des Teilchens einhergehen, nicht korrekt Rechnung getragen.

1.2 Relativistische Wellengleichungen

Die Schrödinger-Gleichung entspricht einer nicht-relativistischen Formulierung der Quantenmechanik für spinlose Elementarsysteme². Sie ist invariant unter Galilei-Transformationen, Rotationen und Translationen, wenn es der Hamilton-Operator ist.

Die Forderung nach Lorentz-Invarianz einer quantenmechanischen Theorie erfordert zusätzlich zu den oben formulierten Basissätzen neue bzw. veränderte Bedingungen an die quantenmechanischen Bewegungsgleichungen für Elementarsysteme. So fordert eine kovariante Formulierung, dass Raum- und Zeitkoordinaten in gleicher Ordnung auftreten. Weiterhin muss die Theorie in der Lage sein, Phänomene zu beschreiben, die bei relativistischen Energien auftreten können. Dazu gehören z.B. Paarerzeugung und Vakuumpolarisation.

Im folgenden Abschnitt wollen wir einige der wichtigsten relativistischen Wellengleichungen diskutieren. Alle oben gestellten Forderungen werden erst durch die Quantenfeldtheorie erfüllt, die später in diesem Kapitel kurz erläutert wird.

²Der Spin von Fermionen kann durch eine Erweiterung zur *Pauli-Gleichung* beschrieben werden.

1.2.1 Die Klein-Gordon-Gleichung

Die *Klein-Gordon-Gleichung* war historisch der erste Versuch, eine relativistische Wellengleichung für Elementarsysteme endlicher Masse aufzustellen. Sie entsteht aus der Übersetzung der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (1.6)$$

in Operatoranschreibweise ($E \rightarrow i\hbar\partial_t, \vec{p} \rightarrow i\hbar\vec{\nabla}$). Die freie Gleichung in Ortsraumdarstellung lautet

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(\vec{r}, t) = 0. \quad (1.7)$$

Räumliche und zeitliche Ableitungen treten in zweiter Ordnung auf. Durch das Auftreten zweiter Ableitungen ist diese Gleichung allerdings keine Prozessgleichung³, wie es z.B. die Schrödinger-Gleichung oder die Hamiltonschen Gleichungen der Mechanik sind. Auch ist $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ nicht mehr positiv definit⁴, was eine Interpretation als Wahrscheinlichkeitsdichte unmöglich macht. Es treten zwei Klassen von freien Lösungen auf, die zu verschiedenem Vorzeichen der Energie korrespondieren:

$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (1.8)$$

Diese sind aber nicht wirklich Lösungen negativer Energie. Berechnet man ihre Energie mit Hilfe des Energie-Impuls-Tensors, so erhält man auch für diese Lösungen positive Energien [Gre97]. Aus den oben genannten Gründen wurde diese Gleichung zeitweise verworfen. Später erkannte man, dass man mit dieser Gleichung durch ein reales Feld neutrale sowie durch ein komplexes Feld geladene spinlose Elementarsysteme (wie etwa skalare Mesonen) beschreiben kann.

1.2.2 Die Proca-Gleichungen

Die Proca-Gleichungen gestatten es, im Rahmen der relativistischen Quantenmechanik massebehaftete Elementarsysteme mit Spin 1 zu beschreiben, wie z.B. Vektormesonen. Sie werden durch einen reellen Vierervektor A^μ repräsentiert, dessen Komponenten den Gleichungen

$$\square A^\mu - \partial^\mu (\partial_\nu A^\nu) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} A^\mu = 0 \quad (1.9)$$

genügen. Da aber nicht alle Freiheitsgrade von A^μ physikalisch sind, gilt für das Feld noch die Nebenbedingung

$$\partial_\mu A^\mu = 0, \quad (1.10)$$

was zur folgenden Form der Proca-Gleichungen führt:

$$\left(\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right) A^\mu = 0. \quad (1.11)$$

³Eine Prozessgleichung hat Ableitungen erster Ordnung in der Zeit.

⁴Dies ergibt sich unmittelbar aus der Kontinuitätsgleichung, die sich mit Hilfe der Klein-Gordon-Gleichung berechnen lässt.

1.2.3 Die Maxwell-Gleichungen

Masselose Spin-1-Felder werden durch einen total antisymmetrischen Tensor zweiter Stufe beschrieben:

$$G^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (1.12)$$

Die A^μ sind hier wieder reelle Vierervektoren. Die Maxwell-Gleichungen lauten nun

$$\partial_\mu G^{\mu\nu} = 0, \quad (1.13)$$

$$\partial^\sigma G_{\mu\nu} + \partial^\mu G^{\nu\sigma} + \partial^\nu G^{\sigma\mu} = 0. \quad (1.14)$$

Das Feld A^μ wird hier als Hilfsfeld eingeführt, seine Wahl ist nicht eindeutig. So lassen Transformationen der Art

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu \Lambda(x) \quad (1.15)$$

(das Argument x ist ein Vierervektor) das physikalische Feld $G^{\mu\nu}$ invariant, wenn folgende Bedingung erfüllt ist:

$$(\partial_\mu \partial_\nu - \partial_\nu \partial_\mu) \Lambda(x) = 0. \quad (1.16)$$

Aufgrund dieser Freiheiten muss das Feld A^μ geeicht werden. In der Elektrodynamik spielt die *Lorentz-Eichung* eine besondere Rolle. Sie ist gerade durch die Bedingung $\partial_\mu A^\mu = 0$ gegeben.

1.2.4 Die Dirac-Gleichung

Die damals unbefriedigende Situation mit der Klein-Gordon-Gleichung inspirierte Dirac zu dem Versuch, die Gleichung zu linearisieren unter der Bedingung, dass weiterhin die relativistische Energie-Impuls-Beziehung gelten sollte. Dies führte auf die freie *Dirac-Gleichung*

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0 \quad (1.17)$$

zur Beschreibung von Fermionen mit halbzahligem Spin. Die γ^μ sind die Gamma-Matrizen⁵, die der *Clifford-Algebra* genügen:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g_{\mu\nu}. \quad (1.18)$$

ψ ist ein vierkomponentiger Dirac-Spinor. Diese Gleichung erlaubt wieder die Wahrscheinlichkeitsinterpretation, führt aber zum Auftreten von Lösungen positiver und negativer Energie⁶:

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (1.19)$$

Diese Energiezustände hätten in unbesetzter Form das Zerstrahlen unserer Welt zufolge. Die Erklärung Diracs besteht in der Annahme, dass all diese Zustände bereits durch Elementarsysteme besetzt sind. In diesem Fall verbietet das Pauli-Prinzip den Übergang. Die sogenannte *Dirac-See* führt formal zu einer unendlich großen Vakuumsenergie. Da aber Messungen physikalischer Größen stets relativ zum Vakuum geschehen und die Vakuumsenergie (bei freien Teilchen) homogen und isotrop ist, taucht sie in den meisten Beschreibungen von Elementarsystemen nicht mehr explizit auf⁷.

Innerhalb der Löchertheorie führt obige Erklärung zur erfolgreichen Vorhersage von Antiteilchen. Interessanterweise ergibt sich der Spinfreiheitsgrad von Spin 1/2 von Elementarsystemen automatisch

⁵Ihre explizite Darstellung findet sich z.B. in [Bjo64].

⁶Im Gegensatz zu den Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung handelt es sich hier wirklich um Zustände negativer Energie.

⁷Siehe auch den Abschnitt zur Quantenfeldtheorie und die Behandlung divergenter Vakuumsbeiträge.

aus dieser Gleichung (bei Lösungen positiver Energie entsprechen die beiden oberen Komponenten den beiden Einstellungen des Spins in Bezug auf eine Quantisierungsachse). Man muss aber vorsichtig damit sein, den Spin als relativistischen Effekt anzusehen, eine Linearisierung der Schrödinger-Gleichung führt gleichermaßen zum Auftreten des Spinfreiheitsgrades [Gre98].

Im Rahmen unseres Modells werden wir die Dirac-Gleichung zur Beschreibung der elementaren Freiheitsgrade des RMF-Modells, der Protonen und Neutronen, benutzen.

1.3 Die Formulierung des Vielkörperproblems

1.3.1 Zweite Quantisierung und der Fock-Raum

Um eine quantenmechanische Beschreibung zu erhalten, die auch Teilchenerzeugung und -vernichtung beinhaltet, kann man die Quantenmechanik im Fock-Raum mit variabler Teilchenzahl definieren. Ein zweites, ästhetisches Argument soll hier auch erwähnt werden [Tel95]: Die Notierung einer quantenmechanischen Wellenfunktion für $a > 1$ Elementarsysteme entspricht einer total symmetrischen (Bosonen) oder antisymmetrischen (Fermionen) Produktwellenfunktion. Die (Anti-)Symmetrisierungsvorschrift resultiert gerade aus der Tatsache, dass die Elementarsysteme - ganz im Gegensatz zu (klassischen) Teilchen - prinzipiell ununterscheidbar sind. Die in diesen Wellenfunktionen auftauchenden Indices sind von daher ein künstliches Hilfsmittel, dem kein Element in der Realität entspricht. Der Formalismus der zweiten Quantisierung verzichtet auf diese Indices und beschränkt sich auf die Aussagen, die sich experimentell über die Elementarsysteme machen lassen.

Bei der Durchführung der zweiten Quantisierung werden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{a}_i und \hat{a}_i^\dagger definiert, die einen quantenmechanischen Zustand i erzeugen bzw. vernichten. Das Vakuum ist dabei definiert durch die Bedingung

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \quad \text{für alle } i. \quad (1.20)$$

Die Operatoren \hat{a}_i und \hat{a}_i^\dagger genügen den Vertauschungs- (Bosonen, $[\]_-$) bzw. Antivertauschungsrelationen (Fermionen, $[\]_+$):

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_\pm = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_\pm = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_\pm = 0. \quad (1.21)$$

1.3.2 Darstellung von Operatoren in zweiter Quantisierung

Die aus der nichtrelativistischen Quantenmechanik bekannten Ein- und Zweiteilchenoperatoren lassen sich recht einfach in die Sprache der zweiten Quantisierung übersetzen [Gre95]. Für Einteilchenoperatoren gilt

$$\hat{O} = \sum_{i=1}^A \hat{O}(\vec{r}_k) \rightarrow \hat{O} = \sum_{i,j} o_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j. \quad (1.22)$$

Die Matrixelemente o_{ij} berechnen sich mit Hilfe der Einteilchenzustände durch

$$\int d^3r \psi_i^*(\vec{r}) \hat{O}(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) = o_{ij}. \quad (1.23)$$

Zweiteilchenoperatoren der Form

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{o}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \quad (1.24)$$

können übersetzt werden gemäß

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} o_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k. \quad (1.25)$$

Die Matrixelemente sind dabei gegeben durch

$$o_{ijkl} = \int d^3r d^3r' \psi_i^*(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}') o(\vec{r}, \vec{r}') \psi_k(\vec{r}) \psi_l(\vec{r}'). \quad (1.26)$$

1.3.3 Slater-Determinanten

Die Wellenfunktion eines Atomkerns setzen wir als Slater-Determinante an. Sie entspricht einer antisymmetrisierten Wellenfunktion nicht wechselwirkender fermionischer Elementarsysteme⁸. Wenn \hat{a}_i^\dagger die Erzeuger für die Einteilchenzustände, die durch die Wellenfunktionen $\psi_i(\vec{r})$ repräsentiert werden, sind, lässt sich die Slater-Determinante übersichtlich notieren als

$$|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^A \hat{a}_i^\dagger |0\rangle. \quad (1.27)$$

1.4 Feldtheorie

"In eighteenth-century Newtonian mechanics, the three-body problem was insoluble. With the birth of general relativity around 1910 and quantum electrodynamics in 1930, the two- and one-body problems became insoluble. And within modern quantum field theory, the problem of zero bodies (vacuum) is insoluble. So, if we are out after exact solutions, no bodies at all is already too many."

(nach Prof. G. E. Brown)

1.4.1 Kanonische Quantisierung

Um von einer klassischen Feldtheorie zu einer Quantenfeldtheorie⁹ zu kommen, definiert man die Feldoperatoren $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$. Sie hängen sowohl vom Ort als auch von der Zeit ab, was eine lorentzkovariante Formulierung ermöglicht. Die Zustände des Systems werden durch Vektoren im Hilbertraum beschrieben. Meistens beschreibt man die Dynamik des Systems im Heisenberg- oder Wechselwirkungsbild.

Für den Feldoperator bzw. sein hermitesch konjugiertes werden die gleichzeitigen kanonischen Vertauschungsrelationen gefordert:

$$[\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\vec{r}', t)]_\pm = \delta_{\alpha\beta} \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (1.28)$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{\psi}_\beta(\vec{r}', t)]_\pm = [\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\vec{r}', t)]_\pm = 0. \quad (1.29)$$

Auch hier gelten die '-' wieder für Bosonen, die '+' für Fermionen.

Ausgangspunkt für die Formulierungen von Quantenfeldtheorien ist oftmals die *Lagrange-Dichte* \mathcal{L} , aus der sich mit Hilfe der *Euler-Lagrange-Gleichungen*

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial q_i / \partial x^\mu)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (1.30)$$

⁸Die Antisymmetrisierung ist Ausdruck des Pauli-Prinzips.

⁹Wir wollen im Folgenden ausschließlich die Quantenfeldtheorie freier Elementarsysteme betrachten.

die Bewegungsgleichungen für die elementaren Freiheitsgrade q_i der Theorie bestimmen lassen. Die Kenntnis von \mathcal{L} gestattet es z.B. durch die *Noether-Theoreme*, Erhaltungsgrößen der Theorie zu ermitteln. Mit der Lagrange-Dichte lässt sich der *kanonische Energie-Impuls-Tensor* berechnen:

$$T_{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial^\mu q_i)} \frac{\partial q_i}{\partial x^\nu} - g_{\mu\nu} \mathcal{L}. \quad (1.31)$$

Zu den Freiheitsgraden der Theorie lassen sich, ähnlich wie in der Mechanik, konjugierte Impulse gemäß

$$\pi_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \quad (1.32)$$

zuordnen. Mit ihrer Hilfe lässt sich aus der Lagrange-Dichte die *Hamilton-Dichte* nach

$$\mathcal{H} = \sum_i \pi_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \quad (1.33)$$

berechnen.

Im Folgenden wollen wir auf die kanonische Quantisierung freier Fermionen eingehen. Das *Spin-Statistik-Theorem* [Tel95] verbindet den Spin von Elementarsystemen mit der zugrunde liegenden Statistik. Für Fermionen bedeutet dies, dass sie aufgrund des Spins $1/2$ der *Fermi-Dirac-Statistik* gehorchen. Dies hat zur Folge, dass für ihre Quantisierung die Antikommutatoren aus (1.28) und (1.29) gewählt werden müssen.

Aus der Heisenbergschen Bewegungsgleichung für den Feldoperator $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$ ($\hbar = c = 1$)

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\vec{r}, t) = -i[\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] \quad (1.34)$$

folgt, dass der quantisierte Operator der freien Dirac-Gleichung genügt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\vec{r}, t) = (i\vec{\gamma} \cdot \nabla + m) \hat{\psi}(\vec{r}, t). \quad (1.35)$$

Den Feldoperator können wir nach freien Lösungen entwickeln gemäß

$$\hat{\psi}(\vec{r}, t) = \sum_s \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} \left(\hat{b}(p, s) u(p, s) e^{-ip \cdot x} + \hat{d}^\dagger(p, s) v(p, s) e^{+ip \cdot x} \right). \quad (1.36)$$

Die Spinoren haben dabei die explizite Form

$$\begin{aligned} u(p, s) &= \frac{\not{p} + m}{\sqrt{2m(\omega_p + m)}} u(0, s), \\ v(p, s) &= \frac{-\not{p} + m}{\sqrt{2m(\omega_p + m)}} v(0, s). \end{aligned} \quad (1.37)$$

Dabei wurde die Kurznotation $\not{p} := \gamma^\mu p_\mu$ benutzt. Die $u(0, s)$ und $v(0, s)$ sind die Einheitsspinoren im Ruhesystem des Elementarsystems mit $p = (m, \vec{0})$, die nur obere oder untere Komponenten haben. Sie genügen den Gleichungen

$$\begin{aligned} (\not{p} - m) u(p, s) &= 0, \\ (\not{p} + m) v(p, s) &= 0. \end{aligned} \quad (1.38)$$

ω_p bezeichnet dabei den Energieeigenwert

$$E = \omega_p = \sqrt{p^2 + m^2}. \quad (1.39)$$

Die in (1.36) auftretenden Operatoren lassen die folgende Interpretation zu: \hat{b}^\dagger und \hat{b} sind Erzeuger bzw. Vernichter für Teilchen, während \hat{d}^\dagger und \hat{d} Erzeuger bzw. Vernichter für Antiteilchen sind¹⁰. Der Hamilton-Operator, abzüglich des divergenten Vakuumbeitrags¹¹, ist nun

$$\hat{H} = \sum_s \int d^3p \omega_p \left(\hat{b}^\dagger(p, s) \hat{b}(p, s) + \hat{d}^\dagger(p, s) \hat{d}(p, s) \right). \quad (1.40)$$

Die Feldoperatoren lassen sich nicht nur nach freien Lösungen entwickeln, eine Entwicklung in ein vollständiges System von Einteilchenzuständen $|\alpha\rangle$ hat die Form

$$\hat{\psi}(\vec{r}, t) = \sum_\alpha \psi_\alpha(\vec{r}, t) \hat{a}_\alpha, \quad \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) = \sum_\alpha \psi_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) \hat{a}_\alpha^\dagger. \quad (1.41)$$

Die Lagrange-Dichte des freien Dirac-Feldes lautet

$$\mathcal{L} = \hat{\psi}(x) (i\gamma_\mu \partial^\mu - m) \hat{\psi}(x). \quad (1.42)$$

Der *Feynman-Propagator* $S_{F\alpha\beta}$ für Dirac-Felder ist definiert als das zeitgeordnete Produkt von zwei Feldoperatoren an unterschiedlichen Raum-Zeit-Punkten:

$$iS_{F\alpha\beta}(x - y) = \langle 0 | T(\hat{\psi}_\alpha \hat{\psi}_\beta(y)) | 0 \rangle. \quad (1.43)$$

Er lässt sich schreiben als

$$S_{F\alpha\beta}(x - y) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} e^{-ip \cdot (x-y)} \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + i\epsilon} \quad (1.44)$$

bzw. noch einfacher im Impulsraum als

$$S_{F\alpha\beta}(p) = \frac{1}{\not{p} - m + i\epsilon}. \quad (1.45)$$

Wir werden sehen, dass der Ansatz der in dieser Arbeit betrachteten Modelle eine feldtheoretische Formulierung für wechselwirkende Felder ist: Wir stellen eine kovariante Lagrange-Dichte auf und bestimmen aus ihr die Bewegungsgleichungen für die elementaren Freiheitsgrade des Modells. Diese Feldtheorie ist als *effektive Theorie* aufzufassen, deren Aufgabe darin besteht, im Rahmen gewisser Näherungen den Niederenergielimes der QCD in der Art zu modellieren, dass damit die Struktur von Atomkernen beschrieben werden kann.

1.4.2 Quantisierung mit Pfadintegralen

Es gibt noch eine andere Art der Quantisierung, welche auf Richard Feynman zurückgeht [Fey65]. Sie entspricht einem Bild, das eine große Ähnlichkeit zum Hamilton-Formalismus der klassischen Mechanik hat. Das Konzept beruht auf der Berücksichtigung aller möglichen (klassischen) Pfade bzw. Trajektorien eines Elementarsystems, wobei die einzelnen Pfade kohärent interferieren und jeweils gewichtet mit ihrer klassischen Wirkung in das Pfadintegral eingehen. Diese Interferenz der Pfade ist eine direkte Konsequenz aus der Nichtvertauschbarkeit von Orts- und Impulsoperatoren in der Quantenmechanik, die den Begriff der klassischen Trajektorie für quantenmechanische Objekte verbieten. Das Übergangsmatrixelement zwischen zwei Zuständen lässt sich im Ortsraum schreiben als [Gre96]:

$$\langle q'_1, \dots, q'_D, t' | q_1, \dots, q_D, t \rangle = \int \prod_{i=1}^D \mathcal{D}q_i \prod_{j=1}^D \mathcal{D}q_j \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau \left(\sum_{k=1}^D p_k \dot{q}_k - H(p, q) \right) \right) \quad (1.46)$$

¹⁰Aufgrund der bekannten Begriffe wollen wir den Begriff des Elementarsystems nicht verwenden.

¹¹Dies erreicht man durch die sogenannte *Normalordnung* der Feldoperatoren, siehe z.B. [Bjo65].

Diese Form der Quantisierung, die heute zunehmend zur Quantisierung von Feldtheorien verwendet wird, gestattet es, einen Zusammenhang mit der klassischen Physik und das Wesen der Quantenmechanik erkennen: Lässt man die Plancksche Konstante in (1.46) gegen Null gehen, so wird der Einfluss der stationären Lösung - die der klassischen Trajektorie entspricht - größer gegenüber den benachbarten Pfaden. Der Grenzwert $\hbar \rightarrow 0$ würde dann der klassischen Mechanik entsprechen.

1.5 Zur Interpretation des Formalismus

Die Quantenfeldtheorie ist wohl das mächtigste Mittel, das uns gegenwärtig zur Verfügung steht, um auf elementarer Ebene ablaufende Naturprozesse zu beschreiben und zu begreifen. Interessanterweise ist aber bereits die Formulierung der *freien* Quantenfeldtheorie mit konzeptionellen und interpretatorischen Problemen behaftet [Tel95]¹². Weiterhin ist die theoretische Verbindung zwischen der freien Theorie und dem *S-Matrix-Formalismus*, der es mit Hilfe von störungstheoretischen Methoden erlaubt, Übergangsmatrixelemente und Wirkungsquerschnitte für die Streuung von wechselwirkenden Elementarsystemen zu berechnen und damit die Brücke zu experimentellen Resultaten zu ermöglichen, noch nicht streng formuliert [Tel95]. Das Auftreten von *virtuellen Teilchen* und *Geistfeldern* in modernen Quanteneichtheorien ist aktueller Gegenstand metaphysischer Diskussionen (siehe z.B. [Brow88]).

Es besteht auch die Möglichkeit, dass sich in der Zukunft die heutige Quantenfeldtheorie als (niederenergetischer) Grenzfall einer übergeordneten Theorie entpuppen wird. Möglicher Kandidat für solch eine Theorie ist die Superstringtheorie (siehe z.B. [Pol98]).

¹²Hiermit ist nicht in erster Linie das Auftreten von Unendlichkeiten gemeint, dem mittels Methoden der Renormierungstheorie erfolgreich begegnet werden kann. Ein Problem anderer Art ist z.B. die Frage nach der Lokalisierbarkeit von relativistisch invarianten Quantenzuständen.

Kapitel 2

Das Punktkopplungsmodell: Formalismus

2.1 Beschreibung von Kernen mit relativistischen Mean-Field-Modellen

2.1.1 Rechtfertigung effektiver Modelle

Eine QCD-basierte Beschreibung von endlichen Kernen als Multiquark-System mit Gluonen-Wechselwirkung ist zur Zeit leider noch nicht möglich. Neben Problemen technischer Art, die unmittelbar mit dem Bedarf an Rechenzeit, Hauptspeicher und Plattenplatz verknüpft sind, gibt es auch eine Reihe konzeptioneller Probleme. So ist z.B. die Frage nach confinement in der Gittereichtheorie noch nicht vollständig geklärt.

Aus diesem Grund werden heute häufig effektive Modelle verwendet, um endliche Kerne zu beschreiben. Relativistische effektive Modelle in der Kernstruktur versuchen den Niederenergielimes der QCD zu modellieren. So sind die elementaren Freiheitsgrade gebundene und farbneutrale Systeme aus Quarks: die Baryonen und die Mesonen. Die Baryonen – im wesentlichen Protonen und Neutronen – wechselwirken durch den Austausch verschiedener Arten von Mesonen. Diese Mesonen können, müssen aber nicht zwangsweise mit experimentell bekannten Teilchen übereinstimmen¹.

Eine bestimmte Klasse von effektiven Modellen stellt die Verbindung zur QCD durch Berücksichtigung der chiralen Symmetrie her (siehe z.B. [Fur96, Wal95]). Die Lagrange-Dichte wird chiral invariant formuliert und die Baryonenmassen werden durch spontane Symmetriebrechung generiert (das Modell bleibt chiral invariant, nur besitzt der Grundzustand des Modells diese Symmetrie nicht mehr). Letzteres geschieht durch die geeignete Wahl des Potentials, das von einem isoskalaren-skalaren Feld und dem pionischen Feld gebildet wird. Die Summe eines sogenannten *mexican-hat*-Potentials und eines linearen, skalaren Potentials führt zu einem eindeutigen Vakuumzustand, der die chirale Symmetrie bricht. Zusätzlich zu diesen beiden Feldern enthalten diese Modelle noch vektorielle Felder. Auch ergänzende skalare Felder sind möglich. Diese chiralen Modelle finden ebenfalls Anwendung in der Kernstruktur [Bec01]. Sie wurden jedoch bisher nicht so detailliert untersucht und getestet wie die Walecka-artigen Modelle.

Bei den relativistischen Modellen, die in dieser Arbeit diskutiert werden, wird die chirale Invarianz nicht explizit bei ihrer Konstruktion berücksichtigt. Schon die Massenterme der Nukleonen, die in den RMF-FR und RMF-PC Modellen enthalten sind, sind nicht chiral invariant.

Man kann aus dem Studium der effektiven Modelle für den Niederenergiebereich Rückschlüsse

¹Z.B. wurde das σ -Meson, das wir im Zusammenhang mit dem RMF-FR-Modell diskutieren werden, bisher nicht im Experiment gesehen. Es modelliert vielmehr effektiv Prozesse wie den 2-Pionen-Austausch [Eri88].

auf das Verhalten der QCD in diesem Bereich ziehen. Dabei ist es besonders interessant, Brücken zu suchen, die die beiden Energiebereiche verbinden. Eine Brücke dieser Art ist die chirale Symmetrie. Ein weiteres Kriterium, das den Anschluss der effektiven Modelle an die Quantenchromodynamik unterstützen kann, ist die *Natürlichkeit*² der Kopplungskonstanten des Modells. Die *naive Dimensionsanalyse* [Fur97] betrachtet den Ansatz der effektiven Wechselwirkung als eine Entwicklung in verschiedene Ordnungen der typischen intranuklearen Impulse über einer Energieskala.

Zwei wichtige Fragestellungen bzw. Zielvorgaben bestimmen die Entwicklung der Modelle:

- die erfolgreiche Beschreibung von Atomkernen und Vorhersagen für noch unbekannte Kerne (Extrapolationen) und
- die Verbesserung der Parametrisierung der effektiven NN-Wechselwirkung.

Um diese Zielvorgaben erreichen zu können ist es wichtig, die Struktur und Bedeutung des Ansatzes zu verstehen und jeden Term physikalisch zu motivieren. Das gleichzeitige Einführen von vielen Termen kann zu einer Fitformel an die Daten führen, bei der die physikalische Einsicht auf der Strecke bleibt. Dem oben formulierten Vorhaben versuchen wir gerecht zu werden, indem wir bei den meisten Fragestellungen die Struktur des Modells im Auge haben und untersuchen, welche Bestandteile des Modells für welche Effekte verantwortlich sind.

Die Parametrisierung der NN-Wechselwirkung ist dabei stets für das Modell und die durchgeführten Näherungen zu verwenden. Die Verwendung von NN-Wechselwirkungen, wie man sie aus NN-Streudaten extrahieren kann, eignen sich nicht oder nur bedingt zur Beschreibung von Kernstruktur. So liegt z.B. bei nichtrelativistischen Modellen der Sättigungspunkt von Kernmaterie auf der sogenannten *Coester-Linie*, die nicht durch den experimentell bestätigten Punkt läuft. Ein Grund für die schlechte Anwendbarkeit dieser Kräfte für Kernstrukturrechnungen ist, dass die effektiven Modelle bzw. die Parametrisierungen auch Effekte (z.B. Korrelationen) enthalten müssen, die durch gewisse Näherungen vernachlässigt werden.

Die effektiven Parametrisierungen enthalten z.B. Vielkörpereffekte: Ein Nukleon im Kern verspürt im Innern und im Bereich der Oberfläche jeweils andere Kräfte, abhängig davon, mit wievielen und welchen anderen Nukleonen es wechselwirkt. Dies führt in effektiven Modellen zu einer dichteabhängigen Wechselwirkung [Rin80]. Wir werden später sehen, dass diese Dichteabhängigkeit eine fundamentale und notwendige Eigenschaft der untersuchten Kräfte ist.

Weiterhin absorbieren die Kopplungskonstanten Effekte, die im Rahmen der *No-Sea-Näherung* durch die Vernachlässigung von Vakuumpolarisationen hervorgerufen werden.

2.1.2 Erste Ansätze: das Duerr-Teller und das Walecka-Modell

Hans-Peter Duerr beschreibt bereits 1956 [Due56] ein Modell, das eine relativistisch invariante Formulierung eines schon von Johnson und Teller vorgeschlagenen, phänomenologischen Modells darstellt [Joh55]. Die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen wird in diesem Ansatz als Summe eines attraktiven isoskalaren-skalaren Potentials und der zeitlichen Komponente eines isoskalaren-vektoriellen Potentials beschrieben. Neben den Sättigungseigenschaften dieses Modells werden auch die Beiträge zur Oberflächen- und Asymmetrieenergie diskutiert. Die konstruktive Addition der beiden Potentiale zum Spin-Bahn-Potential, was zu einer großen Spin-Bahn-Kraft führt, wird hervorgehoben und diskutiert.

Das *Walecka-Modell*, das die NN-Wechselwirkung durch den Austausch von zwei isoskalaren Mesonen (dem skalaren σ -Meson und dem vektoriellen ω -Meson, die beide feste Bestandteile aller erweiterten Modelle sind³) beschreibt, kann die Sättigungseigenschaften von Kernmaterie erklären.

²Dieser Begriff wird unten noch genau definiert.

³Zumindest gilt dies in der Hartree-Näherung, in der Beiträge des Pions verschwinden.

Das Kern-Potenzial (im Wesentlichen entspricht es dem Potenzial aus phänomenologischen Schalenmodellen) von ≈ 50 MeV entsteht aus der Summe der zwei großen mittleren Potenziale der Mesonen ($V_s \approx -400$ MeV, $V_v \approx 350$ MeV), die sich aufgrund des unterschiedlichen Vorzeichens fast aufheben. Eine andere Art relativistischer Modelle verwendet dichteabhängige Kopplungskonstanten [Ces98]. Die Erweiterung des Walecka-Modells, die die akkurate Beschreibung von endlichen Kernen erst ermöglicht, ist Inhalt des folgenden Abschnitts.

2.2 Modelle mit endlicher Reichweite: RMF-FR

Wir betrachten ein relativistisches, effektives Modell mit endlicher Reichweite, das auf dem von Walecka und Serot vorgeschlagenen Modell beruht [Ser86]. Das Modell, das in der Literatur gemeinhin als *Relativistic-Mean-Field*-(RMF)-Modell bezeichnet wird, wollen wir hier als RMF-FR Modell kennzeichnen: FR steht hier für *finite range*. Dies tun wir, um es von dem Punktkopplungsmodell zu unterscheiden, das wir RMF-PC-Modell nennen werden (PC steht für *point coupling*). Den Ausdruck RMF-Modell verwenden wir für beide Arten.

Das Punktkopplungsmodell, um das es im Folgenden hauptsächlich gehen soll, kann als Grenzfall des RMF-FR-Modells für zu vernachlässigende Impulsüberträge betrachtet werden. Diesen Grenzprozess werden wir später ausführlich betrachten.

Wir werden das RMF-PC-Modell an vielen Stellen mit dem RMF-FR-Modell vergleichen. Deshalb wollen wir es hier diskutieren.

2.2.1 Der Ansatz

Das RMF-FR Modell parametrisiert die effektive NN-Wechselwirkung durch den Austausch von im Wesentlichen drei verschiedenen Mesonen [Rei89, Fur00]. Der mittelreichweitige Anteil der NN-Wechselwirkung wird durch das isoskalare-skalare σ -Meson ($T = 0, J^{\Pi} = 0^+$) beschrieben. Dieses Meson wurde in der Natur bisher nicht entdeckt. Es simuliert effektiv kompliziertere Prozesse wie etwa den 2-Pionen-Austausch.

Der kurzreichweitige, repulsive Anteil der Kernkraft wird durch das isoskalare-vektorielle ω -Meson ($T = 0, J^{\Pi} = 1^-$) beschrieben.

Um Isotopeneffekte beschreiben zu können, ist es notwendig, einen isovektoriellen Kanal in das Modell zu integrieren. Er korrespondiert zum Term der Symmetrieenergie im Tropfenmodell. Dieser wird durch das isovektorielle-vektorielle ρ -Meson ($T = 1, J^{\Pi} = 1^-$) charakterisiert. Das isovektorielle-skalare δ -Meson ($T = 1, J = 0^+$), das prinzipiell auch Bestandteil der Parametrisierung sein sollte, konnte in bisherigen Fits nur sehr schlecht angepasst werden [Rut99] und spielt in Ein-Boson-Austausch-Potentialen aufgrund seiner kleinen Kopplungskonstante und großen Masse nur eine untergeordnete Rolle. Daher wird es in den meisten RMF-Modellen nicht berücksichtigt.

Es ist hilfreich, die Ein-Boson-Austausch-Potenziale, die durch die (minimal angekoppelten) Mesonen entstehen, im nichtrelativistischen Grenzfall zu betrachten. Für das σ -Meson sind dabei die wichtigsten Terme [Eri88]

$$V_s(\vec{r}) = -\frac{g_\sigma^2}{4\pi} \frac{e^{-m_\sigma r}}{r} + \frac{g_\sigma^2}{4\pi} \frac{1}{2M^2 r} \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{-m_\sigma r}}{r} \right) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (2.1)$$

und für das ω -Meson [Eri88]⁴

$$V_v = \frac{g_\omega^2}{4\pi} \frac{e^{-m_\omega r}}{r} + \frac{g_\omega^2}{4\pi} \left(1 + \frac{1}{g_\omega} \right)^2 \frac{m_\omega^2}{4M^2} (\vec{\sigma}_1 \times \vec{\nabla}) \cdot (\vec{\sigma}_2 \times \vec{\nabla}) \frac{e^{-m_\omega r}}{r}$$

⁴Die tensorielle Kopplung wird hier vernachlässigt.

$$+ \frac{g_\omega^2}{4\pi} \left(3 + \frac{4}{g_\omega} \right) \frac{1}{2M^2 r} \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{-m_\omega r}}{r} \right) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}. \quad (2.2)$$

Dabei sind m_σ, m_ω und M die Massen der Mesonen bzw. der Nukleonen und g_σ, g_ω die Kopplungskonstanten. Beide Mesonen erzeugen ein Spin-unabhängiges Yukawa-Potenzial, das im Falle des skalaren Mesons attraktiv und – aufgrund der geringeren Masse – auch langreichweitiger ist als das des repulsiven ω -Mesons. Darüber hinaus erzeugen beide Mesonen mit gleichem Vorzeichen ein großes Spin-Bahn-Potenzial. Dieser mesonische Beitrag zum Spin-Bahn-Potenzial ist es auch, der die akurate Beschreibung von Spin-Bahn-Aufspaltungen in Atomkernen ermöglicht. Weiterhin resultiert aus dem Vektor-Bosonen-Austausch eine Spin-abhängige Wechselwirkung.

Das lineare Modell erweist sich als nicht geeignet zur Beschreibung von endlichen Kernen, z.B. fällt die Beschreibung der Schalenstruktur quantitativ nicht gut aus. Lineare Modelle produzieren zudem in symmetrischer unendlicher Kernmaterie eine Kompressibilität, die deutlich über den heute aus experimentellen Daten geschlossenen Werten liegt. Deshalb ist eine Modifizierung der Dichteabhängigkeit des Modells notwendig, d.h., eine Modifizierung der funktionalen Abhängigkeit der mittleren Felder bzw. Potenziale von der Dichte. Diese Modifizierung wird durch Einführung nichtlinearer Terme (einer Selbstwechselwirkung) in den Mesonenfeldern realisiert. Der Standardansatz besteht in einer Entwicklung in Potenzen des skalaren Feldes:

$$U[\hat{\sigma}] = \frac{1}{2} m_\sigma^2 \hat{\sigma}^2 + \frac{1}{3} b_2 \hat{\sigma}^3 + \frac{1}{4} b_3 \hat{\sigma}^4. \quad (2.3)$$

Diese Theorie ist als effektive Feldtheorie renormierbar. Das Argument der Renormierbarkeit, das entscheidend die Entwicklung der fundamentalen Theorien der Materie und ihrer Wechselwirkungen beeinflusst⁵, hat jedoch bei effektiven Modellen nicht so großes Gewicht, da hier Kräfte vielen Effekten Rechnung tragen, die durch Näherungen und vernachlässigte Korrelationen zustande kommen und damit keineswegs als fundamental angesehen werden können.

In einigen Parametersätzen wird zusätzlich ein nichtlinearer Term des ω -Mesons berücksichtigt:

$$U[\hat{\omega}] = \frac{1}{3} c_3 (\hat{\omega}_\mu \hat{\omega}^\mu)^2. \quad (2.4)$$

In [Sug94] wird die Einführung dieses Terms mit den Ergebnissen und Erfolgen von relativistischen Brückner-Hartree-Fock-(RBHF)-Rechnungen begründet. Das Vektor-Potenzial in diesen Rechnungen steigt nicht linear, sondern schwächer mit der Dichte an, während der Verlauf im RMF-FR-Modell linear ist. Das skalare Potenzial ist im RMF-FR-Modell mit Selbstwechselwirkung des σ -Mesons bei diesen hohen Dichten stärker attraktiv als bei den RBHF-Rechnungen, wodurch der Anstieg des Vektor-Potenzials kompensiert wird.

Die Einführung dieses Terms führt beim RMF-FR Modell nicht zu einer bemerkbaren Verbesserung des Modells, weshalb bei der Überzahl der Parametrisierungen dieser Term nicht berücksichtigt wird.

Letztendlich wird das elektromagnetische Feld zur Beschreibung der Coulomb-Kraft hinzugefügt.

2.2.2 Terme mit ungerader Parität

Das oben beschriebene Modell enthält keine pseudoskalaren und -vektoriellen Terme, wie sie etwa der Beschreibung von Pionen entsprechen würden. Der Grund dafür liegt in der Natur der Näherungen und der betrachteten Systeme, für die dieses Modell bestimmt ist. In der *Hartree*-Näherung, die unten beschrieben wird, werden die Austauschsterme vernachlässigt und es überleben nur die direkten Terme mit ungerader Parität. Diese verschwinden aber bei Kernen in ihren Grundzuständen, da sie positive Parität besitzen.

⁵Hierbei ist die Lagrange-Dichte des Standardmodells gemeint.

Relativistische Hartree-Fock-Modelle dagegen enthalten im Ansatz das Pion $\vec{\pi}$. Dieses kann auf pseudo-skalare Weise an die Nukleonen angekoppelt werden:

$$\mathcal{L}_\pi^{\text{koppl}} = ig_\pi \hat{\psi} \gamma_5 \vec{\tau} \cdot \vec{\pi} \hat{\psi}. \quad (2.5)$$

Die ψ sind hier die nukleonischen Feldoperatoren; die Vektorpfeile beziehen sich auf den Isospinraum. Die pseudo-vektorielle Kopplung erweist sich allerdings als essentiell für die Sättigung von Kernmaterie [Hor83, Bou87]:

$$\mathcal{L}_\pi^{\text{koppl}} = ig_\pi \hat{\psi} \gamma_5 \gamma^\mu \vec{\tau} \cdot \hat{\psi} \partial_\mu \vec{\pi}. \quad (2.6)$$

Die pseudo-skalare Kopplung ist dagegen unzureichend. Das Pion liefert in Hartree-Fock Modellen Beiträge durch die Austauschsterme.

Der Ansatz für ein effektives Modell muss also stets unter Berücksichtigung der für praktische Rechnungen durchgeführten Näherungen aufgestellt werden.

2.2.3 Die Lagrange-Dichte

Der Startpunkt zur Formulierung des Modells ist meistens eine kovariant formulierte Lagrange-Dichte. Sie setzt sich aus folgenden Bestandteilen zusammen:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{nukleon}}^{\text{frei}} + \mathcal{L}_{\text{meson}}^{\text{frei}} + \mathcal{L}_{\text{koppl}}^{\text{lin}} + \mathcal{L}_{\text{koppl}}^{\text{nichtlin}} \quad (2.7)$$

Die ersten Teile sind die Lagrange-Dichten für freie Nukleonen und Mesonen sowie das elektromagnetische Feld:

$$\mathcal{L}_{\text{nukleon}}^{\text{frei}} = \hat{\psi} (i\gamma_\mu \partial^\mu - m_n) \hat{\psi}, \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{meson}}^{\text{frei}} &= \frac{1}{2} (\partial_\mu \hat{\sigma} \partial^\mu \hat{\sigma} - m_\sigma^2 \hat{\sigma}^2) \\ &- \frac{1}{2} (\frac{1}{2} \hat{G}_{\mu\nu} \hat{G}^{\mu\nu} - m_\omega^2 \hat{\omega}_\mu \hat{\omega}^\mu) \\ &- \frac{1}{2} (\frac{1}{2} \hat{B}_{\mu\nu} \cdot \hat{B}^{\mu\nu} - m_\rho^2 \hat{\rho}_\mu \cdot \hat{\rho}^\mu) \\ &- \frac{1}{4} \hat{F}_{\mu\nu} \hat{F}^{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Zu einer Theorie wechselwirkender Felder führt die minimale Kopplung der Mesonen und des Photonenfelds an die nukleonischen Dichten und Ströme. Dies geschieht durch minimale Kopplung:

$$\mathcal{L}_{\text{koppl}}^{\text{lin}} = -g_\sigma \hat{\sigma} \hat{\psi} \hat{\psi} - g_\omega \hat{\omega}_\mu \hat{\psi} \gamma^\mu \hat{\psi} - g_\rho \hat{\rho}_\mu \cdot \hat{\psi} \vec{\tau} \gamma^\mu \hat{\psi} - e \hat{A}_\mu \hat{\psi} \frac{1 + \tau_3}{2} \gamma^\mu \hat{\psi}. \quad (2.10)$$

Wie oben diskutiert ist zur Modifikation der Dichteabhängigkeit des Modells die Einführung einer Selbstwechselwirkung des skalaren Feldes notwendig:

$$\mathcal{L}_{\text{koppl}}^{\text{nichtlin}} = \frac{1}{2} m_\sigma^2 \hat{\sigma}^2 - U_\sigma[\hat{\sigma}] \quad (2.11)$$

Der Standardansatz dafür ist (2.3).

Die Feldstärketensoren der Mesonen lauten

$$\hat{G}_{\mu\nu} = \partial_\mu \hat{\omega}_\nu - \partial_\nu \hat{\omega}_\mu \quad (2.12)$$

$$\hat{B}_{\mu\nu} = \partial_\mu \hat{\rho}_\nu - \partial_\nu \hat{\rho}_\mu \quad (2.13)$$

$$\hat{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu. \quad (2.14)$$

Der oben notierte Ansatz der Selbstwechselwirkung führt für sehr hohe skalare Dichten zu einer Instabilität des Modells. Es existiert dann keine Lösung mehr für das σ -Feld. Die Ursache dafür ist der negative Wert des Parameters b_3 , wie er sich nach der Anpassung der Parameter ergibt. Ein Ausweg wird in [Rei89] vorgeschlagen (ein Parametersatz mit diesem Ansatz ist z.B. PL-40 aus der gleichen Referenz): Darin wird die zweite Ableitung des Selbstwechselwirkungsterms so konzipiert, dass sie für alle Dichten positiv bleibt:

$$U''_{\sigma}[\sigma] = m_{\infty}^2 + \Delta m^2 \left[1 - \left(\frac{\sigma - \Phi_0}{\delta\Phi} \right)^2 \right] \left[1 + \left(\frac{\sigma - \Phi_0}{\delta\Phi} \right)^2 \right]^{-2}. \quad (2.15)$$

Durch zweifache Integration ergibt sich daraus die Selbstwechselwirkung des σ -Mesons:

$$\begin{aligned} U_{\sigma}[\sigma] &= \frac{1}{2} m_{\infty}^2 \sigma^2 + \frac{1}{2} \Delta m^2 \left[\delta\Phi^2 \log \left(1 + \left(\frac{\sigma - \Phi_0}{\delta\Phi} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. - \log \left(1 + \left(\frac{\Phi_0}{\delta\Phi} \right)^2 \right) + \frac{\Phi_0 \sigma}{1 + \left(\frac{\Phi_0}{\delta\Phi} \right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Anstelle der Parameter b_2 und b_3 werden in diesem Ansatz m_{∞}^2 , Δm^2 , $\delta\Phi$, Φ_0 verwendet. Die Anpassung der Parameter erweist sich als nicht sensitiv in Bezug auf m_{∞}^2 , so dass hier ein fester Wert vor der eigentlichen Anpassung der Parameter gewählt werden kann. Mit diesem Ansatz ist das Modell nicht mehr renormierbar. Dies ist aber für ein effektives Modell der Kernstruktur ohne weiteres zu rechtfertigen.⁶

2.2.4 Die Bewegungsgleichungen

Mit Hilfe der Euler-Lagrange Gleichungen für Felder (1.30) lassen sich aus der Lagrangedichte die Bewegungsgleichungen für die Nukleonen, die Mesonen und das elektromagnetische Feld herleiten⁷. Die Nukleonen genügen der Diracgleichung

$$\epsilon_{\alpha} \gamma_0 \psi_{\alpha} = \left[-i \vec{\gamma} \cdot \nabla + m_n + g_{\sigma} \sigma + g_{\omega} \omega_0 \gamma_0 + \frac{1}{2} g_{\rho} \rho_{00} \gamma_0 \tau_0 + \frac{1}{2} e A_0 \gamma_0 (1 + \tau_0) \right] \psi_{\alpha}. \quad (2.17)$$

Die effektive Masse der Nukleonen ist definiert als

$$m^* := m + g_{\sigma} \sigma. \quad (2.18)$$

Die Mesonenfelder genügen den Gleichungen

$$\begin{aligned} -\Delta \sigma + U'[\sigma] &= -g_{\sigma} \rho_s, \\ (-\Delta + m_{\omega}^2) \omega_0 &= g_{\omega} \rho_0, \\ (-\Delta + m_{\rho}^2) \rho_{00} &= \frac{1}{2} g_{\rho} \rho_0 \tau_3. \end{aligned}$$

Die nukleonischen Dichten und Ströme tauchen hier als Quellen der Mesonenfelder auf. Wir benutzen hier und im Folgenden folgende Definitionen:

$$\begin{aligned} \rho_S(\vec{r}) &= \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2 \bar{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}), \\ \rho_{V0}(\vec{r}) &= \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2 \bar{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) \gamma_0 \psi_{\alpha}(\vec{r}), \\ \rho_{TS}(\vec{r}) &= \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2 \bar{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) \tau_3 \psi_{\alpha}(\vec{r}), \\ \rho_{TV0}(\vec{r}) &= \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2 \bar{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) \tau_3 \gamma_0 \psi_{\alpha}(\vec{r}). \end{aligned}$$

⁶Andererseits wird etwas von der Schönheit des Ansatzes eingebüßt.

⁷Wir notieren sie hier bereits im Rahmen der üblichen Näherungen, die in Abschnitt 2.5 besprochen werden.

Die v_α^2 sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten, die sich aus der Behandlung der Paarkraft im Rahmen des BCS-Formalismus ergeben. Diesem Thema ist ein eigenes Kapitel dieser Arbeit gewidmet.

Wir werden so auf ein Selbstkonsistenzproblem geführt, das – nach Anwendung einiger Näherungen – iterativ gelöst werden muss. Für das elektromagnetische Feld ergibt sich

$$-\Delta A_0 = e\rho_0^{(\text{proton})}. \quad (2.19)$$

Seine numerische Behandlung erweist sich auf Grund seiner $1/r$ -Abhängigkeit als relativ kompliziert. Siehe z.B. [Rut94] für eine ausführliche Beschreibung.

2.2.5 Parametersätze für das RMF-FR-Modell

Die bei der Formulierung des Modells eingeführten Parameter können bisher nicht aus fundamentalen Theorien abgeleitet werden. Einerseits würde das die Deduzierung der NN-Wechselwirkung aus der Quantenchromodynamik implizieren. Andererseits werden in die Kopplungskonstanten diverse Effekte absorbiert, die von den speziellen Näherungen des Modells herrühren, was eine Bestimmung aus einer fundamentalen Theorie zusätzlich erschwert. Aus diesen Gründen verfolgt man einen eher pragmatischen Weg und bestimmt die Parameter durch einen Fit des Modells an experimentelle Daten. Der Art und Weise, wie das geschehen kann, ist ein ganzes Kapitel dieser Arbeit gewidmet. Jede erfolgreiche Anpassung führt zu einem neuen Parametersatz, einer sogenannten neuen *Kraft*. Für

	NL-Z2	NL3	NL-Z
$M[\text{MeV}]$	938.9	939.0	938.9
$m_\sigma[\text{MeV}]$	493.150	508.194	488.67
$m_\omega[\text{MeV}]$	780.0	782.501	780.0
$m_\rho[\text{MeV}]$	763.0	763.000	763.0
g_σ	10.1369	10.2170	10.0553
g_ω	12.9084	12.8680	12.9086
g_ρ	4.55627	4.47400	4.84944
$b_2[\text{fm}^{-1}]$	-13.7561	-10.4310	-13.5072
b_3	-41.4013	-28.8850	-40.2243
c_3	0.000	0.000	0.000

Tabelle 2.1: Die in dieser Arbeit verwendeten Parametersätze des RMF-FR Modells, sowie die Kraft NL-Z [Ruf88]. Die Massen des ρ -Mesons wurde bei beiden Sätzen nicht gefittet sondern auf den angegebenen Wert fixiert, bei NL-Z2 und NL-Z wurde zusätzlich die Masse des ω -Mesons auf den angegebenen Wert festgelegt.

das RMF-FR-Modell gibt es eine Reihe von Parametrisierungen, die sich jeweils in der funktionalen Form der nichtlinearen Terme und der zur Anpassung der Parameter gewählten Observablen unterscheiden. Wir wollen das Punktkopplungsmodell mit zwei Parametrisierungen des RMF-FR-Modells vergleichen, den Kräften NL3 [Lal96b] und NL-Z2 [Ben99].

Diese beiden Parametersätze spiegeln die Leistungsfähigkeit des RMF-FR-Modells sehr gut wieder, siehe z.B. [Rut99] für eine ausführliche Analyse. NL3 wurde an Bindungsenergien, Ladungsradien und Neutronen-Radien der Kerne ^{16}O , $^{40,48}\text{Ca}$, ^{58}Ni , ^{90}Zr , $^{116,124,132}\text{Sn}$ und ^{208}Pb angepasst. Zusätzlich dazu wurden Annahmen über Kernmaterie in den Fit mit einbezogen ($E/A = -16 \text{ MeV}$, ρ_0

$= 0.153 \text{ fm}^{-3}$, $K = 250 \text{ MeV}$, $\alpha_S = 33 \text{ MeV}$).

Die Fitstrategie, die zur Gewinnung von NL-Z2 führte, wird weiter unten im Zusammenhang mit dem Punktkopplungsmodell ausführlich beschrieben, da die im Rahmen dieser Arbeit erstellte Kraft für das RMF-PC-Modell auf genau die gleiche Art erstellt wurde. Tabelle 2.1 listet die Parameter der beiden Kräfte auf.

2.3 Punktkopplungsmodelle: RMF-PC

2.3.1 Die Punktkopplungsnaherung

Der Ansatz des Punktkopplungsmodells kann unter verschiedenen Gesichtspunkten motiviert werden. Eine Möglichkeit besteht darin, es als Grenzfall des RMF Modells zu betrachten, bei dem die Mesonenmassen unendlich gross sind bzw. die Impulsüberträge im Verhältnis zu den Mesonenmassen vernachlässigt werden können. Die Masse der Mesonen hängt invers mit der Reichweite der durch sie parametrisierten Wechselwirkung zusammen, so dass eine unendlich hohe Masse die Reichweite auf einen Punkt zusammenschnüren lässt. Dieser Zusammenhang ergibt sich einfach aus der Energie-Zeit-Unschärfe

$$\Delta E \Delta t \leq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.20)$$

Dabei ist allerdings zu beachten, dass diese Unschärferelation keine Beziehung zwischen nichtvertauschenden Observablen ist: es existiert kein Operator für die Zeit.

Formal lässt sich dieser Grenzprozess folgendermaßen durchführen: Wir betrachten dazu den Propagator für ein skalares Meson (z.B. das σ -Meson) im Impulsraum

$$D(x, y) = - \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{e^{-ip(x-y)}}{p^2 - m^2 + i\epsilon}. \quad (2.21)$$

Mit seiner Hilfe lässt sich der Operator des Mesonenfeldes berechnen gemäß

$$\hat{\phi}(x) = g \int d^4 y D(x-y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(y). \quad (2.22)$$

Den Propagator können wir umschreiben in

$$D(x, y) = \frac{1}{m^2} \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-ip(x-y)} \left(1 - \frac{p^2 + i\epsilon}{m^2}\right)^{-1}. \quad (2.23)$$

Für die folgende Betrachtung gelte $\epsilon \rightarrow 0$. Durch das Pauli-Prinzip sind im Atomkern Stoßprozesse stark unterdrückt, was zu einer Modifizierung des freien Propagators führen wird. In unserer Untersuchung können wir aber annehmen, dass das formal unendliche Integral in (2.21) endlich ist, also ein natürlicher Impuls-Cutoff existiert. Aus diesem Grunde erscheint die Annahme

$$\frac{p^2}{m^2} < 1 \quad (2.24)$$

gerechtfertigt, d.h., dass die maximalen Impulse von der Ordnung der Masse des Mesons sind. Dies erlaubt uns, den Propagator zu entwickeln:

$$D(x, y) = \frac{1}{m^2} \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \left(1 + \frac{p^2}{m^2} + \frac{p^4}{m^4} + \frac{p^6}{m^6} + \dots\right) e^{-ip(x-y)}. \quad (2.25)$$

Diesen wollen wir nun nach dem ersten Glied der Entwicklung abbrechen. Wenn wir formal zu (2.21) zurückkehren, erhalten wir daraus

$$D(x, y) = \frac{1}{m^2} \delta^4(x-y). \quad (2.26)$$

Setzen wir dies in (2.22) ein, erhalten wir

$$\hat{\phi}(x) = \frac{g}{m^2} \hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x). \quad (2.27)$$

Auf diese Weise haben wir explizit mesonische Freiheitsgrade aus dem Modell eliminiert. Wird noch ein weiterer Term in der Entwicklung des Propagators berücksichtigt, tauchen die Ableitungsterme auf, die im Punktkopplungsmodell zur Beschreibung endlicher Kerne erforderlich sind.

Man kann die ursprüngliche Idee zurückverfolgen bis zum Entwurf des *Nambu-Jona-Lasinio-Modells* (NJL-Modell) [Nam61, Nam61b, Kle92]. Dieses Modell war zunächst für nukleonische Freiheitsgrade zur einheitlichen Beschreibung von nukleonischen und pionischen Zuständen formuliert worden. Die Motivation dafür lag in einer möglichen Umschreibung der freien Dirac-Gleichung gemäß

$$\begin{aligned} E\psi_1 &= \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\psi_1 + m\psi_2, \\ E\psi_2 &= -\vec{\sigma} \cdot \psi_2 + m\psi_1, \\ E_p &= \pm\sqrt{p^2 + m^2}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Dabei sind ψ_1 und ψ_2 Eigenzustände des Chiralitätsoperators γ_5 . Diese Form erinnert an die Beschreibung von elementaren Anregungen in einem Supraleiter.

Der Ansatz entstand aus 4-Fermionen-Termen, wobei bei seiner Konstruktion auf chirale Invarianz geachtet wurde:

$$\mathcal{L} = -\bar{\psi}\gamma_\mu\partial^\mu\psi + g_0\left[(\bar{\psi}\psi)^2 - (\bar{\psi}\gamma_5\psi)^2\right]. \quad (2.29)$$

Mit Hilfe des *Fierz-Theorems* (siehe dazu Abschnitt 2.7.1) kann dies umgeformt werden in

$$\mathcal{L} = -\bar{\psi}\gamma_\mu\partial_\mu\psi - \frac{1}{2}g_0\left[(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)^2 - (\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_5\psi)^2\right]. \quad (2.30)$$

Die Formulierungen (2.29) bzw. (2.30) ähneln von der Struktur her dem Punktkopplungsmodell mit 4-Fermionen-Termen. Heute verwendet man das NJL-Modell überwiegend zur Beschreibung von Quarksystemen und Quarkmaterie unter diversen Bedingungen [Kle92]. Das NJL-Modell beschreibt allerdings nicht den Einschluss von Quarks. Ein aktuelles Forschungsgebiet ist der Anschluss an die hadronische Welt.

2.3.2 Eine Parametrisierung der T-Matrix

Eine andere Sichtweise des Punktkopplungsmodells wird durch das Konzept *effektiver Feldtheorien* begründet: Wir suchen nach einer lorentzkovarianten Parametrisierung der *effektiven* Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung (bzw. T-Matrix), die im Rahmen der in praktischen Rechnungen durchzuführenden Näherungen auch Vielkörpereffekte absorbieren muss (z.B. dichteabhängig sein wird). Eine relativistisch invariante Parametrisierung mit endlicher Reichweite führt z.B. auf das oben dargestellte RMF-FR-Modell. Der beim Punktkopplungsmodell gewählte Weg verzichtet auf die Einführung von Mesonen und parametrisiert die Kernkraft durch Bilinearformen (und Terme höherer Ordnung) in den nukleonischen Dichten und Strömen sowie deren Ableitungen. Die Schönheit dieses Ansatzes liegt darin, dass auf die phänomenologische Einführung von Wechselwirkungsteilchen verzichtet wird und der Ansatz für die effektive Wechselwirkung nach Kriterien der Ordnung in typischen Impulsüberträgen über der Massenskala entwickelt wird. Ein Abbruch dieser Entwicklung in Impulsen entspricht damit auch einem Cutoff in typischen Längenskalen. Auf diese Weise wird die Physik der kurzreichweitigen Skalen in den Ansatz und die Kopplungskonstanten des Modells absorbiert⁸.

⁸Siehe z.B. [Dob97] für die formale Behandlung dieser Thematik.

Der allgemeine Ansatz kann wie folgt formuliert werden:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \hat{\psi}(i\gamma_\mu\partial^\mu - m)\hat{\psi} \\
&+ \sum_{ij} \alpha_{ij} (\hat{\psi}\tau_i\Gamma_j\hat{\psi}) \cdot (\hat{\psi}\tau_i\Gamma^j\hat{\psi}) \\
&+ \sum_{ij} \delta_{ij} (\partial_\nu\hat{\psi}\tau_i\Gamma_j\hat{\psi}) \cdot (\partial^\nu\hat{\psi}\tau_i\Gamma^j\hat{\psi}) \\
&+ \dots \\
&+ \sum_{ij} \beta_{ij} (\hat{\psi}\tau_i\Gamma_j\hat{\psi})^3 \\
&+ \sum_{ij} \gamma_{ij} (\hat{\psi}\tau_i\Gamma_j\hat{\psi})^4 \\
&+ \dots \\
&+ \dots
\end{aligned}$$

(mit den Symbolen $\Gamma_j = 1, \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}, \gamma^5\gamma_\mu, \gamma^5$ und $\tau_i = 1, \vec{\tau}$).

D.h. wir können für jede Ordnung von Termen isoskalare oder isovektorielle Terme notieren und diese zusätzlich mit ersten oder höheren Ableitungen versehen. Diese einzelnen Ansätze können auch kombiniert werden. Bedingung dafür ist immer, dass die resultierende Lagrange-Dichte kovariant formuliert wird. Streng genommen handelt es sich hierbei um unendlich viele Terme. Geeignete Kriterien müssen deshalb die Anzahl und, noch wichtiger, die Bedeutung der einzelnen Terme eingrenzen. Ein Kriterium, das zur Charakterisierung der einzelnen Terme angewendet werden kann, ist die sogenannte *Natürlichkeit* der Kopplungskonstanten. Nach Stephen Weinberg [Wei79, Wei90] lässt sich die effektive NN-Wechselwirkung in Terme unterschiedlicher Ordnung entwickeln, wobei Terme mit höherer Ordnung immer unwichtiger werden sollten. Furnstahl et al. haben in Punktkopplungsmodellen [Fur98] dazu Untersuchungen angestellt und das Verhalten der verschiedenen Freiheitsgrade beim Anpassen der Parameter betrachtet. Sie haben auch gezeigt [Fur96], dass in Modellen mit endlicher Reichweite Kontaktterme, wie sie in dem Punktkopplungsmodell auftreten, in erster Näherung redundant sind und durch die mesonischen Anteile der Lagrange-Dichte absorbiert werden können. In Kapitel 10 diskutieren wir Natürlichkeit und ihre Anwendbarkeit auf Punktkopplungsmodelle ausführlich.

Die einzelnen Terme der Lagrange-Dichte, die in dieser Arbeit Anwendung finden, werden im folgenden Abschnitt motiviert.

2.3.3 Motivation der Terme

Die meisten Terme, die für eine erfolgreiche Beschreibung von endlichen Kernen notwendig sind, können durch die Erfahrungen mit Walecka-artigen Modellen motiviert werden:

- **Skalare und vektorielle Potenziale:** Sie sind die wichtigsten Bestandteile des Walecka-Modells und genügen, um die Sättigung von Kernmaterie beschreiben zu können.
- **Nichtlineare Terme:** Diese ändern gegenüber dem linearen Modell die Dichteabhängigkeit der Potenziale. Damit werden Vielkörpereffekte in die Mean-Field-Beschreibung absorbiert. Weiterhin wird die Kompressibilität K in Kernmaterie, die in linearen Modellen drastisch zu hoch ist ($\approx 500 - 600$ MeV), auf realistische Werte gesenkt.

- **Terme mit Ableitungen:** Sie entsprechen einer über den ersten Term hinausgehenden Entwicklung der Mesonenpropagatoren. Sie generieren eine spezielle Impulsabhängigkeit⁹ des Modells, welche wiederum zu einer endlichen Reichweite führt¹⁰. Den größten Beitrag liefern die Ableitungsterme an der Kernoberfläche¹¹.
- **Isovektorielle Terme:** Zur erfolgreichen Beschreibung von endlichen Kernen sind, wie in erweiterten Walecka-Modellen auch, isovektorielle Terme nötig¹². Der isovektorielle-vektorielle Kanal (dies entspricht im RMF Modell dem ρ -Meson) ist dabei von größter Bedeutung¹³.
- **Das Photon:** Das elektromagnetische Feld ist zu einer akkuraten Beschreibung von Atomkernen unerlässlich.

2.4 Die Lagrange-Dichte

Im Folgenden notieren wir die Lagrange-Dichte, die dem Punktkopplungs-Modell mit den oben diskutierten Termen entspricht.

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}^{\text{frei}} + \mathcal{L}^{4f} + \mathcal{L}^{\text{nichtl}} + \mathcal{L}^{\text{abl}} + \mathcal{L}^{\text{em}}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{\text{frei}} &= \hat{\psi}(i\gamma_\mu \partial^\mu - m)\hat{\psi}, \\ \mathcal{L}^{4f} &= -\frac{1}{2}\alpha_S(\hat{\psi}\hat{\psi})(\hat{\psi}\hat{\psi}) - \frac{1}{2}\alpha_V(\hat{\psi}\gamma_\mu\hat{\psi})(\hat{\psi}\gamma^\mu\hat{\psi}) - \frac{1}{2}\alpha_{\text{TV}}(\hat{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\hat{\psi}) \cdot (\hat{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\hat{\psi}), \\ \mathcal{L}^{\text{nichtl}} &= -\frac{1}{3}\beta_S(\hat{\psi}\hat{\psi})^3 - \frac{1}{4}\gamma_S(\hat{\psi}\hat{\psi})^4 - \frac{1}{4}\gamma_V[(\hat{\psi}\gamma_\mu\hat{\psi})(\hat{\psi}\gamma^\mu\hat{\psi})]^2, \\ \mathcal{L}^{\text{abl}} &= -\frac{1}{2}\delta_S(\partial_\nu\hat{\psi}\hat{\psi})(\partial^\nu\hat{\psi}\hat{\psi}) - \frac{1}{2}\delta_V(\partial_\nu\hat{\psi}\gamma_\mu\hat{\psi})(\partial^\nu\hat{\psi}\gamma^\mu\hat{\psi}) \\ &\quad - \frac{1}{2}\delta_{\text{TV}}(\partial_\nu\hat{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\hat{\psi}) \cdot (\partial^\nu\hat{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\hat{\psi}), \\ \mathcal{L}^{\text{em}} &= -e\hat{A}_\mu\hat{\psi}[(1-\tau_3)/2]\gamma^\mu\hat{\psi} - \frac{1}{4}\hat{F}_{\mu\nu}\hat{F}^{\mu\nu}. \end{aligned}$$

2.5 Die Näherungen

Die Freiheitsgrade des Punktkopplungsmodells sind bis zu diesem Punkt Quantenfelder. Da die Lösung unseres Problems auf feldtheoretischem Wege nicht möglich ist, müssen wir einige Näherungen einführen. Die beiden wichtigsten davon sind die *Mean-Field*- und die *No-Sea*-Näherung.

2.5.1 Die Mean-Field Näherung

Um von den Quantenfeldern auf mit dem Computer berechenbare Größen zu kommen, bilden wir den Erwartungswert der Lagrange-Dichte in einer Slater-Determinante

$$|\Psi\rangle = \prod_i \hat{a}_i^\dagger |0\rangle. \quad (2.31)$$

⁹Auch ohne diese Terme enthalten relativistische Modelle, bei denen die Nukleonen an ein skalares und ein vektorielles Potenzial an koppeln, bereits eine Impulsabhängigkeit, siehe z.B. [Due56].

¹⁰Diese Situation ist analog zu der Hartree-Fock-Beschreibung des Atomkerns mit Skyrme-Kräften.

¹¹Dies entspricht im Tropfenmodell der Oberflächenenergie.

¹²Sie entsprechen der Asymmetrieenergie des Tropfenmodells.

¹³Erweiterungen im isovektoriellen Bereich werden unten diskutiert.

Damit vernachlässigen wir alle Korrelationen¹⁴ zwischen den Elementarsystemen und behandeln sie als voneinander unabhängig. Auf diese Weise gehen wir von Quantenfeldern zu Wellenfunktionen in der Ortsraumdarstellung über.

Wir können die Feldoperatoren für die Nukleonen mit Hilfe von Erzeugern und Vernichtern (bzw. den korrespondierenden Quasiteilchenoperatoren) in einer Einteilchenbasis gemäß

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\vec{r}) &= \sum_a \bar{\psi}_a(\vec{r}) \hat{a}_a^\dagger, \\ \hat{\psi}(\vec{r}) &= \sum_b \psi_b(\vec{r}) \hat{a}_b\end{aligned}\tag{2.32}$$

entwickeln. Der normalgeordnete Erwartungswert einer Bilinearform in den Feldoperatoren ist nun

$$\langle \Psi | : \hat{\psi} \hat{\psi} : | \Psi \rangle = \sum_{a,b} \bar{\psi}_a \psi_b \langle \Psi | \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b | \Psi \rangle = \sum_a \bar{\psi}_a \psi_a.\tag{2.33}$$

Für Terme mit 4 oder mehr Fermionen entstehen neben den direkten (Hartree) Termen auch die Austausch (Fock) Terme. Sie sind eine unmittelbare Konsequenz des Pauli-Prinzips.

Wir werden weiter unten die einzelnen Terme im Detail untersuchen.

2.5.2 Die No-Sea Näherung

Die Summe in den Gleichungen der Feldoperatoren erstreckt sich prinzipiell über das gesamte Spektrum der Zustände positiver und negativer Energie. Diese unendliche Summe kann natürlich bei numerischen Rechnungen von Kernen nicht berücksichtigt werden. Deshalb beschränkt man sie in konkreten Anwendungen auf die *Valenznukleonen*, d.h. die Zustände positiver Energie:

$$\sum_i \rightarrow \sum_{i=1}^A.\tag{2.34}$$

Dadurch vernachlässigt man *Vakuumpolarisationseffekte*, d.h. die Interaktion der Zustände positiver Energie mit der Diracsee. Die Fehler, die innerhalb dieser Approximation entstehen, werden beim Fit in die Kopplungskonstanten des Modells absorbiert.

Es gibt verschiedene Untersuchungen, die Vakuumpolarisationskorrekturen in verschiedenen Ordnungen berücksichtigen [Aue86, Chi74, Chi76, Chi77, Hor84, Per86, Ser78]. In [Pan96] wurden die Zustände negativer Energie im unteren Potenzialtopf explizit berechnet¹⁵. Nach erneuter Anpassung der Parameter, die sich stark änderten, waren die Ergebnisse des resultierenden Modells aus diesen Untersuchungen jedoch wieder von gleicher Qualität wie die in der No-Sea-Näherung. Dies bedeutet, dass tatsächlich der Effekt der Vakuumpolarisation in den Parametern absorbiert wird. Zu bedenken ist jedoch, dass heutige, detaillierte Untersuchungen der RMF-Modelle doch Unterschiede feststellen könnten, die eine Einarbeitung der Korrekturen zur No-Sea-Näherung rechtfertigen und eventuell sogar stark befürworten würden.

Eine störungstheoretische Behandlung der Korrekturen ist fragwürdig (die effektiven Kopplungskonstanten sind größer als 1, oft gilt $g \approx 10$). Andere Effekte, die nicht berücksichtigt werden (z.B. Grundzustandskorrelationen), mögen deutlich grössere Einflüsse auf das Modell haben, so dass vielleicht Verbesserungen zuerst an anderer Stelle angebracht wären.

¹⁴Korrelationen, die durch das Pauli-Prinzip gegeben sind, sind davon ausgenommen.

¹⁵Sie wurden allerdings nicht bei der Berechnung der Kern-Potenziale berücksichtigt, so dass diese Rechnungen nicht selbstkonsistent waren.

2.5.3 Weitere Näherungen

Bei konkreten numerischen Berechnungen von Kernen werden oftmals noch eine Reihe weiterer Näherungen eingeführt, um das Problem handhabbar zu machen.

Bei der Berechnung von Grundzuständen von gerade-gerade-Kernen kann das System als zeitumkehrinvariant angenommen werden. Dies bedeutet, dass zu jedem Einteilchenzustand ψ ein linear unabhängiger Zustand $\mathcal{T}\psi$ existiert. Dabei bezeichnet \mathcal{T} den Zeitumkehroperator für Dirac-Spinoren

$$\mathcal{T} = -\gamma_1\gamma_3\mathcal{K}. \quad (2.35)$$

\mathcal{K} steht für die Vorschrift der komplexen Konjugation. Die Zustände ϕ und $\mathcal{T}\phi$ besitzen den gleichen Energie-Eigenwert des Einteilchen-Hamilton-Operators \hat{h} :

$$\begin{aligned} \hat{h}\psi &= \epsilon\psi, \\ \hat{h}(\mathcal{T}\psi) &= \epsilon(\mathcal{T}\psi). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Diese energetische Entartung der Zustände bezeichnet man als *Kramers-Entartung*. In numerischen Rechnungen muss nur einer der beiden Zustände mit seinen Quantenzahlen numerisch berechnet werden, der andere Zustand ergibt sich durch Anwendung der Zeitumkehrtransformation.

In zeitumkehrinvarianten Systemen verschwinden die räumlichen Komponenten der vektoriellen Dichten bzw. Ströme, es überlebt nur die zeitliche Komponente. Bei stationären Grundzuständen kann die zeitliche Entwicklung separiert werden, wir können sie schreiben als

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-i\epsilon t}. \quad (2.37)$$

Schliesslich entscheiden noch die zu berechnenden Kerne und die Aufgabenstellung die räumliche Symmetrie, in der die Berechnung durchzuführen ist. Im Anhang sind die zu lösenden Gleichungen in sphärischer und axialer Symmetrie dargestellt.

2.5.4 Das Verhalten der Terme unter Zeitumkehrinvarianz und Raumspiegelung

In Anbetracht der unterschiedlichen Näherungen, die bei der numerischen Berechnung von Atomkernen angewendet werden können, ist es hilfreich, sich die Transformationseigenschaften der unterschiedlichen Lorentz-Strukturen ($1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5\gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}$) zu betrachten. In diesem Abschnitt verwenden wir den Index S für die skalare Dichte, V für die Vektordichte, t für die Tensordichte. Ein zusätzliches P bezeichnet pseudoskalare bzw. vektorielle Terme.

Die Umkehrung der Zeitrichtung (\mathcal{T}) führt bei diesen Größen zu folgendem Verhalten:

$$\begin{aligned} \rho_S &\rightarrow \rho_S, \\ \rho_V^\mu &\rightarrow \rho_{V\mu}, \\ \rho_t^{\mu\nu} &\rightarrow -\rho_{t\mu\nu}, \\ \rho_{PS} &\rightarrow -\rho_{PS}, \\ \rho_{PV}^\mu &\rightarrow \rho_{PV\mu}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Inversionen des Raumes (Paritätstransformationen \mathcal{P}) führen zu

$$\begin{aligned} \rho_S &\rightarrow \rho_S, \\ \rho_V^\mu &\rightarrow \rho_{V\mu}, \\ \rho_t^{\mu\nu} &\rightarrow \rho_{t\mu\nu}, \\ \rho_{PS} &\rightarrow -\rho_{PS}, \\ \rho_{PV}^\mu &\rightarrow -\rho_{PV\mu}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Die Rechnungen dieser Arbeit betreffen nun Systeme, die zeitumkehr- und paritätsinvariant sind. Aus der Invarianz gegenüber Zeitumkehrtransformationen folgt, dass nur folgende Größen von Null verschieden sind: $\rho_S, \rho_V^0, \rho_t^{0i}$ und ρ_{PV}^0 . Bei der Forderung nach Invarianz unter Rauminversion überleben folgende Kombinationen: $\rho_S, \rho_V^0, \rho_t^{\mu\mu}$ und ρ_{PV}^i .

Fordert man nun Invarianz unter beiden Transformationen, überleben nur die skalare Dichte und die zeitliche Komponente der vektoriellen Dichte.

2.6 Die Bewegungsgleichungen in Hartree-Näherung

In der Hartree-Näherung werden die Fock-Terme vernachlässigt (bei RMF-FR-Modellen ist das äquivalent mit der Ersetzung der mesonischen Felder und ihrer Quellterme durch ihre Erwartungswerte vor der Berechnung des Erwartungswert der Lagrange-Dichte in einer Slater-Determinante). Formal erreichen wir dies durch das Ersetzen der Bilinearformen von Feldoperatoren durch ihre Erwartungswerte,

$$\hat{\psi}\hat{\psi} \longrightarrow \langle \hat{\psi}\hat{\psi} \rangle. \quad (2.40)$$

Die Mehrzahl der RMF-FR-Anwendungen werden in dieser Näherung durchgeführt, da die Berücksichtigung der Austauschsterme die Gleichungen um ein Vielfaches verkompliziert und den numerischen und zeitlichen Aufwand drastisch erhöht (siehe auch die obige Diskussion).

Unter Benutzung der Euler-Lagrange-Gleichungen für Felder erhalten wir für die Nukleonen die Dirac-Gleichung (im Folgenden notieren wir alle Gleichungen für stationäre Zustände von Kernen)

$$\left(i\vec{\gamma} \cdot \vec{\partial} + m + V_S + V_V\gamma_0 + V_{TV}\tau_3\gamma_0 + V_C[(1 - \tau_3)/2]\gamma_0 \right) \psi_\alpha = \gamma_0 \epsilon_\alpha \psi_\alpha. \quad (2.41)$$

Die von den Nukleonen erzeugten mittleren Potenziale sind gegeben durch

$$\begin{aligned} V_S &= \alpha_S \rho_S + \beta_S \rho_S^2 + \gamma_S \rho_S^3 + \delta_S \Delta \rho_S, \\ V_V &= \alpha_V \rho_V + \gamma_V \rho_V^3 + \delta_V \Delta \rho_V, \\ V_{TV} &= \alpha_{TV} \rho_{TV} + \delta_{TV} \Delta \rho_{TV}, \\ V_C &= e A_0. \end{aligned}$$

Die effektive Masse im Punktkopplungsmodell ist

$$m^* := m + \alpha_S \rho_S + \beta_S \rho_S^2 + \gamma_S \rho_S^3 + \delta_S \Delta \rho_S. \quad (2.42)$$

Durch die fehlende Faltung und das Entfallen von Mesonengleichungen tauchen die nichtlinearen Terme explizit in der effektiven Masse auf, was zu einer Modifizierung der Dichteabhängigkeit gegenüber RMF-FR-Modellen führt.

Dieses System von Gleichungen lässt sich iterativ lösen. Der gedämpfte Gradientenschritt, der dabei Verwendung findet, wird in Kapitel 5 dargestellt.

Im Unterschied zum Gleichungssystem des RMF-FR-Modells vereinfacht sich der numerische Aufwand bei der Berechnung der mittleren Felder bzw. Potenziale. Da sich diese einfach aus den Dichten und deren Ableitungen zusammensetzen, entfällt das iterative Lösen von Mesonenfeld-Gleichungen.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten numerischen Rechnungen werden alle mit dem Punktkopplungsmodell in Hartree-Näherung durchgeführt. Eine komplette Formulierung des korrespondierenden Hartree-Fock-Modells ist jedoch schon möglich, weshalb in den kommenden Abschnitten der Hartree-Fock Formalismus diskutiert werden soll. Eine Analyse des kompletten HF-Modells sowie die Erstellung eines Parametersatzes dafür ist eine sehr aufwendige Aufgabe, die im Rahmen dieser Arbeit nicht bearbeitet werden kann. Es ist dies aber sicherlich ein wichtiges Ziel für die nahe Zukunft.

A. Sulaksono hat im Rahmen seiner Doktorarbeit [Sul01] den Einfluss der Austauschterme, die sich aus den 4-Fermionen Termen ergeben, untersucht und eine deutliche Verbesserung des Modells gegenüber der Hartree-Version entdeckt. Dies führt ihn zu dem Schluß, dass die Austauschterme nicht adäquat in die direkten Terme absorbiert werden können. Dies wiederum bedeutet, dass die Durchführung von relativistischen Hartree-Fock-Rechnungen ein wichtiges Projekt ist, da hier deutliche Änderungen (hoffentlich Verbesserungen) gegenüber den Hartree-Rechnungen erwartet werden können. Sie können auch den isovektoriellen Kanal des RMF-Modells verändern [Mad01] (siehe auch die Diskussion zu Kernmaterie in Kapitel 8 und die Diskussion in Kapitel 9).

2.7 Die Bewegungsgleichungen in Hartree-Fock-Näherung

Werden die Austauschterme berücksichtigt, spricht man von der Hartree-Fock-Näherung. Relativistische Hartree-Fock-Rechnungen mit Mesonenaustausch sind aufgrund der gekoppelten Gleichungen für die Nukleonen und die Mesonenfelder mit hohem numerischen Aufwand verbunden. Es wurden Rechnungen sowohl im Formalismus des RMF-FR-Modells [Bro78, Mil74, Mil75, Zha93, Boe94a, Boe94b, Gre00] als auch mit Dichtefunktionalmethoden [Sch95a, Sch95b] durchgeführt. Die Struktur der Austauschterme in RMF-PC-Modellen wurde in [Hoc94, Man88] diskutiert. Ihre Struktur führt auf eine Dirac-Gleichung, in der die zu berechnende Einteilchen-Wellenfunktion wieder einkoppelt. Wir wollen dies anhand einer einfachen Lagrange-Dichte des RMF-PC-Modells betrachten:

$$\mathcal{L} = \hat{\psi}(i\gamma_\mu\partial^\mu - m)\hat{\psi} - \frac{1}{2}\alpha_S(\hat{\psi}\hat{\psi})^2. \quad (2.43)$$

Sie beschreibt eine Sorte von Nukleonen mit einer isoskalaren-skalaren Wechselwirkung. Bilden wir den Erwartungswert in einer Slater-Determinante, so ergibt sich folgende Bewegungsgleichung:

$$(i\gamma_\mu\partial^\mu - m)\psi_i - \alpha_S \left[\sum_a \bar{\psi}_a\psi_a \right] \psi_i + \alpha_S \sum_b (\bar{\psi}_b\psi_i)\psi_b = 0. \quad (2.44)$$

Dieses Gleichungssystem zu lösen ist weitaus langwieriger und komplizierter als beispielsweise die Lösung der Hartree-Gleichungen. Dies gilt erst recht bei der Berücksichtigung aller linearen und nichtlinearen Terme.

Das Punktkopplungsmodell bietet nun aber die Möglichkeit, die Austauschterme in einer Form zu formulieren, die den direkten Termen gleicht. Dadurch erhalten sie die Struktur von Potenzialen. Auf diese Weise lässt sich für die Nukleonen eine Dirac-Gleichung formulieren, die strukturell der Gleichung in Hartree-Näherung gleicht, mit dem Unterschied, dass die Form der Potenziale komplizierter ist. Dies entspricht der Abbildung einer Hartree-Fock-Theorie auf eine Hartree-Theorie. Eine ähnliche Situation liegt bei der Skyrme-Hartree-Fock-Methode vor: die δ -Funktionen, die die Ortsabhängigkeit beschreiben, führen zu einem Zusammenbrechen der Integrale in den Austauschtermen, so dass sich diese als Potenziale schreiben lassen.

Im nächsten Abschnitt wollen wir die Technik beschreiben, die eine solche Umschreibung ermöglicht.

2.7.1 Fierz-Transformationen

Das Prinzip

Fierz-Transformationen (siehe z.B. [Nac86, Gre89, Zon94]) lösen das Problem, Terme der Form

$$(\bar{\psi}_a\Gamma_j\psi_b)(\bar{\psi}_c\Gamma_j\psi_d) \quad (2.45)$$

in Kombinationen zu entwickeln, bei denen zwei Wellenfunktionen vertauscht sind. Dabei sind die Γ_j die Dirac-Strukturen ($\Gamma_i = 1, \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}, \gamma^5\gamma_\mu, \gamma^5$).

Man sucht die Entwicklung

$$(\bar{\psi}_a \Gamma_j \psi_b)(\bar{\psi}_c \Gamma_j \psi_d) = \sum_i c_i (\bar{\psi}_a \Gamma_i \psi_d)(\bar{\psi}_c \Gamma_i \psi_b). \quad (2.46)$$

Die für den Formalismus des Punktkopplungsmodells relevanten Terme haben die Gestalt

$$(\bar{\psi}_a \Gamma_j \psi_b)(\bar{\psi}_b \Gamma_j \psi_a) \quad (2.47)$$

(es gibt nur zwei verschiedene Indizes). Gesucht werden die Koeffizienten c_i .

Diese Entwicklung ist auch für Terme höherer Ordnung möglich. Dabei ergeben sich jedoch weitere Schwierigkeiten:

- Die Basis der Kombinationen, in die entwickelt werden soll, wird sehr groß.
- Die Basiselemente sind nicht *a priori* klar und müssen gefunden werden.

Eine analytische Lösung des Problems wird für Terme höherer Ordnung schnell unübersichtlich und schwer handhabbar. Eine Lösung mit Hilfe von algebraischen Operationen auf dem Computer ist möglich. Das Problem der Koeffizientenbestimmung wird dabei auf das Lösen eines linearen Gleichungssystems zurückgeführt. Diese Methode wird in der Publikation [Mar01] detailliert erklärt. Mit ihrer Hilfe können im Prinzip Entwicklungen in beliebiger Ordnung transformiert werden. Dabei kann leider die Auswahl der Basiselemente nicht automatisiert werden. Nach heutigem Kenntnisstand sind jedoch Terme von höherer als vierter Ordnung vorläufig nicht notwendig.

Transformationen für Isektoren und Dirac-Spinoren

In unserem Modell werden die Nukleonen als Isospinoren beschrieben, deren Komponenten Dirac-Spinoren sind. Um die Umschreibung zu bewerkstelligen, müssen wir folglich die Fierz-Transformationen in den jeweiligen Räumen ausführen. Wir notieren im Anhang die Fierz-Transformationen für Isospinoren und Dirac-Spinoren für die 4-Fermionen-Terme und die skalaren 6- und 8-Fermionen-Terme.

2.7.2 Transformation auf Quasiteilchen

Damit man das Wick'sche Theorem zur Auswertung von Produkten von fermionischen Feldoperatoren im Grundzustand des Kerns (einer Slater-Determinante) benutzen kann, muss man vorher die Erzeuger und Vernichter von Einteilchenzuständen ($\hat{\alpha}_i^\dagger$ und $\hat{\alpha}_i$) auf Quasiteilchen transformieren. Dies geschieht meistens auf folgende Art:

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_i^\dagger &= \hat{\alpha}_i^\dagger, & (i > A) \\ \hat{\beta}_i^\dagger &= \hat{\alpha}_i, & (i \leq A) \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_i &= \hat{\alpha}_i, & (i > A) \\ \hat{\beta}_i &= \hat{\alpha}_i^\dagger, & (i \leq A) \end{aligned} \quad (2.49)$$

Für die neuen Operatoren gilt

$$\hat{\beta}_i |\Psi\rangle = 0 \quad \text{für alle } i, \quad (2.50)$$

der Kern ist der neue Vakuumszustand. Eine verallgemeinerte Transformation auf Quasiteilchen – die *Bogolyubov-Transformation* – wird uns erneut im Rahmen der BCS-Theorie in Kapitel 3 begegnen.

2.7.3 Erwartungswerte mit Austauschtermen

Die Erwartungswerte der 6- und 8-Fermionen-Terme in der Lagrange-Dichte können mit Hilfe des Wick'schen Theorems ausgewertet werden. Wir notieren sie hier für den Fall von reinen Protonen- bzw. Neutronenzuständen (die ψ sind keine Isektoren).

Der Erwartungswert der 6-Fermionen-Terms ist für den skalaren Fall

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | : (\hat{\psi}\hat{\psi})^3 : | \Phi \rangle &= \sum_{\alpha} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\alpha}) \sum_{\beta} (\bar{\psi}_{\beta}\psi_{\beta}) \sum_{\gamma} (\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\gamma}) \\
&- 3 \sum_{\alpha} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\alpha}) \sum_{\gamma,\delta} (\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\delta})(\bar{\psi}_{\delta}\psi_{\gamma}) \\
&+ 2 \sum_{\alpha,\beta,\gamma} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\beta})(\bar{\psi}_{\beta}\psi_{\gamma})(\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\alpha}).
\end{aligned} \tag{2.51}$$

Gleichermaßen erhalten wir für den skalaren 8-Fermionen Term

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | : (\hat{\psi}\hat{\psi})^4 : | \Phi \rangle &= \sum_{\alpha} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\alpha}) \sum_{\beta} (\bar{\psi}_{\beta}\psi_{\beta}) \sum_{\gamma} (\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\gamma}) \sum_{\delta} (\bar{\psi}_{\delta}\psi_{\delta}) \\
&- 6 \sum_{\gamma} (\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\gamma}) \sum_{\delta} (\bar{\psi}_{\delta}\psi_{\delta}) \sum_{\alpha,\beta} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\beta})(\bar{\psi}_{\beta}\psi_{\alpha}) \\
&+ 8 \sum_{\alpha} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\alpha}) \sum_{\gamma,\beta,\delta} (\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\beta})(\bar{\psi}_{\beta}\psi_{\delta})(\bar{\psi}_{\delta}\psi_{\gamma}) \\
&+ 3 \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\beta})(\bar{\psi}_{\beta}\psi_{\alpha})(\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\delta})(\bar{\psi}_{\delta}\psi_{\gamma}) \\
&- 6 \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} (\bar{\psi}_{\alpha}\psi_{\beta})(\bar{\psi}_{\beta}\psi_{\gamma})(\bar{\psi}_{\gamma}\psi_{\delta})(\bar{\psi}_{\delta}\psi_{\alpha}).
\end{aligned} \tag{2.52}$$

2.7.4 Die Terme mit Ableitungen

Die Terme in der Lagrange-Dichte, bei denen Ableitungen auf die Dichten und Ströme wirken, lassen sich ähnlich wie die 4-Fermionen-Terme ohne Ableitungen Fierz-transformieren. Für den skalaren 4-Fermionen-Term ergibt sich in der Wirkung für den Austauschterm

$$\begin{aligned}
\int d^3x \sum_{a,b} \partial_{\nu}(\bar{\psi}_a\psi_b)\partial^{\nu}(\bar{\psi}_b\psi_a) &= \sum_i \sum_{a,b} \int d^3x \left[(\bar{\psi}_a\Gamma_i\partial^{\nu}\psi_a)(\bar{\psi}_b\Gamma_i\partial_{\nu}\psi_b) \right. \\
&+ 2(\bar{\psi}_a\Gamma_i\psi_a)(\partial^{\nu}\bar{\psi}_b\partial_{\nu}\psi_b) \\
&\left. + (\partial_{\nu}\bar{\psi}_a\Gamma_i\psi_a)(\partial^{\nu}\bar{\psi}_b\Gamma_i\psi_b) \right].
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Um die Gleichung zu verkürzen, werden hier – wie auch in der folgenden Gleichung – die Koeffizienten aus der Fierz-Transformation in die Γ_i hineingezogen. Durch Anwendung der Euler-Lagrange-Gleichungen erhält man hieraus wie gewohnt die Bewegungsgleichungen für die Nukleonen. Die Struktur der Ableitungsterme, die aus dem Austauschterm herrühren, führt dazu, dass sich zusätzliche erste und zweite Ableitungen auf die Wellenfunktion ergeben.

Wir schreiben hier – in Verbindung mit dem Beitrag aus der freien Dirac-Gleichung – nur die Beiträge aus den Ableitungstermen explizit auf. Dabei soll über alle doppelt auftretenden Indices summiert werden. Die sich ergebende Gleichung kann folgendermaßen notiert werden:

$$\left(i\gamma_{\mu}\partial^{\mu} - m - 4 \left[\partial_{\mu}\bar{\psi}_a\Gamma_j\psi_a \right] \Gamma_j\partial^{\mu} - 2 \left[\bar{\psi}_a\Gamma_j\psi_a \right] \Gamma_j\partial_{\mu}\partial^{\mu} \right)$$

$$- 2 \left[\partial_\mu \partial^\mu \bar{\psi}_a \Gamma_j \psi_a \right] \Gamma_j \psi_i = 0. \quad (2.54)$$

Diese Gleichung enthält zweite Ableitungen, die auf die Wellenfunktion wirken, und ist aus diesem Grund keine Dirac-Gleichung mehr. Sie ist damit auch keine Prozessgleichung mehr. Die zweiten Ableitungen in den räumlichen Koordinaten sind eine Folge der Nichtlokalität der Gleichungen. Die zweiten Ableitungen in der Zeit drücken die Retardierung aus, die den Gleichungen innewohnt.

Im Rahmen dieser Arbeit kann keine Umformulierung dieser Terme erfolgen, die die Struktur der Dirac-Gleichung gewährleistet und auf Terme führt, die formal den direkten Termen ähneln. Denkbar wäre der Versuch einer Linearisierung dieser Gleichung, die aber aller Voraussicht nach auf Spinoren mit mehr als vier Komponenten führen würde. Nützlich wäre auch ein Verfahren, das mit Hilfe von kontrollierbaren Näherungen eine Umschreibung dieser Terme in direkte Terme ermöglichen würde. Die Lösung dieser Aufgabe wird es ermöglichen, das Punktkopplungs-Hartree-Fock in geschlossener Form zu notieren und schließlich auch anzuwenden.

2.8 Erweiterungen des Hartree-Modells

Das oben dargestellte Modell lässt sich natürlich noch in vielerlei Hinsicht erweitern. Im Folgenden werden einige naheliegende Erweiterungen des Modells formal vorgestellt. In Kapitel 7 werden die erweiterten Parametersätze und die Ergebnisse numerischer Rechnungen diskutiert.

2.8.1 Einführung eines nichtlinearen isovektoriell-vektoriellen Terms

Die nichtlinearen Terme des RMF-PC-Modells wurden bisher nur im isoskalaren Kanal der effektiven Wechselwirkung formuliert. Eine mögliche Erweiterung des Modells ist ein nichtlinearer Term der isovektoriellen Vektordichte:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} \gamma_{\text{TV}} [(\hat{\psi} \gamma_\mu \vec{\tau} \hat{\psi}) \cdot (\hat{\psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \hat{\psi})]^2. \quad (2.55)$$

2.8.2 Einführung eines linearen isovektoriell-skalaren Terms

In dem bisher formulierten Modell liegt die gesamte isovektorielle Abhängigkeit der effektiven Wechselwirkung im isovektoriellen-vektoriellen Bereich. Eine Einführung von isovektoriellen-skalaren Termen ist ebenso denkbar. Der einfachste davon ist der 4-Fermionen-Term

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \alpha_{\text{TS}} (\hat{\psi} \vec{\tau} \hat{\psi}) \cdot (\hat{\psi} \vec{\tau} \hat{\psi}). \quad (2.56)$$

Dies entspricht dem δ -Meson im RMF-FR-Modell.

Zusätzlich dazu kann der korrespondierende Term mit Ableitungen der isovektoriellen-skalaren Dichte eingeführt werden:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \delta_{\text{TS}} \partial_\mu (\hat{\psi} \vec{\tau} \hat{\psi}) \partial^\mu (\hat{\psi} \vec{\tau} \hat{\psi}). \quad (2.57)$$

2.8.3 Eine Vektor-Ableitungs-Kopplung

Auf Lorentz-invariante Weise lässt sich ein 4-Fermionen Term folgender Art konstruieren:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \alpha_{\text{DV}} (\hat{\psi} \gamma_\mu \hat{\psi}) \partial^\mu (\hat{\psi} \hat{\psi}). \quad (2.58)$$

Dieser Term liefert die folgenden Beiträge zu dem skalaren und vektoriellen Potenzial:

$$V_S^{\text{DV}} = -\frac{1}{2} \alpha_{\text{DV}} \partial_\mu \rho_V^\mu, \quad (2.59)$$

$$V_V^{\text{DV}} = +\frac{1}{2} \alpha_{\text{DV}} \partial_\mu \rho_S. \quad (2.60)$$

Die beiden Terme treten mit unterschiedlichem Vorzeichen auf. Der Unterschied in den Beiträgen zu den beiden Potenzialen ist gerade durch die Ableitung der Differenz von skalarer und vektorieller Dichte gegeben. Bei Berücksichtigung von isovektoriellen und pseudoskalaren bzw. pseudovektoriellen Größen lässt sich so ein Term konstruieren, der in der Punktkopplungsnaheung

$$\hat{\pi} \rightarrow \hat{\psi} \gamma^5 \vec{\tau} \hat{\psi} \quad (2.61)$$

der pseudovektoriellen Kopplung der Pionen an die Nukleonen in RMF-FR-Modellen entspricht:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \alpha_{\text{TDV}} (\hat{\psi} \gamma_\mu \gamma^5 \vec{\tau} \hat{\psi}) \partial^\mu (\hat{\psi} \gamma^5 \vec{\tau} \hat{\psi}). \quad (2.62)$$

2.8.4 Der Coulomb-Austauschterm in der Slater-Näherung

In nichtrelativistischen Skyrme-Hartree-Fock Rechnungen beträgt der Beitrag des Coulombpotenzials zum Energiefunktional

$$\mathcal{E}_{\text{coulomb}} = e^2 \frac{1}{2} \int \int d^3r d^3r' \frac{\rho_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{3}{4} e^2 \left(\frac{3}{4}\right)^{1/3} \int d^3r [\rho_p(\vec{r})]^{4/3}. \quad (2.63)$$

Dabei bezeichnet $\rho_p(\vec{r})$ die Protonendichte. Der zweite Term ist der Austauschterm der Coulombkraft in der Slater-Näherung. In zukünftigen Punktkopplungsmodellen könnte dieser Term berücksichtigt werden.

2.8.5 Gemischte Terme höherer Ordnung

Das gegenwärtige Modell enthält nichtlineare Terme als Potenzen der skalaren bzw. vektoriellen Dichte. Natürlich können auch Terme als Produkte unterschiedlicher Dichten konstruiert werden. Dies kann geschehen sowohl für isoskalare als auch für isovektorielle Dichten bzw. Mischungen von ihnen. Zwangsbedingung hierfür ist jeweils, dass die Lagrange-Dichte ein Lorentz- und Isoskalar sein muss. Wir wollen im Folgenden den Einfluß zusätzlicher Terme innerhalb der Hartree-Näherung für zeitumkehrinvariante Systeme betrachten. Der einfachste Term dritter Ordnung, der die isoskalare skalare und vektorielle Dichte mischt, ist

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \beta_{SV} (\hat{\psi} \hat{\psi}) (\hat{\psi} \gamma_\mu \hat{\psi}) (\hat{\psi} \gamma^\mu \hat{\psi}). \quad (2.64)$$

In vierter Ordnung ist der Term

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \gamma_{SV} (\hat{\psi} \hat{\psi}) (\hat{\psi} \hat{\psi}) (\hat{\psi} \gamma_\mu \hat{\psi}) (\hat{\psi} \gamma^\mu \hat{\psi}) \quad (2.65)$$

möglich. Diese Terme ergeben – im Rahmen der üblichen Näherungen – zusätzliche Beiträge zu den mittleren Potenzialen:

$$\begin{aligned} V_S^{\text{SV}} &= \frac{1}{2} \beta_{SV} \rho_{V0}^2 + \gamma_{SV} \rho_{V0}^2 \rho_S, \\ V_V^{\text{SV}} &= \beta_{SV} \rho_S \rho_{V0} + \gamma_{SV} \rho_S^2 \rho_{V0}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Sie liefern, im Gegensatz zu denen, die bereits im oben diskutierten Modell enthalten sind, Beiträge zum skalaren und vektoriellen Potenzial mit gleichem Kopplungsparameter. Deshalb kann man erwarten, dass sie bei der Anpassung der Kopplungskonstanten sensitiv auf die Differenz von skalarem und vektoriellen Potenzial reagieren. Hier lohnen sich in der Zukunft sorgfältige und systematische Untersuchungen.

An dieser Stelle ist auch ein Vorteil dieses Modells gegenüber RMF-Modellen mit endlicher Reichweite zu erkennen: Die Hinzunahme dieser Terme kostet nicht viel Rechenzeit (lediglich die zu ihrer Berechnung). Fügt man vergleichbare Terme im RMF-FR-Modell dazu, führt dies zu einer Kopplung

der mesonischen Gleichungen. Um die Bedeutung dieser Art von Termen zu untersuchen, ist das RMF-PC-Modell die ideale Basis. Jeder neue Term sollte aber physikalisch motiviert werden, damit das Verständnis des nuklearen Vielkörperproblems zusammen mit der Anzahl der Parameter wachsen kann.

2.8.6 Terme mit Ableitungen höherer Ordnungen und Hybrid-Modelle

Terme mit höheren Ableitungen entsprechen einer weitergehenden Entwicklung der mesonischen Propagatoren und damit auch der Hinzufügung von mehr effektiver Reichweite des Modells. Die Präsenz höherer Ableitungen in der Lagrange-Dichte erfordert eine Erweiterung der Euler-Lagrange-Gleichungen zur Gewinnung der korrespondierenden Bewegungsgleichungen. Wie wir in Kapitel 7 sehen werden, absorbieren die Parameter der Ableitungsterme Effekte, die über die reine Entwicklung der mesonischen Propagatoren hinausgehen. Es ist interessant zu beobachten, wie sich die Hinzunahme höherer Ableitungsterme auf die bereits vorhandenen Parameter auswirkt.

Gleichzeitig muss über die Entwicklung eines *Hybrid*-Modells nachgedacht werden, das Aspekte beider RMF-Varianten enthält: neben den mesonischen Termen des RMF-FR fügt man auch genuine Ableitungsterme, wie sie das RMF-PC enthält, hinzu. Die Wichtigkeit solcher Ableitungsterme ist in Dichtefunktionaltheorien (siehe nächster Abschnitt) bekannt.

2.8.7 Produkte isoskalarer und isovektorieller Terme

Eine ebenfalls denkbare Erweiterung des RMF-PC-Modells besteht in der Einführung von Termen in die Lagrange-Dichte, die aus Produkten isoskalarer und isovektorieller Terme bestehen. Unter Verwendung der isovektoriell-vektoriellen Dichte ρ_{TV} kann z.B. bis maximal vierter Ordnung folgender Term konstruiert werden:

$$\mathcal{L}_{TVSV} = (\hat{\psi} \vec{\tau} \gamma_\mu \hat{\psi}) \cdot (\hat{\psi} \vec{\tau} \gamma^\mu \hat{\psi}) \left[\beta_{TVS} (\hat{\psi} \hat{\psi}) + \gamma_{TVS} (\hat{\psi} \hat{\psi})^2 + \gamma_{TVV} (\hat{\psi} \gamma_\mu \hat{\psi}) (\hat{\psi} \gamma^\mu \hat{\psi}) \right]. \quad (2.67)$$

Terme dieser Art, die auch in [Hor01a, Hor01b] verwendet werden, verursachen eine deutliche Änderung der Dichteabhängigkeit des asymmetrischen Kanals der Wechselwirkung. Wie wir im Kapitel 7 sehen werden, führen Erweiterungen des Modells mit rein isovektoriellen Termen zu keinen signifikanten Veränderungen im isovektoriellen Kanal, so dass der Ansatz (2.67) in Zukunft dringend untersucht werden sollte.

2.9 Zusammenhang mit Dichtefunktionaltheorien

Das *Hohenberg-Kohn-Theorem* [Hoh64] besagt, dass der Grundzustand eines fermionischen Vielkörpersystems (der Spin wird in der ursprünglichen Formulierung nicht berücksichtigt), exakt und unabhängig von der Zahl der Elementarsysteme durch ein Energiefunktional beschrieben werden kann, das nur von der lokalen Dichte abhängt. Diese Beschreibung umfasst damit prinzipiell alle Grundzustandskorrelationen.

Dieses Theorem wurde von *Kohn* und *Scham* auf Systeme mit Spinfreiheitsgraden erweitert [Koh65]. Eine Verallgemeinerung ist die Formulierung des Theorems für relativistische Systeme [Spe92]. Die starke Aussage des Theorems ist, dass in jedem Fall eine exakte Beschreibung des betrachteten Systems existiert. Es gibt allerdings keine Auskunft darüber, wie das korrespondierende Energiefunktional aussieht, oder wie man es erhalten kann.

Das in dieser Arbeit untersuchte Punktkopplungsmodell entspricht der relativistischen Version des Theorems. Es kann folgendermaßen formuliert werden [Dre90]:

”Die exakten skalaren und vektoriellen Dichten, die Energie und das chemische Potenzial für das voll wechselwirkende Viel-Fermionen System können reproduziert werden in einer Beschreibung von (Quasi)-Fermionen, die sich in angemessen definierten lokalen, klassischen Feldern bewegen.“

Dies eröffnet auch eine Möglichkeit für künftige Untersuchungen des Punktkopplungsmodells. Modifikationen und Erweiterungen des Modells können direkt am Energiefunktional vorgenommen werden, ohne den Umweg über die Lagrange-Dichte zu gehen. Dabei sind auch Modifikationen möglich, die sich gar nicht oder nur umständlich in der Lagrange-Dichte formulieren lassen. Die gekoppelten Gleichungen lassen sich dann über die Minimierung der Energie des Systems erhalten. Dies lässt sich für effektive Theorien ohne weiteres rechtfertigen. Auf der anderen Seite büßt man die elegante Formulierung durch eine relativistische effektive Feldtheorie ein.

Aus der Sicht der Dichtefunktionaltheorie können effektive Modelle der Kernstruktur als Näherungen an das exakte (aber leider noch unbekannt) Dichtefunktional interpretiert werden. Insofern erhalten sie auch automatisch Korrelationen und Vielkörpereffekte. Ein ähnlicher Zugang wurde bei den Skyrme-Kräften SkI3 und SkI4 gewählt. Dabei wurde der Standard-Ansatz für das Spin-Bahn-Potenzial auf eine Art erweitert bzw. verallgemeinert, die sich nicht im Rahmen eines Zweinukleonen Potentials formulieren lässt. Auch in diesen Fällen ist der fundamentale Ansatz das Energiefunktional.

Es ist zudem möglich, in diesem Kontext Terme in die Lagrange-Dichte einzuführen, die von Termen des Skyrme-Energiefunktionals inspiriert sind (siehe dazu obige Diskussion zur Coulomb-Kraft). Eine mögliche Wahl (dargestellt für den isoskalaren-skalaren Fall) ist

$$\mathcal{L} = \sum_a \bar{\psi}_a (i\gamma_\mu \partial^\mu - m) \psi_a - \mu \left(\sum_b \bar{\psi}_b \psi_b \right)^{\lambda+1}. \quad (2.68)$$

Der Parameter λ ist hier nicht auf ganze Zahlen begrenzt. Die Lagrange-Dichte wird von Anfang an in der Hartree-Näherung notiert, da nicht-ganzzahlige Potenzen von Feldoperatoren zu erheblichen Problemen führen würden. Das Potenzieren von klassischen C-Zahlen bereitet hingegen keine Schwierigkeiten. Dieser Ansatz führt auf die Dirac-Gleichung

$$\left[i\gamma_\mu \partial^\mu - m - \mu(1 + \lambda) \sum_b (\bar{\psi}_b \psi_b)^\lambda \right] \psi_a = 0. \quad (2.69)$$

Auf äquivalente Weise können auch isoskalar- und isovektoriell-vektorielle Terme eingeführt werden. Hier müssen zukünftige Untersuchungen zeigen, ob diese verallgemeinerte Parametrisierung die Dichteabhängigkeit des Modells und damit seine Vorhersagekraft signifikant verbessern.

Eine andere Möglichkeit der Modifizierung der Dichteabhängigkeit des Modells besteht in der Einführung dichteabhängiger Kopplungskonstanten [Vre01].

2.10 Der nichtrelativistische Grenzfall des Modells

Eine Untersuchung des nichtrelativistischen Grenzfalls des Punktkopplungsmodells und der Vergleich mit dem Skyrme-Hartree-Fock-Modell wurde von A. Sulaksono im Rahmen seiner Doktorarbeit durchgeführt [Sul01]. Die Motivation für diese Untersuchung rührt unter anderem daher, dass bei diesem Grenzprozess keine Näherungen aufgrund der endlichen Reichweite der Mesonen durchgeführt werden müssen. Auf diese Weise kann die Rolle der nichtlinearen Terme besonders präzise studiert werden. Bisherige Untersuchungen zum Zusammenhang zwischen dem RMF- und dem SHF-Modell finden sich z.B. in [Hor81, Bou83, Thi85, Thi86, Rei89].

Ein wichtiges Ergebnis dieser Untersuchungen ist, dass sich die Spin-Bahn-Kraft des RMF-PC-Modells im nichtrelativistischen Grenzfall und die der Skyrme-Kräfte in den nichtlinearen Termen

unterscheiden. Während Modifikationen der isovektoriellen Eigenschaften der Skyrme-Kräfte bereits vorgenommen werden ¹⁶ [Rei95], fehlt noch eine ausführliche Exploration der Dichteabhängigkeit im Spin-Bahn-Potenzial. Vorschläge zu nichtlinearen Erweiterungen werden zwar in der Referenz [Pea94] gemacht, doch wird für diese Erweiterungen kein Parametersatz erstellt, der einen quantitativen Vergleich mit anderen Mean-Field-Modellen ermöglicht. Zudem unterscheidet sich der dort diskutierte Ansatz von den Vorhersagen, die sich aus dem nichtrelativistischen Grenzfall des Modells ergeben. Wie wir in Kapitel 8 sehen werden, ist für die akkurate Beschreibung von Spin-Bahn-Aufspaltungen keine endliche Reichweite vonnöten, beide RMF-Varianten besitzen in etwa die gleiche Genauigkeit bezüglich dieser Observablen. Dies bedeutet, dass die Dichteabhängigkeit des Punktkopplungsmodells dafür geeignet ist und deshalb auch im nichtrelativistischen Grenzfall die Qualität der Skyrme-Kraft verbessern könnte. Hier lohnen sich zukünftige Untersuchungen.

2.11 Die Frage nach Dynamik

In diesem Abschnitt soll ein kurzer Ausblick auf zukünftige Anwendungsbereiche des Punktkopplungsmodells, die Dynamik beinhalten, gegeben werden. Durch die einfache Form der Formulierung des Modells sollte es für *RPA*¹⁷-Rechnungen [Rei92], Berechnungen von Massenparametern (*Cranking-Methode*) und zeitabhängigen Rechnungen wie *TDRH*¹⁸ [Bai87, Cus85] oder *ATDRH*¹⁹ geeignet sein. Diese Rechnungen könnten gleichermaßen in der Hartree- und Hartree-Fock-Näherung durchgeführt werden. Auch Vergleiche mit Resultaten aus RMF-FR- und SHF-Rechnungen erscheinen lohnenswert, da auf diese Weise – ähnlich wie in dieser Arbeit – der Einfluss von relativistischer Dynamik und endlicher Reichweite getrennt untersucht werden kann.

Das Modell ist nur an Grundzustandseigenschaften von gg-Kernen angepasst und für die Berechnung von diesen konstruiert. Das Hohenberg-Kohn-Theorem bezieht sich zudem ausschließlich auf die Grundzustände von Fermionensystemen. Vielleicht kann aber auch gerade deshalb die Untersuchung von dynamischen Fragestellungen interessante Einsichten in die Struktur des Modells bringen.

¹⁶Diese modifizierten Kräfte sind SkI3 und SkI4.

¹⁷Random Phase Approximation

¹⁸Time Dependent Relativistic Hartree

¹⁹Adiabatic Time Dependent Relativistic Hartree

Kapitel 3

Paarkorrelationen

3.1 Superfluidität in Kernen

In der oben diskutierten *Mean-Field*-Näherung werden die Nukleonen als wechselwirkungsfreie Elementarsysteme beschrieben. Die einzige noch vorhandene Korrelation ist durch das *Pauli-Prinzip* gegeben. Der Teil der Wechselwirkung, der nicht durch das mittlere Feld beschrieben werden kann, wird als *Restwechselwirkung* bezeichnet. Der wichtigste Anteil dieser Restwechselwirkung, deren Einfluss sich nicht im Ansatz und den Kopplungskonstanten absorbieren lässt, ist die sogenannte *Paarkraft*. Sie ist eine kurzreichweitige Korrelation zwischen den Nukleonen, die zwei Nukleonen mit entgegengesetztem Drehimpuls erlaubt, in höhere Energiezustände zu streuen, indem sie zu einem Nukleonenpaar mit Gesamtdrehimpuls Null koppeln. Experimentell lässt sich die Paarkraft an folgenden Befunden festmachen:

- gg-Kerne mit offenen Schalen zeigen keine Drehimpulsentartung im Grundzustand, sie haben stets Gesamtdrehimpuls Null.
- gg-Kerne sind systematisch stärker gebunden als ug- oder uu- Kerne gleicher Nukleonenzahl.
- Das Trägheitsmoment von Kernen ist deutlich geringer als das des vergleichbaren starren Körpers, was auf Superfluidität in Kernen hindeutet.
- In gg-Kernen liegen die Energien der niedrigsten kollektiven Anregungen im Bereich von 0.1 – 1.5 MeV. Erst darüber beginnt das Spektrum der Einteilchenanregungen. Dies kann, wie bei dem Phänomen der Supraleitung in Festkörpern, durch eine Energielücke zwischen einem Paar unkorrelierter Nukleonen und einem Paar korrelierter Nukleonen erklärt werden, die erst aufgebrochen werden muss, bevor einzelne Nukleonen in höhere Niveaus angeregt werden können.

Was in der Natur zusammengehört, schließlich handelt es sich dort nicht um eine neue oder andere Kraft als die NN-Wechselwirkung, wird hier im Folgenden in der theoretischen Beschreibung getrennt von dem Teil der NN-Wechselwirkung, der sich durch das mittlere Potenzial beschreiben lässt. Dies geschieht meistens im BCS-Formalismus, der im Folgenden beschrieben wird. Er ist eine nicht-relativistische Beschreibungsweise der Paarkraft, die auch in den in dieser Arbeit diskutierten Modellen Verwendung findet. Versuche, einen relativistischen Formalismus für die Paarwechselwirkung aufzustellen, führten bisher nicht zu zufriedenstellenden Ergebnissen [Kuc91].

Eine selbstkonsistente Behandlung der Paarkraft ist im *Hartree-(Fock)-Bogolyubov*-Formalismus gegeben, der am Ende dieses Kapitels kurz beschrieben wird.

3.2 Der BCS-Formalismus

Der von Bardeen, Cooper und Schrieffer eingeführte Ansatz zur Beschreibung von Supraleitung entstammt der Festkörperphysik [Bar57]. Der Grundzustand des Kerns ist der sogenannte BCS-Zustand

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger) |0\rangle. \quad (3.1)$$

Die v_k^2 können als Wahrscheinlichkeiten für die Besetzung des Zustands mit der Quantenzahl k betrachtet werden. Aufgrund der Normierungsforderung des BCS-Zustands gilt dabei

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (3.2)$$

für alle k .

Dieser Zustand verletzt die Teilchenzahl, was sich daraus erklärt, dass sich die neuen Quasiteilchenoperatoren, die hier die elementaren Freiheitsgrade beschreiben (sie werden im nächsten Abschnitt definiert), aus Linearkombinationen von Erzeugern und Vernichtern zusammensetzen. Oberhalb der Fermikante verhalten sie sich überwiegend wie Erzeuger, unterhalb der Fermikante wirken sie wie Vernichter, und gerade im Bereich der Fermienergie sind beide Anteile in etwa gleich groß. Die mittlere quadratische Abweichung ergibt sich zu

$$\Delta N^2 = \langle \text{BCS} | \hat{N}^2 | \text{BCS} \rangle - \langle \text{BCS} | \hat{N} | \text{BCS} \rangle^2. \quad (3.3)$$

Dabei ist $\hat{N} = \sum_{i=1}^A \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ der Teilchenzahloperator. Die Auswertung im $|\text{BCS}\rangle$ Zustand führt auf

$$\Delta N^2 = 4 \sum_{k>0} u_k^2 v_k^2. \quad (3.4)$$

BCS-Zustände enthalten stets Beimischungen von Kernen unterschiedlicher Nukleonenzahl. Man muss in der Praxis sehen, ob dies die Qualität der Rechnung nicht zu stark reduziert.

3.3 Transformation auf Quasiteilchen

Die Philosophie, die hinter der Transformation auf Quasiteilchen steht, ist, ein System stark wechselwirkender Teilchen¹ in ein System nichtwechselwirkender (freier) Quasiteilchen zu transformieren. Die Transformation auf Quasiteilchenoperatoren lautet

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_k &= u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_{-k}^\dagger, & \hat{\alpha}_k^\dagger &= u_k \hat{a}_k + v_k \hat{a}_{-k}, \\ \hat{\alpha}_{-k} &= u_k \hat{a}_{-k} + v_k \hat{a}_k^\dagger, & \hat{\alpha}_{-k}^\dagger &= u_k \hat{a}_{-k}^\dagger - v_k \hat{a}_k, \end{aligned} \quad (3.5)$$

(die \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i sind dabei die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die ursprünglichen Einteilchenzustände). Diese Transformation bezeichnet man als *Bogolyubov-Transformation*. Die Quasiteilchenoperatoren genügen wieder den Antivertauschungsrelationen für fermionische Operatoren

$$\{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{\alpha}_i^\dagger, \hat{\alpha}_j^\dagger\} = \{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j\} = 0. \quad (3.6)$$

Für diese Quasiteilchenoperatoren entspricht der Grundzustand des Kerns dem Vakuum:

$$\hat{\alpha}_i |\text{BCS}\rangle = 0 \quad \text{für alle } i = 1, \dots, A. \quad (3.7)$$

Der Grundzustand des Kerns lässt sich demgemäß durch Anwenden der Quasiteilchenoperatoren aus dem Vakuum konstruieren:

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_i \hat{\alpha}_i |0\rangle. \quad (3.8)$$

Für konkrete Berechnungen wurden unterschiedliche Rezepte entwickelt, wovon die wichtigsten kurz vorgestellt werden.

¹Wir verwenden hier ausnahmsweise den Begriff des Teilchens, da er Bestandteil des Wortes Quasiteilchenoperator ist.

3.4 Constant-Strength-Pairing

Ausgehend vom allgemeinen Ansatz für den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k^0 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \sum_{k,k' > 0} \langle k, -k | v | k', -k' \rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k'} \hat{a}_{k'} \quad (3.9)$$

nimmt man ein zustandsunabhängiges und damit konstantes Matrixelement G der Paarwechselwirkung an, woraus sich sofort

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k^0 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - G \sum_{k,k' > 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k'} \hat{a}_{k'} \quad (3.10)$$

ergibt. Der oben eingeführte BCS-Zustand stellt eine Näherung an die exakte Lösung für diesen Hamilton-Operator dar. Da, wie wir oben gesehen haben, die Teilchenzahl keine Erhaltungsgröße ist, muss durch einen Lagrange-Multiplikator der Erwartungswert des Teilchenzahloperators als zusätzliche Zwangsbedingung angeschlossen. Diese Überlegungen führen uns zum Variationsprinzip

$$\delta \langle BCS | \hat{H} - \lambda \hat{N} | BCS \rangle = 0. \quad (3.11)$$

Die explizite Berechnung dieses Matrixelements findet man z.B. in [Gre95]. Das Endergebnis lautet

$$2 \sum_{k > 0} (\epsilon_k^0 - \lambda) v_k^2 - G \left(\sum_{k > 0} u_k v_k \right)^2 - G \sum_{k > 0} v_k^4. \quad (3.12)$$

An dieser Stelle ist es sinnvoll, den Pairing-Gap durch

$$\Delta := G \sum_{k > 0} u_k v_k \quad (3.13)$$

zu definieren. Das Variationsprinzip führt nun unter der Annahme, dass der Gap bereits bekannt ist, zu den Gleichungen für die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Zustände:

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2}} \right). \quad (3.14)$$

Die ϵ_k sind definiert als $\epsilon_k := \epsilon_k^0 - \lambda - G v_k^2$.

Mit Hilfe der Definitionen für v_k und u_k ergibt sich die sogenannte Gap-Gleichung zu

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{k > 0} \frac{\Delta}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2}}, \quad (3.15)$$

die iterativ gelöst werden kann. Der Parameter λ ergibt sich aus folgender Bedingung für die Teilchenzahl:

$$N = \sum_{k > 0} 2v_k^2. \quad (3.16)$$

Der Term $-G v_k^2$, der in der Definition der ϵ_k im Wesentlichen eine Renormierung der Einteilchenenergien darstellt, wird bei dieser Vorgehensweise weggelassen.

Eine alternative Formulierung ist möglich, indem von dem Pairing-Energiefunktional ausgegangen wird:

$$E_{\text{pairing}} = -G \left(\sum_{k > 0} u_k v_k \right)^2. \quad (3.17)$$

Die Paarkraftstärke G , die für Protonen und Neutronen unterschiedlich gewählt wird, hängt in realistischen Beschreibungen noch von der Nukleonenzahl des Kerns ab, was ein deutlicher Nachteil dieses Pairing-Rezepts ist.

3.5 Constant-Gap-Pairing

Bei dieser Art von Pairing wird direkt der Pairinggap Δ für jede Nukleonensorte parametrisiert. Diese Parametrisierung wird mit Hilfe von experimentellen Daten abgeleitet. Es wird hier also von Anfang an auf die Bestimmung des Gaps verzichtet. Mit Hilfe der Einteilchenenergien der Zustände können daraus direkt die Besetzungswahrscheinlichkeiten berechnet werden. Obwohl diese Methode eine drastisch vereinfachte Beschreibung der Paarkraft darstellt, hat sie den Vorzug, dass das Pairing bei magischen Kernen – im Gegensatz zu anderen Beschreibungen – nicht zusammenbricht und ein plötzlicher Phasenübergang entsteht.

Es gibt verschiedene Arten, die Abhängigkeit des Gaps von der Nukleonenzahl zu beschreiben, siehe z.B. [Rei89] für gebräuchliche Parametrisierungen. Eine häufig verwendete Parametrisierung soll hier explizit angegeben werden (A bezeichnet die Nukleonenzahl des Kerns):

$$\Delta = \frac{11.2}{\sqrt{A}} \text{ MeV.} \quad (3.18)$$

3.6 δ -Kraft-Pairing

Ausgangspunkt für diesen Formalismus, der auch für alle Berechnungen in dieser Arbeit verwendet wurde, ist ein Energiefunktional der Form

$$E_{\text{pairing}} = \frac{1}{4} \int d^3r \chi^2(\vec{r}) V(\vec{r}), \quad (3.19)$$

das aus der nichtrelativistischen Beschreibung der Paarkraft übernommen wird. Die darin auftretende Paardichte ist für zeitgerade Systeme definiert als

$$\chi(\vec{r}) = -2 \sum u_i v_i \psi_i^*(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}). \quad (3.20)$$

Im Gegensatz zur Teilchendichte, bei der die Zustände mit den Besetzungswahrscheinlichkeiten v_i^2 gewichtet werden, tritt hier eine Gewichtung mit dem Produkt $u_i v_i$ auf. Dementsprechend liefern die am stärksten gebundenen Zustände sowie sehr schwach gebundene Zustände fast keinen Beitrag zur Paardichte. Ihr größter Beitrag kommt von Zuständen mit $v_i \approx 1/2$. Dies sind gerade Zustände im Bereich der Fermikante. Die Paardichte zeigt (bis auf die Vorfaktoren) einen Verlauf wie die Baryondichte. Dieser Ansatz sorgt dafür, dass das Paar-Potenzial im Kern lokalisiert ist, so dass Zustände, die dort die größte Aufenthaltswahrscheinlichkeit haben, am stärksten zum Pairing beitragen. Dies verhindert den Beitrag eines unphysikalischen Nukleonengases aus freien Zuständen.

Beim δ -Kraft-Pairing, das hier für zeitgerade Systeme formuliert wird, wird die Ortsabhängigkeit von $V(\vec{r})$ zu einer Konstanten: $V(\vec{r}) \rightarrow V_0$. Diese Konstante wird negativ gewählt, damit die resultierende Paarwechselwirkung attraktiv ist.

Das Paar-Potenzial $\Delta(\vec{r})$ ist definiert als Funktionalableitung des Energiefunktionals nach der Paardichte, also

$$\Delta(\vec{r}) = \frac{\delta E_{\text{pairing}}}{\delta \chi} = \frac{1}{2} V_0 \chi(\vec{r}). \quad (3.21)$$

Dies ermöglicht uns, das Energiefunktional als

$$E_{\text{pairing}} = \frac{1}{2} \int d^3r \Delta(\vec{r}) \chi(\vec{r}) \quad (3.22)$$

zu notieren.

Nun wird das Funktional der gesamten Energie minimiert unter der Zwangsbedingung des Erwartungswertes der Teilchenzahl N , der durch einen Lagrange-Multiplikator λ eingearbeitet wird. Zu berechnen ist nun

$$\frac{d}{dv_i} \left(E_{\text{mf}}^{\text{BCS}} + E_{\text{pairing}} - \lambda N \right) = 0. \quad (3.23)$$

Eine ausführliche Berechnung dieses Ausdrucks findet sich z.B. in [Rut99]. Das Ergebnis dieser Rechnung sind die BCS-Gleichungen

$$2(\epsilon_i - \lambda)u_i v_i - \Delta_i(u_i^2 - v_i^2) = 0. \quad (3.24)$$

Dabei kennzeichnet der Index i alle Zustände des paaraktiven Raums.

Der Einteilchengapparameter Δ_i ist der Erwartungswert des Paarpotenzials im Zustand ψ_i :

$$\Delta_i = - \int d^3r \psi_i^*(\vec{r}) \Delta(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}). \quad (3.25)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten ergeben sich dann zu

$$v_i^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_i - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_i - \lambda)^2 + \Delta_i^2}} \right). \quad (3.26)$$

Die Paarkraftstärken V_p und V_n sind für die jeweilige Nukleonensorte im Allgemeinen unterschiedlich groß. Es sind universelle Größen, die für alle Kerne der Nuklidkarte gültig sind. Zu jeder Parametrisierung des Mean-Field-Anteils der NN-Wechselwirkung (also zu jedem Parametersatz) korrespondiert ein Paar von Paarkraftstärken. Sie können nach erfolgter Anpassung der Mean-Field-Parameter, in einem Fit der Pairing-Gaps an Gaps, die aus experimentellen Daten gewonnen wurden, bestimmt werden. Dies wurde z.B. in [Ben97, Rut99] durchgeführt. Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Paarkraftstärken simultan mit den Mean-Field-Parametern an experimentelle Daten anzupassen. Dieses Verfahren ist noch konsistenter, da bei der Anpassung der Mean-Field Parameter nicht ein anderes Pairing-Rezept verwendet wird als das, was später in den Rechnungen Verwendung findet. Dieses Verfahren wird zur Bestimmung der Paarkraftstärken für die Kraft PC-F1 verwendet, die im Rahmen dieser Arbeit entstanden ist.

3.6.1 Der Energie-Cutoff

Der Einfluss des Kontinuums erweist sich auch bei dieser Behandlung als zu hoch, so dass zusätzlich ein Cutoff eingeführt werden muss. Die einfachste Möglichkeit dazu besteht darin, eine gewisse Energie E_{\max} zu definieren, ab der keine Zustände mehr berücksichtigt werden, oder für den paaraktiven Zustandsraum eine feste Anzahl von Zuständen N_{pairing} festzulegen. In beiden Fällen können sich jedoch bei numerischen Rechnungen Probleme ergeben, die daher kommen, dass sich beim Übergang zu anderen Nukleonenzahlen oder Deformationen der paaraktive Raum sprunghaft und damit unphysikalisch ändern kann. Aus diesem Grund wird in [Ben97] ein Cutoff entwickelt, bei dem diese Schwierigkeiten verhindert werden. Die Idee ist das *weiche* Abschneiden des Paarkraftsraums zu hohen Energien hin².

Der Cutoff vermindert mit steigender Energie des Zustandes seinen Beitrag zur Paarenergie (er wird deshalb auch als *Energie-Cutoff* bezeichnet)³. Dabei wird zum Abschneiden folgende Fermi-funktion verwendet:

$$f_i = f(\epsilon_i) = \frac{1}{1 + \exp [(\epsilon_i - \lambda - \Delta E)/\mu]}. \quad (3.27)$$

Die Parameter werden so angepasst, dass das Ergebnis nicht sensitiv auf ihren konkreten Wert ist und der paaraktive Raum eine feste Anzahl an Zuständen enthält. Dabei wird verwendet $\mu = 1/10\Delta E$ und $N_{\max} = n + 1.65n^{2/3}$ (n ist die Anzahl der Nukleonen in einer Schale). Diese Abschätzung

²Im Folgenden wird noch spezifiziert, wie der Ausdruck *weich* zu verstehen ist.

³Denkbar wäre auch ein Cutoff in Abhängigkeit von den rms-Radien der Zustände, wie er in [Rut99] vorgeschlagen wird.

ist dem Oszillatormodell entlehnt, bei dem die Anzahl der Elementarsysteme in der letzten besetzten Schale ca. $1.65n^{2/3}$ beträgt [Ben97].

In manchen Fällen erweist sich diese Behandlung als nicht ausreichend. Besonders bei Kernen, die nahe der Dripline liegen, ist trotz δ -Paarkraft und Energie-Cutoff der Einfluß der quasifreien Zustände zu groß. Für diese Kerne ist es wichtig, den Teilchen-Loch- und den Teilchen-Teilchen-Kanal der effektiven Wechselwirkung gleichberechtigt und selbstkonsistent zu behandeln. Dies führt im nicht-relativistischen Fall, auf die *Hartree-Fock-Bogolyubov*-Gleichungen. In relativistischen Rechnungen mit endlicher Reichweite werden die Austauschsterme in den meisten Anwendungen vernachlässigt, so dass als Näherung in diesem Fall *Relativistic-Hartree-Bogolyubov* Verwendung findet. Eine vollständige Erweiterung des Punktkopplungsmodells um die Austauschsterme wird in der Zukunft auch systematische *Relativistic-Hartree-Fock-Bogolyubov*-(RHFB)-Rechnungen ermöglichen.

3.6.2 Dichteabhängiges δ -Kraft-Pairing

Eine Modifikation der in Abschnitt 3.6 besprochenen Paarkraft-Vorschrift besteht in der Einführung einer Abhängigkeit der Paarkraft von der nukleonischen Dichte. In Gleichung (3.19) wird dabei folgende Ersetzung durchgeführt [Taj93, Fay94, Dob95] :

$$V(\vec{r}) \rightarrow V_0 \left[1 - \left(\frac{\rho_V}{\rho_0} \right)^\gamma \right]. \quad (3.28)$$

In konkreten Rechnungen hat sich gezeigt, dass die Resultate nicht sensitiv von den Parametern ρ_0 und γ abhängen [Ben97]. Typische Werte sind $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ und $\gamma = 1.0$. Der Wert für ρ_0 entspricht dem Wert der Grundzustandsdichte, den man durch Mittelung über verschiedene Skyrme-Kräfte erhält. Mit $\gamma = 1.0$ wird die einfachste Dichteabhängigkeit angenommen. Diese Form des Pairings wurde in den numerischen Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit nicht verwendet, da sich global gesehen im Vergleich zum dichteunabhängigen δ -Kraft-Pairing keine signifikante Verbesserung der Beschreibung von Atomkernen ergibt [Ben97].

3.7 Relativistic Hartree-Bogolyubov

Diese Verallgemeinerung des Hartree-Fock-Bogolyubov-(HFB)-Formalismus [Rin80, Ter96, Ben96] auf relativistische Systeme wurde in [Kuc91] eingeführt. Der HFB-Formalismus fragt nach der allgemeinsten Produktwellenfunktion, die aus nicht wechselwirkenden Quasiteilchen besteht. In dieser Näherung werden der Teilchen-Loch- und der Teilchen-Teilchen-Kanal der effektiven Wechselwirkung auf gleiche Art mit Hilfe der Bogolyubov-Transformation behandelt. Dies ermöglicht prinzipiell, die Paarkraftwechselwirkung aus der gewählten NN-Wechselwirkung zu bestimmen. Dennoch wird in vielen Anwendungen für tatsächliche numerische Rechnungen eine andere Wechselwirkung (z.B. die Gogny-Kraft [Gog75]) im Pairing-Kanal implementiert. Im Falle des relativistischen Formalismus liegt der Grund in den Problemen, die man bei Versuchen erhält, die Paarwechselwirkung aus der Mean-Field-Kraft zu berechnen und sie in den Rechnungen einzusetzen (siehe [Kuc91]). Die entstehenden Paarkorrelationen kommen als drei- bis vierfach zu groß heraus.

Die Gleichungen für das Paar-Potenzial sind gekoppelt mit den Gleichungen, in denen der Mean-Field-Anteil der Wechselwirkung auftaucht. Sie lassen sich folgendermaßen notieren [Lal97]:

$$\begin{pmatrix} \hat{h} - m - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h} + m + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k(\vec{r}) \\ V_k(\vec{r}) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k(\vec{r}) \\ V_k(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Hier ist \hat{h} der Einteilchen-Hamilton-Operator und $\hat{\Delta}$ das PaarPotenzial. λ ist das chemische Potenzial, das durch die Bedingung für die Teilchenzahl festgelegt wird, $U_k(\vec{r})$ und $V_k(\vec{r})$ sind Dirac-Spinoren. Die Potenziale, die Bestandteile des Mean-Field-Hamilton-Operators sind, müssen ähnlich wie im Hartree-Formalismus selbstkonsistent berechnet werden. Die nukleonischen Dichten lassen sich mit Hilfe der $V_k(\vec{r})$ berechnen, z.B. gilt für die skalare Dichte

$$\rho_s(\vec{r}) = \sum_{E_k > 0} \bar{V}_k(\vec{r}) V_k(\vec{r}). \quad (3.30)$$

In der nahen Zukunft ist es sicherlich interessant der Frage nachzugehen, wie sich das Punktkopplungsmodell in der RHB-Näherung verhält, insbesondere, ob sich im pp-Kanal ähnliche Probleme ergeben wie bei den in [Kuc91] getesteten RMF-FR-Parametrisierungen. Als Beispiel wollen wir den Erwartungswert des skalaren 4-Fermionen-Terms im BCS-Zustand betrachten:

$$\begin{aligned} \langle \text{BCS} | : (\hat{\psi} \hat{\psi})^2 : | \text{BCS} \rangle &= \sum_{k_1, k_2} v_{k_1}^2 v_{k_2}^2 (\bar{\psi}_{k_1} \psi_{k_1}) (\bar{\psi}_{k_2} \psi_{k_2}) \\ &- \sum_{k_1, k_2} v_{k_1}^2 v_{k_2}^2 (\bar{\psi}_{k_1} \psi_{k_2}) (\bar{\psi}_{k_2} \psi_{k_1}) \\ &- \sum_{k_1, k_2} v_{k_1} u_{\bar{k}_1} v_{k_2} u_{\bar{k}_2} (\bar{\psi}_{k_1} \psi_{k_2}) (\bar{\psi}_{\bar{k}_1} \psi_{\bar{k}_2}). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Der erste Term ist der direkte, der zweite der Austauschterm. Der dritte Term kann als Paarkraft-Term bezeichnet werden; in einer reinen Hartree-Fock Näherung mit ganzzahligen Besetzungszahlen verschwindet er.

Kapitel 4

Observablen

In diesem Kapitel sind die wichtigsten Observablen dargestellt, die in den diskutierten Modellen aus den numerischen Rechnungen extrahiert und mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden können.

4.1 Energetische Observablen

Die wohl wichtigste und genaueste vermessene Observable von Atomkernen ist ihre Masse, und damit eng verbunden, ihre Bindungsenergie. Sie entspricht der Differenz der Summe der Massen der Protonen und Neutronen, aus denen der Kern zusammengesetzt ist, und seiner tatsächlichen Masse:

$$B = M_{Z,N} - \left(Z \cdot m_{\text{Proton}} + N \cdot m_{\text{Neutron}} \right). \quad (4.1)$$

In den RMF-Modellen, wie sie im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden, ergibt sie sich aus der Summe der mit den Besetzungszahlen gewichteten Einteilchenenergien, der Mean-Field-Energie, den Beiträgen der Paarenergie und der Energie der Schwerpunktsbewegung:

$$B = \sum_i v_i^2 \epsilon_i - \int d^3r \langle \Phi | \mathcal{L} | \Phi \rangle + E_{\text{Pairing}} + E_{\text{cm}}. \quad (4.2)$$

Mit Hilfe der Bindungsenergie lassen sich Differenzengrößen bilden, mit denen sich Aussagen über die Schalenstruktur der Kerne machen lassen.

Erste Differenzen der Bindungsenergien ergeben die Separationsenergien

$$\begin{aligned} S_p(N, Z) &= B(N, Z) - B(N, Z - 1), \\ S_n(N, Z) &= B(N, Z) - B(N - 1, Z), \end{aligned} \quad (4.3)$$

bzw. für jeweils 2 Nukleonen, wie wir sie in dieser Arbeit bei gg-Kernen betrachten:

$$\begin{aligned} S_{2p}(N, Z) &= B(N, Z) - B(N, Z - 2), \\ S_{2n}(N, Z) &= B(N, Z) - B(N - 2, Z). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Diese Größen verändern sich besonders stark an Schalenabschlüssen. Erkennbar ist dies an ihrem Zusammenhang mit der Fermienergie λ , der in guter Näherung an Schalenabschlüssen gilt, wo die Paarkraft keinen Einfluß ausübt:

$$S_{2p} \approx -2\lambda_p, \quad S_{2n} \approx -2\lambda_n. \quad (4.5)$$

Erste Differenzen der Zwei-Nukleonen-Separationsenergien und damit zweite Differenzen der Bindungsenergien bilden die Zwei-Protonen bzw. Zwei-Neutronen Gaps:

$$\begin{aligned}
 \delta_{2p}(N, Z) &= 2B(N, Z) - B(N, Z - 2) - B(N, Z + 2) \\
 &= S_{2p}(N, Z) - S_{2p}(Z, Z + 2), \\
 \delta_{2n}(N, Z) &= 2B(N, Z) - B(N - 2, Z) - B(N + 2, Z) \\
 &= S_{2n}(N, Z) - S_{2n}(N + 2, Z).
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Diese Größen sind an Schalenabschlüssen gepeakt, da sich dort, wie wir oben bereits gesehen haben, die Separationsenergien besonders stark ändern. Sie können auch als Krümmungen der Energiefläche in Richtung von Z bzw. N interpretiert werden.

4.2 Observablen des Formfaktors

Aussagen über die Dichteverteilung eines Atomkernes können mit Hilfe einer experimentell zugänglichen Größe gemessen werden, die man als *Formfaktor* bezeichnet.

Für Ladungsverteilungen, die mit der Ladungsdichte $\rho_{\text{ch}}(\vec{r})$ beschrieben werden (ch steht für *charge*) ist er definiert als

$$F_{\text{ch}}(\vec{q}) = \int d^3r \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \rho_{\text{ch}}(\vec{r}). \tag{4.7}$$

Dabei bezeichnet $q = |\vec{q}|$ den Impulsübertrag. Die Ladungsdichte wird dabei aus der Mean-Field-Rechnung extrahiert (die genaue Prozedur findet sich in [Rut99]).

Für sphärische Ladungsverteilungen erhalten wir

$$F_{\text{ch}}(q) = 4\pi \int_0^\infty dr j_0(qr) \rho_{\text{ch}}(r), \tag{4.8}$$

dabei ist $j_0(x) = \sin(x)/x$ die Bessel-Funktion nullter Ordnung.

4.2.1 Der Ladungsradius

Der rms-Ladungsradius eines Kernes lässt sich mit Hilfe des Formfaktors einfach berechnen:

$$r_{\text{rms}}^{\text{ch}} = \sqrt{-\frac{3}{F_{\text{ch}}(0)} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{d^2 F_{\text{ch}}(q)}{dq^2}}. \tag{4.9}$$

4.2.2 Der Diffraktionsradius

Eine andere wichtige Größe, die Aussagen über die Ladungsverteilung des Kernes macht, ist der sogenannte *Diffraktionsradius*. Ihn bestimmt man mit Hilfe einer kastenförmigen Ladungsverteilung der totalen Ladung Q :

$$\rho_{\text{K}}^{\text{R}} = Q \left(\frac{4\pi}{3} R^3 \right)^{-1}, \quad r \leq R; \quad 0, \quad r > R. \tag{4.10}$$

Ihr Formfaktor lässt sich leicht berechnen, er ergibt sich zu

$$F_{\text{K}}^{\text{R}}(q) = 3Q \frac{j_1(qR)}{qR}. \tag{4.11}$$

j_1 ist die sphärische Besselfunktion. Der Radius R wird so gewählt, dass die erste Nullstelle des tatsächlichen Formfaktors q_0 mit der ersten Nullstelle des modellierten Formfaktors übereinstimmt. Dies ist der Fall wenn $R q_0$ mit der ersten Nullstelle x_0 von $j_1(r)$ übereinstimmt. Daraus ergibt sich der Diffraktionsradius

$$R_{\text{dms}} = x_0/q_0. \quad (4.12)$$

4.2.3 Die Oberflächendicke

Die Höhe des ersten Extremums des Formfaktors enthält Informationen über den Grad der Ausschmierung der Kerndichte in seiner Randzone. Diese Eigenschaft des Kerns beschreibt man gewöhnlich durch eine Observable, die man als *Oberflächendicke* bezeichnet. Um sie zu erhalten, vergleicht man den tatsächlichen Formfaktor mit dem Ladungsformfaktor einer kastenförmigen Verteilung ρ_b^R , die mit einer Gaussfunktion ρ_g^σ der Breite σ gefaltet ist. Der Formfaktor der aus diesem Faltungsprozess resultierenden Dichteverteilung ist das Produkt der einzelnen Formfaktoren:

$$F_{\text{bg}}^{R,\sigma}(q) = F_b^R(q)F_g^\sigma(q) = F_b^R(q) \exp(-\frac{1}{2}\sigma^2 q^2). \quad (4.13)$$

Der Parameter σ wird so bestimmt, dass der tatsächliche Formfaktor und $F_{\text{bg}}^{R,\sigma}(q)$ am ersten Extremum q_e von $F_b^R(q)$ übereinstimmen. Für R verwendet man den oben eingeführten Diffraktionsradius. Der Parameter σ ist die Oberflächendicke, er ergibt sich aus

$$\sigma = \frac{1}{q_e} \sqrt{2 \ln \left(\frac{F_{\text{dms}}^R(q_e)}{F_{\text{ch}}(q_e)} \right)}. \quad (4.14)$$

Hierbei berechnet sich q_e zu x_e/R_{dms} , wobei x_e der x-Wert des ersten Extremums der Funktion $j_1(x)/x$ ist.

4.3 Observablen zur Beschreibung der Deformation des Kerns

Zur Charakterisierung der Dichteverteilung des Kerns bzw. seiner Deformation können sphärische Multipolmomente herangezogen werden. Ihr Erwartungswert im Grundzustand des Kerns macht Aussagen über die Deformation des Kerns. Die Multipolmomente können auch für Neutronen und Protonen getrennt berechnet werden, um z.B. Polarisierungseffekte zu erkennen.

Die sphärischen Multipolmomente Q_{lm} bzw. die relativen Momente β_{lm} sind definiert durch

$$Q_{lm} = \int d^3 x r^l Y_{lm}^*(\phi, \theta) \rho(\vec{x}) \quad (4.15)$$

bzw.

$$\beta_{lm} = \frac{4\pi}{3AR^l} Q_{lm}. \quad (4.16)$$

A bezeichnet die totale Nukleonenzahl des Kerns, durch $R = 1.2 A^{1/3}$ fm wird der Kernradius angenähert. Der Vorteil der Beschreibung des Kerns mit Hilfe der relativen Momente besteht darin, dass bei ihnen die Skalierung der sphärischen Multipolmomente mit A herausgerechnet wird. Dies ermöglicht näherungsweise das Vergleichen von Deformationen von Kernen mit unterschiedlicher Masse.

Die wichtigsten Multipolmomente, die zur Beschreibung von Kernen in axialer Symmetrie benötigt werden, sind das Quadrupolmoment Q_{20} , das Oktupolmoment Q_{30} sowie das Hexadekupolmoment Q_{40} :

$$Q_{20} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \int d^3x \rho(\vec{x}) (2z^2 - r^2), \quad (4.17)$$

$$Q_{30} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \int d^3x \rho(\vec{x}) (2z^2 - 3r^2)z, \quad (4.18)$$

$$Q_{40} = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{9}{4\pi}} \int d^3x \rho(\vec{x}) (8z^4 - 24z^2r^2 + 3r^4). \quad (4.19)$$

Das Quadrupolmoment charakterisiert generell die Deformation des Kerns. Bei der Berechnung von Spaltbarrieren wird durch eine Zwangsbedingung auf Q_{20} der (semiklassische) Weg des Kerns von seinem Grundzustand bis hin zur Trennung der Fragmente beschrieben. Das Hexadekupolmoment beschreibt den sogenannten *Hals* des Kerns bei der Spaltung bzw. zusätzlich zu Q_{20} die Form seiner Dichteverteilung im Grundzustand. Das Oktupolmoment charakterisiert Kernformen, die nicht reflektions-symmetrisch sind (bestimmte Kerne im Grundzustand bzw. asymmetrische Spaltpfade).

4.4 Observablen der Paarkraft

Die Paarkraft macht sich in den Systematiken der Bindungsenergie dadurch bemerkbar, dass die Massenfläche der ungeraden Kerne um einen gewissen Betrag Δ höher liegt als die der gg-Kerne. Ursache dafür ist die Energie, die durch Paarung von zwei Nukleonen gewonnen werden kann.

Aus experimentellen Daten lassen sich die Protonen- und Neutronen-Paargaps folgendermaßen extrahieren [Mad88]:

$$\begin{aligned} \Delta_p(Z) &= -\frac{(-1)^Z}{8} \left[E(Z+2) - 4E(Z+1) + 6E(Z) - 4E(Z-1) + E(Z-2) \right], \\ \Delta_n(N) &= -\frac{(-1)^N}{8} \left[E(N+2) - 4E(N+1) + 6E(N) - 4E(N-1) + E(N-2) \right]. \end{aligned}$$

Dabei wird die Nukleonenzahl der anderen Nukleonensorte als konstant und gerade angenommen. Um den Paargap aus numerischen Rechnungen zu extrahieren, versucht man, diesen aus einer einzigen Rechnung zu erhalten. Dazu wird folgende Formel [Ben97] verwendet:

$$\Delta = \frac{\sum_k u_k v_k |\psi_k|^2}{\sum_k u_k v_k}. \quad (4.20)$$

Hier tragen im wesentlichen die Zustände in der Nähe der Fermienergie bei. Eine andere gebräuchliche Formel ist [Dob84]

$$\Delta = \frac{\sum_k v_k^2 |\psi_k|^2}{\sum_k v_k^2}. \quad (4.21)$$

Kapitel 5

Numerische Methoden

Wie oben diskutiert, ist das nukleare Vielkörperproblem in den angewandten Näherungen nicht mehr analytisch lösbar. Um die gekoppelten Gleichungen im Ortsraum zu lösen, werden eine Reihe von numerischen Techniken verwendet, die im Folgenden besprochen werden.

5.1 Der gedämpfte Gradientenschritt

Um die Wellenfunktion des Kerns zu bestimmen, die dem energetischen Minimum und damit seinem Grundzustand entspricht, wird das Verfahren des gedämpften Gradientenschrittes benutzt [Blu93, Rei82], das im Folgenden erläutert werden soll.

Die Energie des Kerns lässt sich als Funktional der Einteilchenwellenfunktionen ausdrücken:

$$E\{|\psi_a\rangle\} = \sum_a^A \langle \psi_a | \hat{h}_a | \psi_a \rangle. \quad (5.1)$$

Aufgabe ist nun, das Minimum dieser Energie im Raum der Wellenfunktionen zu bestimmen. Dort verschwindet die Funktionalableitung der Energie nach den Wellenfunktionen:

$$\frac{\partial E}{\partial |\psi_a\rangle} = \hat{\Pi} \hat{h}_a |\psi_a\rangle = 0. \quad (5.2)$$

Dabei bezeichnet

$$\hat{\Pi} = 1 - \sum_{a=1}^A |\psi_a\rangle \langle \psi_a| \quad (5.3)$$

den Projektor auf unbesetzte Zustände. Die Idee ist, sich in jedem Iterationsschritt – ausgehend von der n-ten Näherung der Wellenfunktionen – ein Stück weiter in entgegengesetzter Richtung zum Gradienten in der multidimensionalen Energiefläche zu bewegen:

$$|\psi_a^{n+1}\rangle = \mathcal{O} \left[|\psi_a^n\rangle - x_0 \hat{\Pi} \hat{h}_a |\psi_a^n\rangle \right]. \quad (5.4)$$

Dabei steuert der numerische Parameter x_0 die Schrittweite. Die in jedem Iterationsschritt notwendige Orthonormierung der Wellenfunktionen wird durch den Operator \mathcal{O} bezeichnet. Dazu wird das *Gram-Schmidtsche-Orthonormierungsverfahren* verwendet. Benutzt man die Vorschrift (5.4) in obiger Form, so ist die Schrittweite für jede Wellenfunktion proportional zu ihrer Energie (diese Abhängigkeit entsteht durch die Anwendung des Einteilchen-Hamilton-Operators auf die jeweilige Wellenfunktion). Dadurch konvergieren Zustände mit niedrigen Energien langsamer als solche mit höheren Energieeigenwerten, was die Konvergenz des gesamten Systems nachteilig beeinflusst. Um diesen Effekt zu kurieren, wird ein sogenannter *Dämpfungoperator* \hat{D} eingeführt¹, der von der Ener-

¹Der Projektor auf die unbesetzten Zustände wird der Übersichtlichkeit halber in seine Definition mit aufgenommen.

gie der jeweiligen Wellenfunktion abhängt. Er ist definiert als

$$\hat{D} = \frac{x_0}{E_0} \frac{1}{1 + \frac{\hat{T}}{E_0}} \hat{\Pi}. \quad (5.5)$$

Er enthält einen weiteren numerischen Parameter, E_0 . \hat{T} bezeichnet den Operator der kinetischen Energie (die potentielle Energie wird zustandsunabhängig durch E_0 approximiert). Nun werden Zustände höherer Energie langsamer gedämpft, was zu einer gleichmäßigen Konvergenz des Systems führt. Das Verfahren liest sich komplett als

$$|\psi_a^{n+1}\rangle = \mathcal{O} \left[|\psi_a^n\rangle - \hat{D} \hat{h}_a |\psi_a^n\rangle \right]. \quad (5.6)$$

Es wird iterativ unter jeweiliger Aktualisierung der Näherungen für die Wellenfunktionen angewendet, bis Konvergenz erzielt wird.

5.2 Konvergenzkriterien

Um die Konvergenz der Rechnung zu überprüfen stehen einige Größen zur Verfügung. Ein sehr direkter Test auf Konvergenz ist die Energieänderung ΔE der Berechnung während einer Iteration. Um ein frühzeitiges Abbrechen der Rechnung durch kurzzeitige kleine Energieänderungen zu vermeiden, wird ΔE über die jeweils zehn letzten Iterationen gemittelt. Die Varianz, definiert als

$$\sigma = \sqrt{\langle \Psi | \hat{H}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle^2}, \quad (5.7)$$

ist ein direktes Maß für die Qualität der Lösung und kann als zusätzliches Kriterium eingesetzt werden. Sie wird genau dann Null, wenn der optimale Satz an Wellenfunktionen in der Slater-Determinante gefunden ist.

In jedem Fall kann die maximale Anzahl an Iterationen vorgegeben werden, nach der das Programm unabhängig von den Konvergenzkriterien die Rechnung beenden soll. Oft hilft in diesen Fällen eine Modifikation der numerischen Parameter, um die Konvergenz zu erreichen bzw. zu verbessern.

5.3 Zwangsbedingungen

5.3.1 Die Implementation

Nicht immer ist man an den Grundzuständen von Kernen interessiert. Eine interessante Anwendung der Mean-Field-Modelle ist die Berechnung von Spaltbarrieren. Da die Berechnung ganzer Potenzialenergieflächen im Allgemeinen sehr viel Rechenzeit benötigt, beschränkt man sich meistens auf Schnitte durch diese Flächen. Dazu wird ein Parameter (eine Spaltkoordinate) benötigt, der den Weg des Kerns bis zu seiner Spaltung beschreibt. Dies wird in selbstkonsistenten Modellen erreicht, indem der Erwartungswert des Quadrupolmomentes des Kernes einer Zwangsbedingung unterlegt wird. Man sucht nun unter Einhaltung dieser Zwangsbedingung nach der energetisch günstigsten Lösung für die Wellenfunktion des Kerns. Dies wird auch hier durch den (modifizierten) gedämpften Gradientenschritt gelöst. Die höheren Multipolmomente, die durch die Symmetrien des Problems zugelassen sind, können sich frei einstellen und nehmen automatisch die Werte an, die dieser Lösung zu (lokal) minimaler Energie entsprechen.

Die Zwangsbedingung realisiert man durch Einführung eines zusätzlichen Terms in den Hamilton-Operator des Problems mit Hilfe der Methode der Lagrange-Multiplikatoren:

$$\hat{H}_{\text{mf}} \rightarrow \hat{H}_{\text{mf}}^\lambda = \hat{H}_{\text{mf}} - \lambda \langle \hat{Q} \rangle. \quad (5.8)$$

Der Lagrange-Multiplikator λ ist die Steigung der Potenzialenergiefläche, also

$$\frac{\partial E}{\partial Q} = -\lambda. \quad (5.9)$$

Die Zwangsbedingung liegt dabei auf dem Erwartungswert Q des Operators \hat{Q} in der Wellenfunktion des Kerns: $Q = \langle \hat{Q} \rangle$. Während der Iterationen wird jeweils $\langle \hat{Q} \rangle$ berechnet und die λ entsprechend angepasst, bis die Zwangsbedingung erfüllt ist. Dabei entspricht der Operator \hat{Q} meistens einem Multipoloperator, z.B. dem Quadrupoloperator

$$\hat{Q}_{20} = 2z^2 - r^2. \quad (5.10)$$

Auf diese Weise können auch mehrere Zwangsbedingungen gleichzeitig angewandt werden.

Die Realisierung der Zwangsbedingung geschieht durch Ausführung eines *Testschrittes*:

$$|\psi_a^{n+1/2}\rangle = \mathcal{O} \left[|\psi_a^n\rangle - \hat{D}(\hat{h}_a + \lambda_n \cdot \hat{Q}) |\psi_a^n\rangle \right]. \quad (5.11)$$

Solange die Zwangsbedingung noch nicht erfüllt ist und damit λ noch nicht seinen endgültigen Wert erreicht hat, ändert sich der Erwartungswert von \hat{Q} in dem Testschritt um

$$\delta Q = \sum_{a=1}^A \langle \psi_a^{n+1/2} | \hat{Q} | \psi_a^{n+1/2} \rangle - \sum_{a=1}^A \langle \psi_a^n | \hat{Q} | \psi_a^n \rangle. \quad (5.12)$$

Diese Änderung soll nun minimiert werden. Dazu wird λ korrigiert nach

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n - \epsilon \frac{\delta Q}{\sum_{a=1}^A \langle \psi_a^n | \hat{Q}^2 | \psi_a^n \rangle + d_0}. \quad (5.13)$$

Dabei wurden die numerischen Parameter ϵ und d_0 eingeführt. Im Gradientenschritt wird das zusätzliche Potenzial $\delta\lambda \cdot \hat{Q}$ addiert, wobei

$$\delta\lambda = c_0 \frac{Q^n - Q}{\sum_{a=1}^A \langle \psi_a^n | \hat{Q}^2 | \psi_a^n \rangle + d_0} \quad (5.14)$$

ist (hierbei wird der Parameter c_0 eingeführt, und Q^n bezeichnet den Erwartungswert im n-ten Iterationsschritt). Dieses Zusatz-Potenzial sorgt für eine weitere Annäherung des Erwartungswertes an den gewünschten Wert.

Der komplette Gradientenschritt mit Zwangsbedingung ist nun

$$|\psi_a^{n+1}\rangle = \mathcal{O} \left[|\psi_a^n\rangle - \hat{D}(\hat{h}_a + (\lambda_{n+1} + \delta\lambda) \cdot \hat{Q}) |\psi_a^n\rangle \right]. \quad (5.15)$$

Größere numerische Stabilität wird erreicht, wenn man in (5.15) nicht die Wellenfunktionen aus der vorherigen Iteration, sondern aus dem Testschritt benutzt.

5.3.2 Zwangsbedingungen mit Multipolmomenten

Neben der schon oben erwähnten Zwangsbedingung auf das Quadrupolmoment sind noch andere Multipolmomente als Zwangsbedingungen interessant.

Ebenfalls wichtig ist der Operator des Hexadekupolmoments

$$\hat{Q}_{40} = 8z^4 - 24z^2r^2 + 3r^4 \quad (5.16)$$

und bei asymmetrischen Kernformen der Operator des Oktupolmomentes

$$\hat{Q}_{30} = 2z^3 - 3zr^2. \quad (5.17)$$

In numerischen Rechnungen ist eine Dämpfung dieser Operatoren für große Abstände vom Zentrum des Kerns notwendig, da sich die Nukleonen in unphysikalischen Potenzialtaschen sammeln können und an den Gitterrand drängen. Dazu werden die Multipoloperatoren mit einer Fermifunktion multipliziert:

$$\hat{Q}^{\text{gedämpft}} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-\alpha}{\gamma}\right)} \cdot \hat{Q}. \quad (5.18)$$

Die Parameter α und γ bezeichnen dabei Dämpfungsradius und Breite des Abfalls. Dabei geschieht die Wahl der Parameter so, dass der neue Operator der Zwangsbedingung praktisch nur innerhalb des Kerns wie der Multipoloperator wirkt und außerhalb des Kerns rasch auf Null abfällt. Hier ist der Kernradius als der Abstand definiert, bei dem die Dichte gerade $\frac{1}{10}$ der maximalen Dichte des Kerns beträgt [Rut94].

In [Kud00, ReiD] wird eine Methode beschrieben, wie die notwendige starke Dämpfung der Multipoloperatoren umgangen werden kann. Dazu führt man Zwangsbedingungen ein, deren funktionale Form zu einem asymptotisch linearen Verhalten in z führt, während sie für kleine Abstände wie Multipoloperatoren wirken. Erste Testrechnungen haben bis jetzt zu keiner deutlichen Verbesserung gegenüber den gedämpften Multipoloperatoren geführt [Bue98b].

5.3.3 Diskussion der Methode

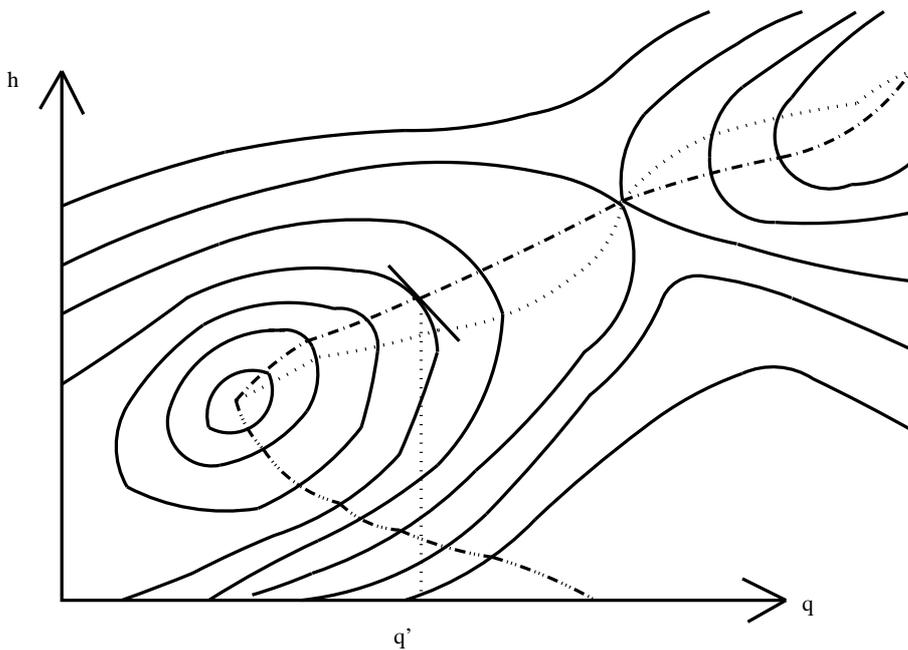


Abbildung 5.1: Die Abbildung zeigt schematisch eine typische Potenzialenergiefläche als Contourplot über der Quadrupolmoment (q) - Hexadekupolmoment (h)- Ebene. Schwach gestrichelt ist der Spaltpfad einer Rechnung mit Quadrupolmoment zu sehen, stärker gestrichelt ist der Pfad entlang des Spaltpfades eingezeichnet. Der untere Pfad, der zur q -Achse führt, kennzeichnet eine weitere Möglichkeit des Spaltpfades. Nach [Flo73, Rin80]

Abbildung 5.1 zeigt (schematisch und stark übertrieben) eine Potenzialenergiefläche in der $\beta_2 - \beta_4$ (q - h) Ebene als Kontourdarstellung. Man erkennt schwach gestrichelt den Pfad, den eine Rechnung mit Quadrupolconstraint nehmen würde. Dieser entsteht durch jeweils lokale Minimierung des Hexadekupolmoments und der höheren Multipolmomente bei festgehaltenem Quadrupolwert. Dieser Pfad

entspricht im allgemeinen nicht dem Pfad, der dem Gradienten folgt und dem quasiklassischen Spaltpfad entspricht. Letzterer ist fett gestrichelt eingezeichnet. Grundzustand und Sattelpunkt sind jedoch Bestandteil beider Pfade. Lauft der Spaltpfad parallel zur β_2 -Achse, so sind die Pfade identisch. Je weiter sich der Pfad in β_4 -Richtung bewegt, umso groer werden die Abweichungen. In diesen Fallen entspricht β_2 immer weniger einer geeigneten Spaltkoordinate. In den meisten Fallen jedoch sollten der Mean-Field-Pfad und der Pfad, der dem Gradienten folgt, relativ gut ubereinstimmen. In Ausnahmefallen kann der tatsachliche Spaltpfad einen ganz anderen Weg nehmen. Letztendlich konnen die Massenparameter, die zur Berechnung von Durchgangswahrscheinlichkeiten unerlasslich sind, das Bild noch andern. Diese Moglichkeit ist durch den unteren Weg angedeutet, der zu negativen Hexadekupolmomenten fuhrt.

Untersuchungen mit der makroskopisch-mikroskopischen Methode von Peter Moller et al. berechnen vollstandige Potentialenergieflachen in bis zu 5-dimensionalen Multipolraumen [Moe00]. Diese Modelle haben jedoch einen limitierten Deformationsraum und es ist nicht von vorne herein klar, wie sich die Ergebnisse bei einer Vergroerung des Deformationsraumes andern wurden.

In vielen Fallen ist die Berucksichtigung zusatzlicher Freiheitsgrade in den Rechnungen essentiell. So verschwinden oftmals symmetrische Barrieren bei der Erweiterung auf reflektionsasymmetrische Kernformen. Weiterhin konnen auch triaxiale Kernformen axialsymmetrische Barrieren verringern bzw. Minima miteinander verbinden und damit auch den Spaltpfad qualitativ verandern.

5.3.4 Andere Arten von Zwangsbedingungen

Fur einige Anwendungen erweist sich die Verwendung von Multipolmomenten als nicht geeignet. Dies betrifft zum Beispiel extrem asymmetrische Kernkonfigurationen oder die Frage nach molekularen Zustanden von Atomkernen. Diese Fragestellung hat durch experimentelle Ergebnisse zur (kalten) Dreifachspaltung von ^{252}Cf [Ram98] neues Interesse hervorgerufen.

Solche Probleme lassen sich mit zwei anderen Zwangsbedingungen behandeln, dem *Dichteconstraint* [Cus85] und dem *Fourierconstraint* [Kud00].

5.4 Die Programme

5.4.1 Die Mean-Field-Programme

M. Bender und K. Rutz entwickelten im Rahmen ihrer Dissertationen [Ben97, Rut99] ein Programmpaket in der Sprache C++, das die Berechnung von Atomkernen im Rahmen des RMF-FR-Modells (Programme `rmfxd`) und des SHF-Modells (Programme `hfxd`) in $x=1, 2$ und 3 dimensionalen Konfigurationen erlaubt. Dabei werden die numerischen Routinen von den Programmen geteilt. Die RMF-FR-Programme werden im Rahmen dieser Arbeit um die Codierung des Punktkopplungsmodells erweitert. Dies ist aufgrund des modularen und objektorientierten Aufbaus der `rmfxd`-Programme einfach zu bewerkstelligen.

Die gekoppelten Bewegungsgleichungen werden im Ortsraum auf einem numerischen Gitter gelost, auf dem alle Felder und Wellenfunktionen reprasentiert werden. Die numerischen Ableitungen werden dabei durch Transformation in den Impulsraum und anschließende Matrizenmultiplikationen durchgefuhrt. Berechnungen von Kernen sind in spharischer, axialer, triaxialer Symmetrie und auch - ohne Einschrankungen - dreidimensional moglich. Die drastische Erhohung von Rechenzeit und Speicherbedarf mit zunehmenden Freiheitsgraden sowie die zu erwartenden Symmetrien des Kerns legen jeweils die zu wahlende Symmetrie und damit das zu benutzende Programm fest.

Bei beiden Programmen ist eine Vielzahl von Parametersatzen wahlbar bzw. aus einer externen Datei einlesbar.

Zur Behandlung der Paarkraft stehen ebenfalls einige Verfahren zur Verfügung: constant gap, constant strength, filling approximation, δ -Kraft-Pairing, dichteabhängiges Pairing und Lipkin-Nogami Pairing (siehe dazu die Diskussion im Kapitel 3) sind im Programm integriert.

Das Programm `rmfld` (für Rechnungen in sphärischer Symmetrie) kann dabei zur Berechnung von Kernen oder aus dem nachfolgend beschriebenen Fitprogramm ausgerufen werden, wobei es in diesem Fall eine Reihe von Observablen² ausgibt. Der Aufruf kann auf zwei Arten geschehen:

- `rmfld F < infile >`: Das Programm stoppt nach der Rechnung, wobei es vorher die Observablen herausschreibt.
- `rmfld f < infile >`: Das Programm initialisiert den Signalhandler, geht schlafen und wartet auf Signale, die es zur Rechnung oder zur Terminierung auffordern.

Ist man nicht an einer Anpassung von Kopplungskonstanten interessiert sondern ausschließlich an der Berechnung eines Kerns, so wird das Programm einfach durch

- `rmfld < infile >` aufgerufen.

5.4.2 Das Programm zur Berechnung von Kernmaterie

Im Rahmen dieser Arbeit entstand das Programm `renuma`³ zur Berechnung von symmetrischer und asymmetrischer unendlicher Kernmaterie. Als Parametersätze können entweder die Sätze aus den Mean-Field-Programmen verwendet werden oder aus einer Datei eingelesen werden. Die Zustandsgleichung kann dabei für symmetrische Kernmaterie, reine Neutronenmaterie oder für ein beliebiges Protonen/Neutronenverhältnis berechnet werden. Zusätzlich werden Energie, Grundzustandsdichte, Kompressibilität, effektive Masse und der Asymmetrie-Koeffizient berechnet. Die Berechnungen sind für das lineare und nichtlineare RMF-FR-Modell sowie für das RMF-PC-Modell implementiert. `renuma` kann auch im Zusammenhang mit `fitit` (siehe nächster Abschnitt) zum Anfitten von den Modellen an Kernmaterie benutzt werden. Dazu sind folgende Fitstrategien implementiert:

- EOS⁴-Daten von Rechnungen von Malfliet et al. [Boe94a, Boe94b].
- EOS-Daten von Rechnungen von Brockmann und Machleit [Mac85, Mac89].
- EOS-Daten der RMF-FR-Kraft NL-Z [Rei89].

5.4.3 Das Fitprogramm

Das Programm `fitit`⁵ wurde zur Anpassung von Modellparametern entwickelt. Dabei wurde die Schnittstelle zu anderen Programmen so allgemein programmiert, dass seine Anwendung nicht auf Probleme aus der Kernstruktur beschränkt ist. Der Aufruf des Programms, das die Modellrechnungen macht, kann dabei über einen `fork()`-Aufruf geschehen oder, bei geeigneter Präparierung des Programms, über Kommunikation mit Hilfe von Signalen gehen. Das Anpassen der Kopplungskonstanten von Kernmodellen, bei dem in jedem Schritt einige Kerne mit den neuen Parametern berechnet werden müssen, ist in trivialer Parallelisierung übertragbar auf mehrere Prozessoren und/oder ein lokales Netzwerk. Dies ist eine mögliche Erweiterung des Programms. Die implementierten Algorithmen sind im Kapitel 6 beschrieben.

²Dies sind Bindungsenergie, rms-Radius, Diffraktionsradius und Oberflächendicke.

³von relativistic nuclear matter (englisch) = relativistische Kernmaterie

⁴Equation of State (englisch) = Zustandsgleichung

⁵von fit it (englisch) = fitte es

5.4.4 Das Perl-Skript zum Testen einer Parameteranpassung

Um einen ersten Eindruck von der Güte eines neuen Parametersatzes zu bekommen, wurde die Berechnung einiger Kerne und die Darstellung der daraus extrahierten Observablen mit Hilfe des Perl-Skriptes `test_the_fit.pl` automatisiert.

Der Test umfaßte folgende Observablen:

- Bindungsenergien, Diffraktionsradien und Oberflächendicken der 8 kanonischen Kerne⁶,
- Zustandsgleichung für symmetrische Kernmaterie,
- Bindungsenergien von Isotopen- und Isotonenketten,
- Separationsenergien in Isotopen- und Isotonenketten,
- Die Spaltbarriere von ²⁴⁰Pu und
- Spin-Bahn-Aufspaltungen von ausgewählten Kernen.

Dadurch kann nach einer Anpassung der Parameter jeweils ein erster Eindruck von der Beschreibung der unterschiedlichen Observablen und damit von der Güte der neuen Kraft gewonnen werden.

⁶Gemeint sind die Kerne, die zur Anpassung von NL-Z dienten [Ruf88].

Kapitel 6

Das Fitten der Modell-Parameter

”Niemand weiss wirklich, wie das χ^2 -Gelände aussieht. Wer sagt, er weiss es, irrt oder lügt.“

(P.-G. Reinhard)

”Fitten ist Voodoo.“

(M. Bender)

6.1 Globale versus lokale Optimierung

Im Folgenden sollen diese beiden Begriffe definiert werden, wie sie in dieser Arbeit verwendet werden:

- *Globale Optimierung*: Mit beliebigen bzw. speziellen Anfangsbedingungen, die vor dem eigentlichen Fit ermittelt werden können, soll das globale Optimum gefunden werden.
- *Lokale Optimierung*: Ausgehend von den Anfangsbedingungen soll das nächstgelegene Optimum gefunden werden.

Lokale Optimierung wird meistens durch sogenannte *Downhill*-Algorithmen durchgeführt. Die einfachsten davon sind die *Gittersuche* bzw. der *Gradientenschritt* (siehe unten). Im Vergleich zur globalen Optimierung sind sie deutlich schneller aber stark abhängig von dem Startpunkt. Globale Optimierung sichert weitgehend das Auffinden des globalen Optimums, ist dafür aber oftmals erheblich langsamer, da meistens der gesamte Parameterraum durchsucht wird. Geeignete Verfahren hierfür sind z.B. *simulated annealing* und *genetische Algorithmen*.

6.2 Die Philosophie des Fittens

Das Ziel Parameteranpassung ist meistens den optimalen Satz an Parametern für ein gegebenes Problem zu finden. Dabei muss definiert werden, welche Eigenschaften einen optimalen Parametersatz kennzeichnen. Oft versteht man darunter – im Zusammenhang mit physikalischen Modellen – einen Satz an Parametern, der dem Modell die bestmögliche Vorhersagekraft für Observablen bietet, die nicht Bestandteil der Anpassungsprozedur sind. Dieser Satz korrespondiert in den allermeisten Fällen mit dem globalen Optimum. Allein aus diesem Grund sind globale Optimierungen, wie sie im obigen Abschnitt definiert sind, wünschenswert. In der Praxis, wo das Erreichen dieses Ziels nicht immer mit hundert-prozentiger Sicherheit erreicht werden kann, wird man dennoch versuchen, ihm so nah wie möglich zu kommen. Man sagt, Numerik sei mehr Kunst als Wissenschaft, dies trifft noch viel

mehr auf das Fitten von komplizierten nichtlinearen Modellen zu. Auch wenn es in Veröffentlichungen, in denen solche Fits durchgeführt werden, kaum ausführlich beschrieben wird, steckt in einer Anpassung eines Parametersatzes viel empirisches Sammeln von Informationen und Erfahrung.

Die Zielvorgabe, möglichst einen optimalen Satz für das Modell zu finden, führt im Rahmen dieser Arbeit zu Tests diverser Algorithmen, mit deren Hilfe letztendlich ein zufriedenstellendes Ergebnis erreicht werden konnte.

6.3 Die Methode kleinster mittlerer Quadrate

Um den optimalen Satz der Kopplungskonstanten zu bestimmen, wird im Rahmen dieser Arbeit die Methode der kleinsten Quadrate (*least mean squares*) verwendet. Dabei definiert man die Funktion χ^2 durch

$$\chi^2 := \sum_{i=1}^n \frac{(O_{\text{calc}}^i - O_{\text{expt}}^i)^2}{(\Delta O^i)^2}. \quad (6.1)$$

Sie hängt indirekt von den Parametern durch die berechneten Observablen ab, die in das χ^2 eingehen. Die ΔO^i bezeichnen die Fehler bzw. Unsicherheiten der Observablen. Sie werden extern vorgegeben und entsprechen im Allgemeinen der Toleranz, die man dem Modell für die gegebenen Observablen zugesteht. Sie sind oft größer als die experimentellen Unsicherheiten: so liegt der experimentelle Fehler der Bindungsenergien bei nur einigen keV, während beim Anpassen der Modellparameter meistens ein Fehler von 0.2% des experimentellen Wertes angesetzt wird. Die χ^2 -Funktion soll minimiert werden, das Minimum korrespondiert dann (hoffentlich) zu dem Satz der optimalen Modellparameter.

In einer Veröffentlichung von P. Möller und R. Nix [MoeD] wird für nukleare Massenformeln eine Methode vorgeschlagen, mit deren Hilfe die Modellparameter gleichzeitig mit den Modellfehlern selbstkonsistent bestimmt werden können. Bei der Übertragung auf ein χ^2 in das unterschiedliche Observablen eingehen, muss dieses Verfahren eventuell neu formuliert werden.

6.4 Klassifizierung von Fitalgorithmen

Fitalgorithmen lassen sich gemäß ihrer Vorgehensweise nach folgendem Schema klassifizieren:

- Rechenbasierte Verfahren: Hierzu gehören *Gradientenschritt*, *Gittersuche*, *Powells Methode*, *Levenberg-Marquardt-Methode*, *Bevington Curved Step*.
- Zufallsbasierte Verfahren: *Simulated Annealing*, *Evolutionsprogramme*, *Genetische Algorithmen*.

Wir wollen nun zuerst die rechenbasierten, anschließend die zufallsbasierten Verfahren, die in dieser Arbeit getestet und zur Anwendung gebracht werden, besprechen.

6.5 Die Vorstellung der Fitalgorithmen

6.5.1 Der Gradientenschritt

Wie der Name schon sagt, spielt bei diesem Verfahren der Gradient eine entscheidende Rolle, d.h. die Richtung des stärksten Anstieges in der von den Parametern abhängigen χ^2 -Fläche:

$$\nabla \chi^2 = \sum_{j=1}^n \frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} \vec{a}_j. \quad (6.2)$$

Hierbei bezeichnet \vec{a}_j die Richtung des Parameters a_j . Das Verfahren kann auf verschiedene Weisen eingesetzt werden. Eine Möglichkeit ist, den Gradienten in jedem Iterationsschritt neu zu berechnen. Schwachstellen weist dieses Verfahren in der unmittelbaren Umgebung des Minimums auf. Da der Gradient bei der Annäherung an das Minimum immer kleiner wird, nähert sich das Verfahren dem exakten Minimum asymptotisch. Bei kleinen Schrittweiten wird der Bedarf an Rechenzeit sehr hoch, so dass das Verfahren ineffizient arbeitet. Große Schrittweiten verhindern dagegen die genaue Lokalisation des Minimums. Eine weitere Möglichkeit ist, jedem berechneten Gradienten solange zu folgen, bis sich das χ^2 nicht weiter vermindert. Erst dann wird der Gradient neu berechnet und der schnellstmögliche Abstieg in der χ^2 -Landschaft gewählt, was aber in vielen Fällen ineffektiv sein kann.

Aus den oben genannten Gründen wird in der nahen Umgebung des vermeintlichen Minimums eine andere Methode verwendet, die im nächsten Abschnitt referiert wird.

6.5.2 Die quadratische Modellierung der Umgebung des Minimums

Die quadratische Entwicklung der χ^2 -Hyperfläche um das Minimum χ_0^2 lässt sich notieren als

$$\chi^2 \approx \chi_0^2 + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \chi_0^2}{\partial a_i} \delta a_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 \chi_0^2}{\partial a_i \partial a_j} \delta a_i \delta a_j. \quad (6.3)$$

Dabei sind die Ableitungen von χ^2 an der Stelle zu nehmen, an der das χ_0^2 definiert ist¹. Die Gesamtheit der Parameter a_i ($i = 1, \dots, n$) bezeichnen wir als Parameterkonfiguration K . Die Matrix A , deren Elemente definiert sind als

$$a_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_i \partial a_j} \quad (6.4)$$

ist die Hessesche Matrix. Sie wird auch als *Krümmungsmatrix* bezeichnet, da sie ein Maß für die Krümmung der χ^2 -Hyperfläche ist.

Wir wenden nun die Methode der kleinsten Quadrate an und minimieren χ^2 aus Gleichung (6.3) bezüglich der Parametervariationen δa_i , um deren optimalen Werte zu erhalten. Aus dieser Variation ergibt sich

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial (\delta a_k)} = \frac{\partial \chi_0^2}{\partial a_k} + \sum_{j=1}^m \left[\frac{\partial^2 \chi_0^2}{\partial a_k \partial a_j} \delta a_j \right] = 0, \quad k = 1, \dots, m \quad (6.5)$$

$$b_k - \sum_{j=1}^m (\delta a_j a_{jk}) = 0, \quad k = 1, \dots, m. \quad (6.6)$$

Dabei sind die b_k definiert als

$$b_k = -\frac{1}{2} \frac{\partial \chi_0^2}{\partial a_k}. \quad (6.7)$$

Die obige Gleichung kann auch als Matrix-Gleichung notiert werden:

$$B = \delta a A. \quad (6.8)$$

Im folgenden betrachten wir zwei miteinander verwandte Verfahren, die die parabolische Entwicklung verwenden.

¹Dies wird durch den Index 0 gekennzeichnet.

6.5.3 Die Levenberg-Marquardt-Methode

Diese Methode besteht aus der Verbindung der zwei oben geschilderten Algorithmen. In großer Entfernung vom Minimum ist der Gradientenabstieg eine effektive Methode, sich schnell dem Ziel zu nähern. Wie oben beschrieben, treten Probleme in der Nähe des Minimums auf, da sich der Gradient asymptotisch der Null nähert und das Programm immer langsamer auf das Extremum hinkriecht. Die Levenberg-Marquardt-Methode benutzt deshalb in der näheren Umgebung des gesuchten Minimums die parabolische Entwicklung der Umgebung. Mit Hilfe eines Parameters λ wird zwischen den beiden Extremen gewechselt.

Die Diagonalelemente der Krümmungsmatrix werden mit dem Faktor $(1 + \lambda)$ multipliziert, d.h.

$$\begin{aligned} a'_{ij} &= a_{ij} \cdot (1 + \lambda) \quad \text{für } j = k, \\ a'_{ij} &= a_{ij} \quad \text{für } j \neq k. \end{aligned} \tag{6.9}$$

Dadurch kann zwischen den beiden Verfahren umgeschaltet werden. Für kleine λ ergibt sich die Methode der parabolischen Entwicklung der χ^2 -Hyperfläche. Ist λ sehr groß, dominieren die Diagonalelemente die Matrix, und wir erhalten im Wesentlichen den Gradientenabstieg. Im Folgenden wollen wir die Methode präzisieren²:

Wähle eine Starkonfiguration K .

- Berechne $\chi^2(K)$.
- Beginne mit $\lambda = 0.001$.
- Berechne mit dem aktuellen Wert für λ δK und $\chi^2(K + \delta K)$.
- Falls $\chi^2(K + \delta K) > \chi^2(K)$ ist, erhöhe λ um den Faktor 10 und wiederhole den vorhergegangenen Schritt. Falls $\chi^2(K + \delta K) < \chi^2(K)$, vermindere λ um den Faktor 10, setze $K = K + \delta K$ ³ und gehe zurück zum vorherigen Schritt.

Für jede Iteration kann es notwendig sein, die Parameterschritte δa_i und die Elemente der Matrizen a_{ij} und b_i etliche Male neu zu berechnen, um λ zu optimieren. Wenn das Programm sich dem Minimum nähert, wird λ kleiner und das Minimum innerhalb weniger Iterationen erreicht.

6.5.4 Der Bevington-Curved-Step

Die Bevington-Curved-Step-Methode besteht aus der Levenberg-Marquardt-Methode mit einem zusätzlichen Versuchsschritt im Parameterraum. Dabei wird mit Hilfe von drei bekannten Positionen im Parameterraum die Umgebung des Minimums durch eine parabolische Form beschrieben, und der zum geringsten χ^2 korrespondierende Punkt dieser Modellierung interpoliert. An dieser Stelle wird das tatsächliche χ^2 ermittelt.

Diese Methode der Interpolation erweist sich in den praktischen Anpassungen als sehr effektiv und wird deshalb für die endgültigen Minimierungen im Parameterraum verwendet. Als zusätzliches Ergebnis zur optimalen Parameterkombination liefert der Algorithmus Größen, die eine Aussage über die Eindeutigkeit und Genauigkeit der Parameter erlauben.

²Wir halten uns dabei an die Beschreibung in [Bev92].

³Dies ist natürlich im Sinne der Programmierung zu verstehen, nicht als mathematische Gleichung.

6.5.5 Unkorrelierte und Korrelierte Fehler

Um die Genauigkeit bzw. Unsicherheiten der angepassten Parameter einschätzen zu können, ist es sinnvoll, die unkorrelierten und korrelierten Fehler zu betrachten. Beide Arten von Fehlern beschreiben die maximale Variation der Parameter, bei der sich χ^2 nur um Eins ändert. Die Levenberg-Marquardt-Methode liefert diese Fehler automatisch. Die unkorrelierten Fehler, die definiert sind als

$$\delta p_i = \sqrt{a_{ii}^{-1}}, \quad (6.10)$$

bezeichnen die erlaubten Änderungen eines Parameters, wobei die übrigen Parameter nicht variiert werden dürfen.

Die korrelierten Fehler sind die Diagonalelemente der invertierten Krümmungsmatrix:

$$\Delta p_i = (a^{-1})_{ii}. \quad (6.11)$$

Sie geben die erlaubten Variationen eines Parameters unter gleichzeitig erlaubter Rejustierung der anderen Parameter wieder. Bei Modellen, bei denen einige der Parameter untereinander starke Korrelationen aufweisen, sind die korrelierten Fehler oft deutlich größer als die unkorrelierten⁴.

6.5.6 Die Gittersuche

Dies ist ein sehr einfaches Verfahren zur Suche der Minima von χ^2 im Parameterraum. Es kann folgendermassen zusammengefaßt werden:

Wähle Startwerte für die Parameter a_j^0 und Schrittweiten δa_j für jeden Parameter und berechne χ^2 mit dieser Startkonfiguration.

Iteriere bis zur maximalen Anzahl an Iterationen oder bis Konvergenz erreicht ist:

Mache einen Durchlauf für alle Parameter a_j :

- Inkrementiere Parameter a_j um $\pm \delta a_j$ und berechne χ^2 , wobei das Vorzeichen so gewählt wird daß χ^2 abnimmt.
- Wiederhole obigen Schritt solange, bis χ^2 wieder ansteigt. Dies bedeutet, dass ein Tal durchschritten wird.
- Benutze die letzten drei Werte des Parameters a_j (die das Minimum einschließen) und die zugehörigen Werte von χ^2 , um das Minimum der Parabel, die durch diese drei Punkte geht, zu interpolieren: Seien p_1, p_2, p_3 die drei letzten Werte von a_j und $\chi_1^2, \chi_2^2, \chi_3^2$ die dazugehörigen Werte von χ^2 , so ergibt sich der neue Wert von a_j zu

$$a_j = p_3 - \delta a_j \cdot \left(\frac{\chi_3^2 \cdot \chi_3^2 - \chi_2^2 \cdot \chi_2^2}{\chi_1^2 \cdot \chi_1^2 - 2\chi_2^2 \cdot \chi_2^2 + \chi_3^2 \cdot \chi_3^2} + 0.5 \right). \quad (6.12)$$

- Wenn sich χ^2 nicht mehr minimieren lässt, vermindere die Schrittweiten.

Die Gittersuche ist einfach zu implementieren und zeichnet sich dadurch aus, dass keine komplizierten Berechnungen durchzuführen sind. Der größte Nachteil tritt auf, wenn die Parameter untereinander stark korreliert sind (siehe Abbildung 6.1). In diesem Fall kann die Minimierung in einer Parameter-Richtung die in den anderen zerstören. Weiterhin hat der Algorithmus kein Wissen über die Richtung des stärksten Abstiegs, wie er durch den Gradienten gegeben ist. Dementsprechend ist die Gittersuche in diesen Fällen sehr langsam.

⁴Die Kopplungskonstanten der Mean-Field-Modelle besitzen diese Eigenschaft.

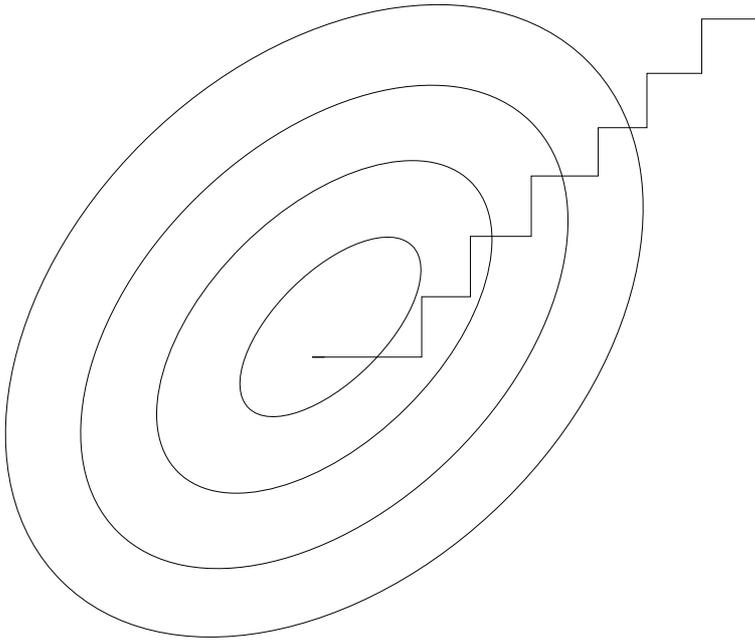


Abbildung 6.1: Veranschaulichung der Abhängigkeit des χ^2 von zwei Parametern (x- und y-Achse in willkürlichen Einheiten). Der treppenförmige Linienzug beschreibt den Weg, den der Gittersuche-Algorithmus gehen würde.

6.5.7 Die Methode nach Powell

Powells Methode kuriert den Nachteil der Gittersuche bei korrelierten Parametern. Dies gelingt durch Einführung sogenannter *konjugierter Richtungen*. Sie sind so definiert, dass eine Minimierung entlang einer solchen konjugierten Richtung nicht die vorausgegangenen Minimierungen zerstört. Dieser Algorithmus besteht dementsprechend aus zwei Bestandteilen:

- Einem Algorithmus, der ausgehend von einem Punkt \vec{P} und einer Richtung \vec{n} den Parameter λ so bestimmt, dass das $\chi^2(\vec{P} + \lambda\vec{n})$ ein Minimum annimmt.
- Einer Routine, die iterativ die konjugierten Richtungen bestimmt.

Das Konzept konjugierter Richtungen soll nun formalisiert werden. Das χ^2 unseres Problems kann in der Nähe eines Punktes \vec{p} in eine Taylor-Reihe entwickelt werden gemäß

$$\chi^2(\vec{p} + \vec{x}) = \chi^2(\vec{p}) + \sum_i \frac{\partial \chi^2}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots, \quad (6.13)$$

was wir bis in quadratische Ordnung annähern können durch

$$c - \vec{b} \cdot \vec{x} + \frac{1}{2} \vec{x} \cdot A \cdot \vec{x}, \quad (6.14)$$

wobei

$$c := \chi^2(\vec{p}), \quad \vec{b} := -\nabla \chi^2|_{\vec{p}}, \quad A_{ij} := \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial x_i \partial x_j}|_{\vec{p}}. \quad (6.15)$$

Die Matrix A ist uns bereits oben begegnet, es ist die Hessesche Matrix. In obiger Näherung berechnen wir den Gradienten zu

$$\nabla \chi^2 = A \cdot \vec{x} - \vec{b}. \quad (6.16)$$

Bei Bewegung in einer Richtung $\delta\vec{x}$ ist die Änderung des Gradienten demzufolge

$$\delta(\nabla\chi^2) = A \cdot (\delta\vec{x}). \quad (6.17)$$

Wenn wir uns nun in einer Richtung \vec{u} zu einem Minimum bewegt haben und in der Richtung \vec{v} fortschreiten wollen, ohne die Minimierung in Richtung \vec{u} zu zerstören, muss die Änderung des Gradienten senkrecht zu \vec{u} sein. Daraus ergibt sich

$$0 = \vec{u} \cdot \delta(\nabla\chi^2) = \vec{u} \cdot A \cdot \vec{v}. \quad (6.18)$$

Gilt diese Bedingung, sind \vec{u} und \vec{v} konjugierte Richtungen.

Powells ursprüngliches Rezept zur Minimierung einer Funktion χ^2 lautet wie folgt:

- Initialisiere eine Menge von Richtungen \vec{u}_i als Basisvektoren, $\vec{u}_i = \vec{e}_i$, $i = 1, \dots, n$.
- Iteriere die folgenden Schritte, bis χ^2 nicht mehr abnimmt:
 - Speichere die Startposition als \vec{p}_0 .
 - Für $i = 1, \dots, n$: bewege \vec{p}_{i-1} zum Minimum entlang der Richtung \vec{u}_i und nenne diesen Punkt \vec{p}_i .
 - Für $i = 1, \dots, n$: $\vec{u}_{i+1} \rightarrow \vec{u}_i$.
 - Setze $\vec{p}_n - \vec{p}_0 \rightarrow \vec{u}_n$.
 - Bewege \vec{p}_n zum Minimum entlang der Richtung \vec{u}_n und nenne diesen Punkt \vec{p}_0 .

Der Algorithmus (der quadratisch konvergiert ⁵) kann in dieser Form leider nicht für numerische Rechnungen verwendet werden, da er ein Problem verursacht: Durch das Ersetzen von \vec{u}_1 durch die Richtung $\vec{p}_n - \vec{p}_0$ tendiert das Verfahren zur Erschaffung von linear abhängigen Richtungen, die nur einen Unterraum des gesamten zur Verfügung stehenden Parameterraumes aufspannen. Aus diesem Grund muss es für praktische Anwendungen modifiziert werden. Eine mögliche Art der Modifizierung, die auf Powell zurückgeht und im Fitprogramm implementiert ist, soll hier besprochen werden.

Quadratische Konvergenz wird zugunsten anderer Strategien aufgegeben. Dies kann durchaus sinnvoll sein, wenn die zu minimierende Funktion in weiten Bereichen schlecht durch eine quadratische Form angenähert werden kann.

Powells Idee ist, weiterhin $\vec{p}_n - \vec{p}_0$ als neue Richtung zu akzeptieren. Zusätzlich wird aber die Richtung, in der die zu fittende Funktion im vorherigen Iterationsschritt um den größten Betrag abnahm, verworfen. Auf der einen Seite erscheint das nicht sinnvoll zu sein, denn im vorangegangenen Iterationsschritt hat sich diese Richtung als erfolgreichste herausgestellt. Auf der anderen Seite wird wahrscheinlich ein großer Teil der neu hinzuzufügenden Richtung eine Komponente in die alte erfolgreiche Richtung besitzen. Sie zu verwerfen hilft das Entstehen linear abhängiger Richtungen zu vermeiden.

Dieses Konzept wird noch verfeinert, um Situationen gerecht zu werden, in denen es besser ist, die erfolgreichste Richtung nicht zu verwerfen. Wir definieren

$$\chi_0^2 = \chi^2(\vec{p}_0), \quad \chi_n^2 = \chi^2(\vec{p}_n), \quad \chi_c^2 = \chi^2(2\vec{p}_n - \vec{p}_0). \quad (6.19)$$

χ_c^2 ist ein in der anvisierten neuen Richtung extrapoliertes Minimum. Mit $\Delta\chi^2$ bezeichnen wir den Betrag des größten Abfalls der χ^2 -Funktion entlang einer gewissen Richtung im aktuellen Iterationsschritt. Unter folgenden Bedingungen sollen die alten Richtungen beibehalten werden:

- $\chi_c^2 \geq \chi_0^2$: Die Richtung $\vec{p}_n - \vec{p}_0$ führt nicht mehr zum Erfolg.

⁵D.h. nach einer im Voraus bestimmbaren Anzahl von Iterationen wird das Minimum einer quadratischen Form exakt erreicht.

- $2(\chi_0^2 - 2\chi_n^2 + \chi_e^2)[(\chi_0^2 - \chi_n^2) - \Delta\chi^2]^2 \geq (\chi_0^2 - \chi_e^2)^2 \Delta\chi^2$: Entweder war der Abstieg entlang der mittleren Richtung nicht primär durch den Abstieg entlang einer einzelnen Richtung verursacht, oder es existiert entlang der mittleren Richtung eine starke zweite Ableitung und wir befinden uns Nahe an ihrem Minimum.

6.5.8 Bemerkungen zu den direkten Methoden

Alle oben besprochenen Methoden werden im Rahmen dieser Arbeit ausgiebig getestet und in Optimierungen der Mean-Field Parameter angewendet. Dabei erweist sich der Bevington-Curved-Step als überragend effektiv im Vergleich zur Gittersuche und der Methode nach Powell. Während die Gittersuche bei Problemen mit stark korrelierten Parametern ineffektiv ist, bleibt die Powell-Routine oft schon nach einigen Iterationen im Parameterraum stecken, d.h. die Bestimmung der konjugierten Richtungen erweist sich in den vorliegenden Problemstellungen als nicht besonders geeignet. Deshalb finden beide Methoden bei den späteren Parameteranpassungen keine Verwendung.

6.5.9 Monte-Carlo basierte Methoden

Unter *Monte-Carlo*-Verfahren versteht man im Allgemeinen Verfahren, bei denen (Pseudo)-Zufallszahlen eine Rolle spielen.

Die Erzeugung von Zufallszahlen

Die Erzeugung von Zufallszahlen mit Hilfe eines Computers ist ein nicht-triviales Problem. Alle Prozesse, die im Computer ablaufen sind nicht-zufällig und Systeme, die weißes Rauschen erzeugen, können nicht immer angekoppelt werden. Ein oft eingegangener Kompromiß ist, gar keine *echten* Zufallszahlen zu erzeugen, sondern sogenannte *Pseudo-Zufallszahlen*. Diese werden nach einer Rechenvorschrift, ausgehend von einem Startparameter (der sogenannten *seed*⁶), berechnet. Die gleiche *seed* führt so stets zur gleichen Sequenz von Zufallszahlen. Für unterschiedliche Produktionsläufe ist es deshalb notwendig, eine andere *seed* zu verwenden. Oft wird dafür die aktuelle Systemzeit benutzt. Andererseits können bei Testläufen die *seed* und damit verbunden die Pseudozufallszahlen gewollt unverändert bleiben, um den Einfluss anderer Parameter auf die Ergebnisse zu studieren.

Die meisten Pseudozufallszahlen-Generatoren erzeugen Zahlen mit gleichmäßiger Verteilung in einem gewissen Intervall. Oft ist man aber an (Pseudo)-Zufallszahlen interessiert, die einer anderen Verteilung gehorchen, z.B. der Gaussverteilung. Gerade für diese Verteilung gibt es ein Verfahren – die *Box-Müller Methode* [Bev92] – mit dessen Hilfe aus zwei Zufallszahlen, die einer gleichförmigen Statistik gehorchen, zwei gaussverteilte Zufallszahlen gewonnen werden können. Wenn r_1 und r_2 die beiden Zufallszahlen aus der gleichförmigen Verteilung sind, so ergeben sich g_1 und g_2 , die der Gaussverteilung genügen, durch

$$\begin{aligned} g_1 &= \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \\ g_2 &= \sqrt{-2 \ln r_1} \sin(2\pi r_2). \end{aligned} \tag{6.20}$$

Im Allgemeinen kann für beliebige Verteilungsfunktionen, denen die Zufallszahlen genügen sollen, die sogenannte Rejection-Methode verwendet werden [Thi99].

Anschließend werden die unterschiedlichen Monte-Carlo-basierten Verfahren diskutiert.

⁶englisch, Saat

Einfaches Sampling

Dieses Verfahren wählt pro Iteration innerhalb vorgegebener Schranken Zufallswerte für die Parameter und berechnet χ^2 . Dieses Verfahren kann sinnvoll genutzt werden, wenn man wenige Anhaltspunkte für geeignete Startwerte hat. Mit steigender Anzahl von Parametern und damit steigender Dimension des Parameterraums wird allerdings auch die Wahrscheinlichkeit deutlich kleiner, sinnvolle Startwerte zu finden.

Simulated Annealing

Dieses Verfahren wird erfolgreich auf das berühmte *Travelling-Salesman-Problem* angewendet, siehe z.B.[Num88]. Der Algorithmus ist vergleichsweise einfach zu implementieren. Das Monte-Carlo-Verfahren ist durch Prozesse in der Festkörperphysik inspiriert. Lässt man einen erhitzten Kristall abkühlen, kann die resultierende Struktur stark von dem Abkühlungsprozess abhängen. Wird rasch abgekühlt, kann der Kristall in einem Zustand gefrieren, der nicht dem Grundzustand entspricht. Bei langsamer Abkühlung dagegen haben die einzelnen Moleküle genügend Zeit sich so anzuordnen, dass zu jedem Zeitpunkt der energetisch günstigste Zustand erreicht wird. Dementsprechend befindet sich der Kristall am Ende des Abkühlens im Grundzustand. Die Essenz hierbei ist langsames Abkühlen, das den Atomen zu jedem Zeitpunkt die Gelegenheit zur Neuordnung gibt. Diese Strategie wird bei *simulated annealing* umgesetzt.

Schnelles Abkühlen kann mit rechenbasierten Optimierungsmethoden verglichen werden. Der rechenbasierte Algorithmus geht stets den Weg, der χ^2 minimiert. Der Endpunkt dieses Minimierens ist zwar immer ein lokales Minimum, aber nicht zwangsweise das globale. Um dieses zu erreichen, muss der Algorithmus auch die Möglichkeit haben Wege zu gehen, die aus lokalen Minima wieder herausführen, dafür aber auch für diese Zeit χ^2 wieder erhöhen. Dies leistet *simulated annealing*. Die Vorgehensweise kann wie folgt zusammengefasst werden:

Initialisiere eine Starkonfiguration mit Variationen Δv_i der Parameter, die externe Temperatur T sowie die Abkühlungsvorschrift. Wiederhole die folgenden Schritte bis das Abbruchkriterium erfüllt ist:

- Erzeuge durch Variation der Parameter aus der Konfiguration K mit korrespondierendem χ^2 eine neue Konfiguration K_2 . Berechne das zugehörige χ_2^2 .
- Berechne $q = \exp(-(\chi_2^2 - \chi^2)/T)$. Für $q \geq 1$ wird die neue Konfiguration akzeptiert. Falls $q < 1$, überprüfe, ob die Konfiguration dennoch akzeptiert wird (siehe unten).
- Aktualisiere die Temperatur T .

Die Abkühlungsprozedur ist dabei meistens extern vorgeben und hängt nicht von der Qualität der erreichten Lösungen ab. Es können auch Mechanismen benutzt werden, die in Wechselwirkung mit den Testlösungen stehen, z.B. kann das System wieder aufgeheizt werden⁷, wenn das Programm in einem lokalen Minimum festzustecken scheint.

Im Folgenden beschreiben wir das Kriterium zur Akzeptanz von Konfigurationen im Falle $q < 1$. Falls q kleiner als Eins ist, wird eine Zufallszahl zwischen Null und Eins erzeugt. Ist diese kleiner als q , wird die Konfiguration akzeptiert, andernfalls wird sie abgelehnt.

⁷Es kann auch das Abkühlen verlangsamt werden.

Die Erzeugung neuer Konfigurationen

Ausgehend von einer Konfiguration K wird in dem oben dargestellten Algorithmus eine neue Konfiguration erzeugt. Dazu werden alle Parameter der Elternkonfiguration modifiziert. Dies kann auf zwei verschiedene Arten geschehen:

- Bestimmung einer gleichförmig verteilten Zufallszahl im Bereich $-\Delta v_i, +\Delta v_i$ und ihrer Addition zum Ausgangswert des Parameters.
- Bestimmung einer gaussverteilten Zufallszahl aus einer um Null zentrierten Gaussverteilung, wobei in diesem Fall Δv_i die Breite der Gaussverteilung darstellt. Auch hier wird diese Zahl zum Ausgangswert des Parameters addiert.

Die Modifikation der einzelnen Parameter entspricht dem Mutationsoperator in genetischen Algorithmen. In ihnen wird allerdings zufallsbedingt für jeden Parameter einzeln entschieden, ob er mutiert werden soll oder nicht. Da eine gleichzeitige Mutation bzw. Modifikation aller Parameter, insbesondere bei großen Korrelationen zwischen ihnen, zu einer drastischen Verschlechterung des χ^2 führen kann, stellt die Art der Mutationen in genetischen Algorithmen eine weitere Möglichkeit dar, *simulated annealing* durchzuführen. Die gaussförmige Verteilung entspricht eher dem Vorbild der Natur, bei der die Wahrscheinlichkeit für kleine Mutationen größer ist, als für große. Diese Form der Mutationen erweist sich in den durchgeführten Rechnungen als vorteilhaft gegenüber der gleichförmigen Verteilung.

Diffusion Monte Carlo mit Simulated Annealing (DMC+SA)

Dieses in `fitit` implementierte Verfahren kombiniert Techniken aus einfachen *Diffusion-Monte-Carlo*-Algorithmen [Thi99] mit *simulated annealing*. Bei diesem kombinierten Algorithmus wird nicht ein einziger Parametervektor verändert, sondern eine ganze Population aus *Läufern*. Besonders erfolgreiche Läufer können zufallsbedingt zur Geburt von neuen Läufern führen, Läufer mit geringerem Erfolg können sterben. Es werden also in jeder Iteration zwei Schritte durchgeführt: Im *Diffusionsschritt* wird per Zufall für jeden Läufer eine neue Konfiguration erzeugt. Im darauf folgenden *Verzweigungsschritt* wird überprüft, ob der Läufer Ausgangspunkt für neue Läufer werden kann. Bewertet wird dies mit der *Fitness* des Läufers, einer Funktion, die von dem zugehörigen χ^2 , einer Schrittweite $\delta\tau$ und einer iterativ angepassten Grundzustandsenergie⁸ E_0 abhängt. Die Anpassung von E_0 verläuft in der in den Rechnungen zu dieser Arbeit auf recht einfache Weise: ist die Population zu klein, wird E_0 vergrößert, um die Wahrscheinlichkeit für die Geburt neuer Läufer zu erhöhen. Beim Erreichen des Maximums der Populationsgröße wird E_0 wieder iterativ verringert. Beide Prozesse werden exponentiell gesteuert. Im Laufe der Iterationen pendelt sich so eine Populationsgröße ein, die zwischen Eins und dem erlaubten Maximum liegt.

Der Algorithmus lässt sich auf folgende Art formalisieren:

Initialisiere eine Startkonfiguration. Wiederhole die folgenden Schritte, bis das Abbruchkriterium erfüllt ist:

- Wähle einen Läufer und bestimme für ihn die neue Position im Parameterraum.
- Berechne seine Fitness $q = \exp(-\Delta\tau[E - E_0])$. Dabei ist $\Delta\tau$ ein numerischer Parameter, der für jeden Parameter der Konfiguration K unterschiedlich gewählt wird.

⁸Der Begriff Grundzustandsenergie, der hier auch für den Parameter verwendet wird, entstammt Diffusion-Monte-Carlo-Rechnungen. Bei atomphysikalischen Rechnungen entspricht E_0 gerade der Grundzustandsenergie des Systems.

- Für $q \geq 1$ überlebt der Läufer. Überprüfe, ob neue Läufer geboren werden. Bestimme Konfigurationen für die Kinder ausgehend von der Elternkonfiguration. Falls $q < 1$, überprüfe ob der Läufer überlebt oder stirbt.
- Aktualisiere E_0 in Abhängigkeit von der Populationsgröße.

Das Kriterium zum Überleben des Läufers ist äquivalent zum Kriterium der Akzeptanz einer Konfiguration bei *simulated annealing*.

Dieses Verfahren eignet sich hervorragend zu einer trivialen Parallelisierung. Da die einzelnen Läufer völlig unabhängig voneinander durch den Parameterraum propagieren, lassen sie sich auf verschiedene Prozesse verteilen, die auf verschiedenen Prozessoren oder auch auf unterschiedlichen Computern in einem lokalen Netzwerk laufen können. Bei der Geburt neuer Läufer aus einer Elternkonfiguration können die Kinder sofort auf freie Ressourcen verteilt werden. Auf diese Weise ließen sich Populationen von mehreren hundert Läufern propagieren. Mit Paketen wie PVM oder MPI könnte man die Parallelisierung realisieren. Sie konnte im Rahmen der Arbeit nicht mehr durchgeführt werden, ist aber ein interessantes Zukunftsprojekt.

Eine weitere Modifikation des Verfahrens kann darin bestehen, dass der Schritt des Läufers nicht ausschließlich zufallsbasiert vonstatten geht. Eventuell können seine bisherigen Konfigurationen (und/oder die der anderen Läufer) dazu benutzt werden, seine Umgebung im Parameterraum zu modellieren und dadurch sinnvolle Kriterien für den wahrscheinlichen Erfolg seines nächsten Schrittes zu erstellen.

6.6 Teststudien

6.6.1 Eine einfache Testfunktion

Die Funktionsweise des DMC+SA Algorithmus wird anhand der *Pade*-Approximation an die Exponentialfunktion dargestellt. Im Intervall $[0, 10]$ soll die Funktion $f(x) = \exp(-x)$ durch die 2-Parameter-Funktion $g(x) = (1 + a \cdot x)/(1 + b \cdot x)$ angefitet werden. Das χ^2 ist dabei definiert durch

$$\sum_{i=0}^{10} \frac{(f(x_i) - g(x_i))^2}{\Delta_i} \quad (6.21)$$

und hat ein eindeutiges Minimum. Die Wahl der Δ_i ist dabei für das Ergebnis nicht wichtig. Der DMC+SA-Fit wurde für über 500 Iterationen mit einer maximalen Anzahl von 10 Läufern durchgeführt. In Abbildung 6.2 ist dieser Testlauf dokumentiert. Man erkennt die großen Fluktuationen von χ^2 während der ersten 100 Iterationen, danach werden die Fluktuationen geringer. Dies ist eine Folge des exponentiellen Abklingens der Temperatur. Nach 200 Iterationen besteht die Population nur noch aus einem Läufer, da die anderen Läufer aufgrund ihres geringen Erfolges gestorben sind. Dies führt zu einer Erhöhung der Grundzustandsenergie E_0 , daraus folgt dann ab der ca. 240. Iteration die Geburt von neuen Läufern. Ab diesem Zeitpunkt wird die Grundzustands-Energie E_0 wieder gesenkt. Die Steuerung der Grundzustandsenergie verläuft exponentiell. Man erkennt bei diesem Testlauf deutlich, dass der Algorithmus große Parameterbereiche durchquert, ehe die Läufer zu den endgültigen und eindeutigen optimalen Parametern konvergieren.

6.6.2 Endliche Kerne

Im diesem Abschnitt soll eine DMC+SA-Fitprozedur für das Punktkopplungsmodell mit der NHM-Fitstrategie (siehe Abschnitt 6.7.1) besprochen werden. Diese Fitstrategie wird weiter unten vorgestellt.

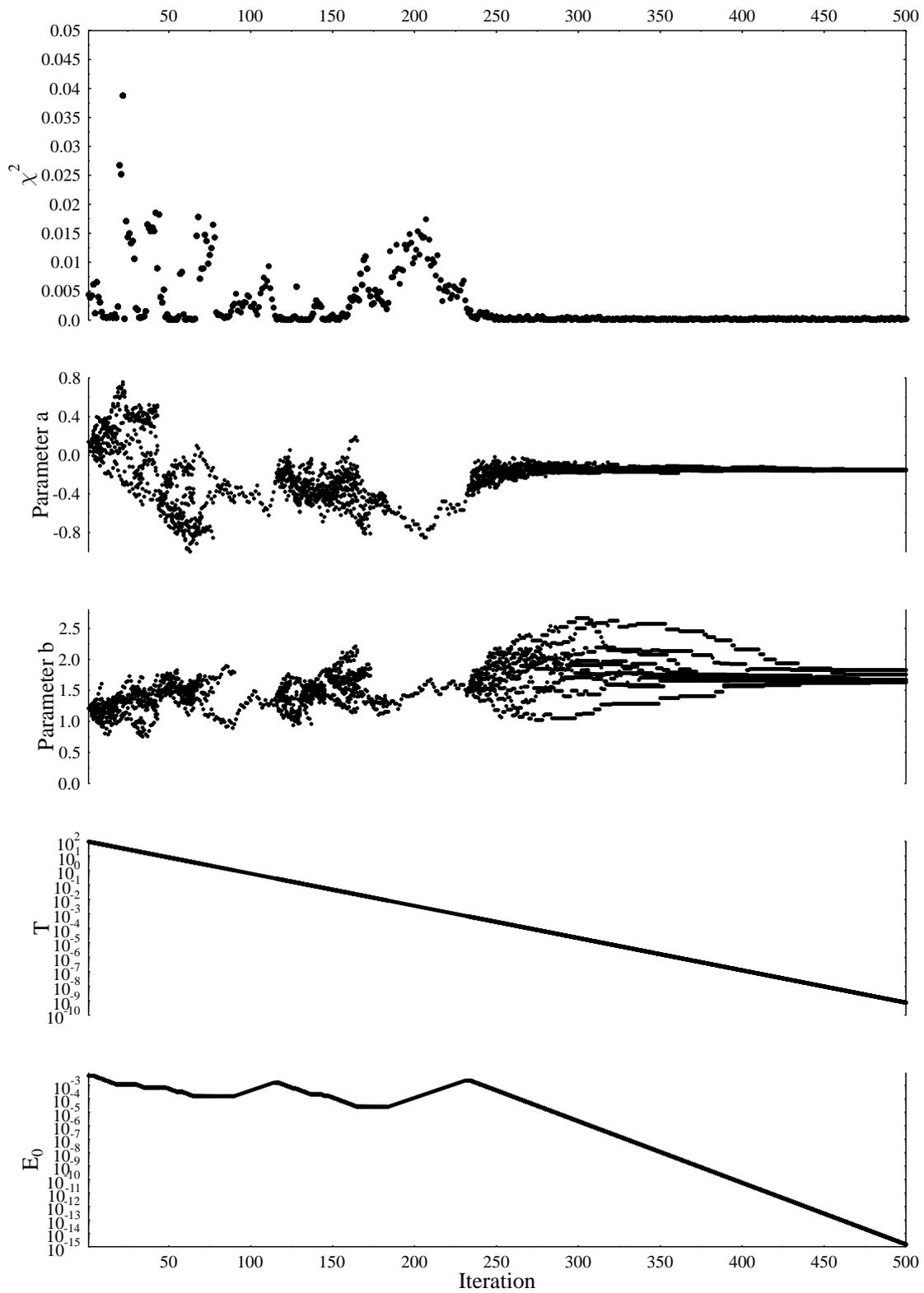


Abbildung 6.2: Von oben nach unten sind zu sehen: χ^2 , die Werte der beiden Parameter der Pade-Naherung, die Temperatur und die Grundzustands-Energie.

An dieser Stelle ist die genaue Auswahl der Observablen nicht wichtig. In Figur 6.3 ist ein Lauf über 5000 Iterationen dargestellt. Die maximale Populationsgröße beträgt 4 Läufer. Die Parameter sind die Kopplungskonstanten des in Kapitel 2 vorgestellten Punktkopplungsmodells. Es ist für jeden Parameter sowie das χ^2 jeweils der Minimal- und Maximalwert dargestellt. Die ersten 1000 Iterationen sind geprägt von starken Fluktuationen des χ^2 . Die Grundzustandsenergie zeigt immer dann Erhöhungen wenn wegen Misserfolgs Läufer gestorben sind, um die Wahrscheinlichkeit für die Geburt neuer Läufer zu erhöhen. Man erkennt auch hier, wie große Bereiche des Parameterraums durchkämmt werden. Zusätzlich dazu kann man den Einfluß von Parameterkorrelationen auf die Wege im Parameterraum erkennen. Die größten Korrelationen bestehen hier zwischen α_S und α_V , welche gerade durch ihre Summe die Größe des Kern-Potenzials und durch ihre Differenz die Spin-Bahn-Kraft steuern. Figur 6.4 zeigt für die Parameter α_S und α_V für die ersten 3000 Iterationen der Simulation die einzelnen Punkte, die zu den Läufern korrespondieren. Dies verdeutlicht die Streuung der Parameterlösungen im Parameterraum. Parameterkorrelationen untersuchen wir ausführlich im Kapitel 7.

6.7 Die Fitstrategien

6.7.1 Endliche Kerne

Um ein Punktkopplungsmodell zur Beschreibung von endlichen Kernen zu erstellen, müssen die Observablen, die in das zu minimierende χ^2 eingehen, aus ihnen gewonnen werden. Die *bulk properties* von symmetrischer unendlicher Kernmaterie genügen nicht, um alle Kopplungskonstanten fixieren zu können. Wir besprechen im folgenden zwei *Fitstrategien*, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden. Unter einer Fitstrategie verstehen wir die Auswahl der gewählten Observablen sowie ihre relative Gewichtung im totalen χ^2 .

Fitstrategie NHM

Diese Fitstrategie entspricht dem Verfahren, das in [Nik92] verwendet wurde, um die Kraft PC-LA zu fitten.

Tabelle 6.1 zeigt die gewählten Observablen und Kerne. Diese Fitstrategie wurde im Rahmen dieser Arbeit für die explorativen Fits mit DMC+SA benutzt. Die geringe Anzahl an zu berechnenden Kernen garantiert eine geringe Rechendauer pro Iterationsschritt. Auf der anderen Seite ist die Wahl der Observablen geeignet, einen ersten Eindruck von der Qualität einer Parameterkonfiguration zu liefern. Ein geringes χ^2 ist gewissermaßen eine notwendige (leider keine hinreichende) Bedingung für eine gute Konfiguration. Die Spin-Bahn-Aufspaltungen, die bei diesem Satz von Observablen angepasst werden, hängen über die funktionale Form des Spin-Bahn-Potenzials in den RMF-Modellen von der Kombination $V_V - V_S$ ab. Dies ist bei einer ersten Exploration im Parameterraum nützlich, da starke Korrelationen zwischen den Parametern des skalaren und des vektoriiellen Potenzials bestehen (unterschiedliche Kombinationen ergeben stets das Kern-Potenzial von ≈ 50 MeV). Die Spin-Bahn-Aufspaltungen testen die absolute Größe der Potenziale, genauer: die Größe der Summe ihrer Beträge.

Fitstrategie NL-Z2

Diese Methode wurde bereits erfolgreich von Prof. Reinhard verwendet, um die RMF-FR-Kraft NL-Z2 [Ben99] anzupassen. Es werden Observable von 17 (semi-)magischen Kernen in den Fit einbezogen. Dazu gehören Bindungsenergien, rms-Radien der Ladungsdichte, Diffraktionsradien, Oberflächendicken und Pairing-Gaps. Eine genaue Aufstellung der gewählten Observablen zeigt Tabelle 6.2.

Gegenüber älteren Fitstrategien enthält die neue Strategie mehr Isotope von Zinn und Bleikernen,

DMC+Simulated Annealing - NHM Fit Strategie

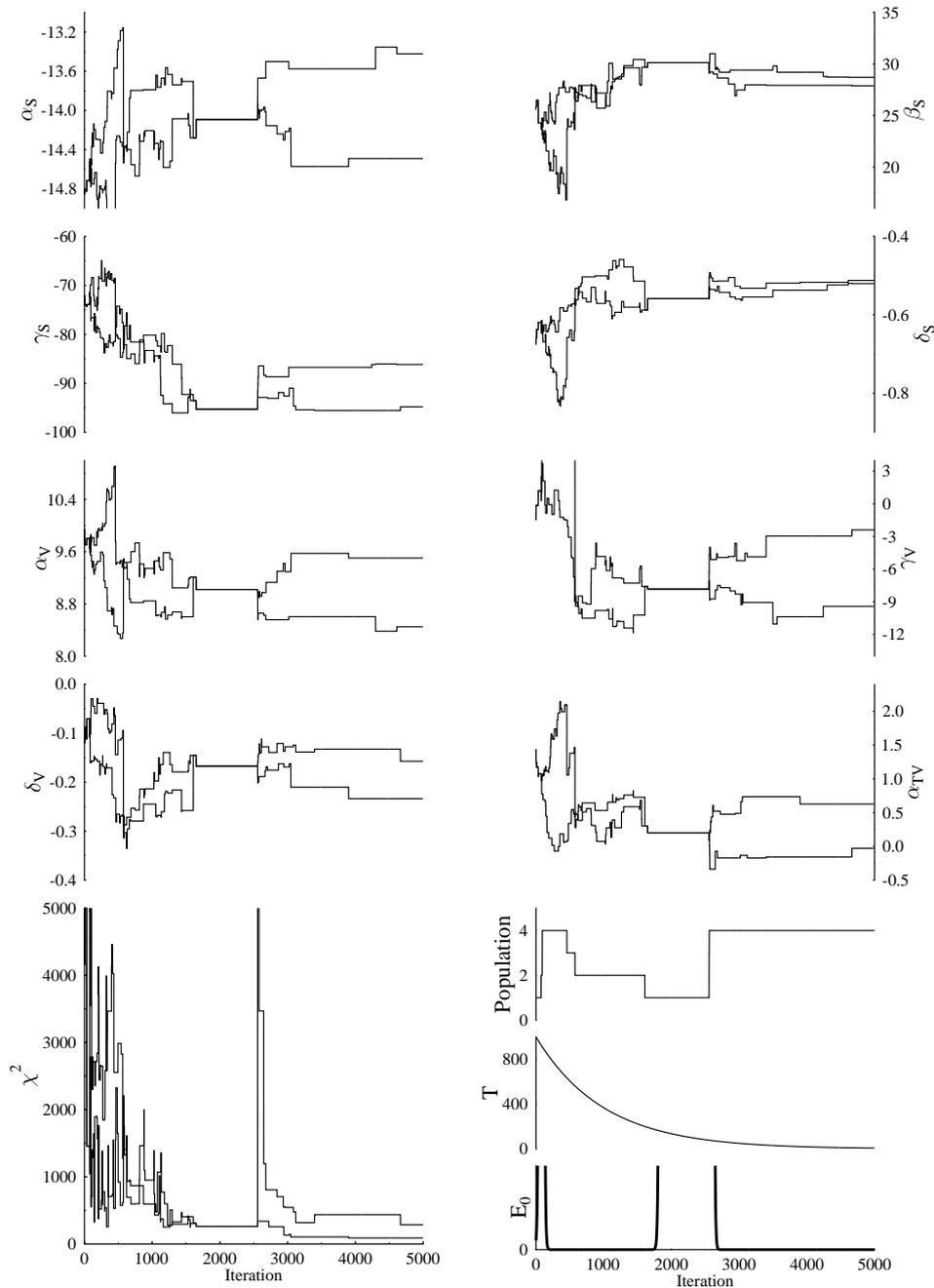


Abbildung 6.3: Die oberen Graphen zeigen für jeden Parameter des Punktkopplungsmodells den minimalen und maximalen Parameterwert innerhalb der Population. Unten sind das χ^2 sowie Temperatur, Anzahl der Läufer und Grundzustandsenergie als Funktion der Iterationsnummer aufgetragen.

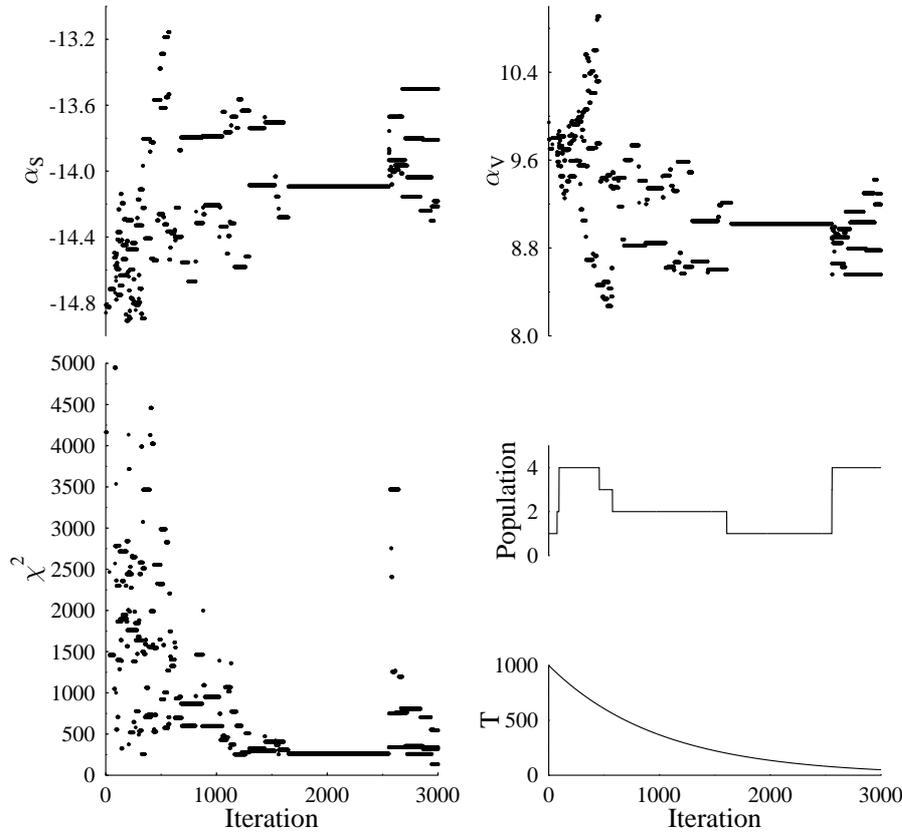


Abbildung 6.4: Durch die Population angenommene Werte der Parameter α_S und α_V , die korrespondierenden χ^2 -Werte sowie die Populationsgröße und die Temperatur.

Observable	Fehler	^{16}O	^{88}Sr	^{208}Pb
E_B	0.15 %	+	+	+
$r_{\text{rms}}^{\text{ch}}$	0.2 %	+	+	+
$\epsilon_{\text{ls}}^{\text{p}}$	5.0 %	+	+	+
$\epsilon_{\text{ls}}^{\text{n}}$	5.0 %	+	+	+

Tabelle 6.1: Observablen und gewählte Unsicherheiten (Fehler) ΔO für den Satz an Observablen, der in DMC+SA-Explorationen zur Anpassung der neuen Punktkopplungskraft verwendet wird. E_B kennzeichnet die Bindungsenergie, $r_{\text{rms}}^{\text{ch}}$ ist der rms-Radius der Ladungsdichte, $\epsilon_{\text{ls}}^{\text{p}}$ und $\epsilon_{\text{ls}}^{\text{n}}$ sind die Proton- und Neutron-Spin-Bahn-Aufspaltungen. Ein + kennzeichnet Observablen, die in das totale χ^2 eingehen. Experimentelle Werte sind nachzulesen in [Nik92].

sowie mehr semimagische Kerne, die die Kraft im Isektor-Kanal besser fixieren.

Die Paarkraftstärken sind Teil des Parametervektors und werden simultan mit den Mean-Field-Parametern angepasst. Die relevanten Observablen dafür sind die Pairing-Gaps. Sie werden im Programm gemäß

$$\Delta = \frac{\sum_k u_k v_k |\psi_k|^2}{\sum_k u_k v_k} \quad (6.22)$$

Observable	Fehler	¹⁶ O	⁴⁰ Ca	⁴⁸ Ca	⁵⁶ Ni	⁵⁸ Ni	⁸⁸ Sr	⁹⁰ Zr	¹⁰⁰ Sn	¹¹² Sn	¹²⁰ Sn	¹²⁴ Sn	¹³² Sn	¹³⁶ Xe	¹⁴⁴ Sm	²⁰² Pb	²⁰⁸ Pb	²¹⁴ Pb
E	0.2 %	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	-	+	+
R_{dms}	0.5 %	+	+	+	-	+	+	+	-	+	+	+	-	-	-	-	+	-
σ	1.5 %	+	+	+	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-	+	-
$r_{\text{rms}}^{\text{ch}}$	0.5 %	-	+	+	+	+	+	+	-	+	-	+	-	-	-	+	+	+
Δ_{p}	0.05 MeV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	+	+	-	-	-
Δ_{n}	0.05 MeV	-	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+	-	-	-	-	-	-

Tabelle 6.2: Observablen und gewählte Unsicherheiten (Fehler) ΔO für den Satz an Observablen, der zur Anpassung der neuen Punktkopplungskraft verwendet wird. R_{dms} ist der Diffraktionsradius, $r_{\text{rms}}^{\text{ch}}$ der rms-Radius der Ladungsdichte, σ die Oberflächendicke und Δ_{p} und Δ_{n} sind die Proton- und Neutron-Pairing-Gaps. Ein + kennzeichnet Observablen, die in das totale χ^2 eingehen.

berechnet. Die Anpassung der Paarkraftstärken verhält sich orthogonal zu der Anpassung der Mean-Field-Parameter, d.h. die Anpassung der Paarkraftstärken wird im Wesentlichen durch die Pairing-Gaps, welche Teil der Fitdaten sind, verursacht. Dies äußert sich auch in der Tatsache, dass sich bei den Paarkraftstärken – im Gegensatz zu den Mean-Field-Parametern – die korrelierten und unkorrelierten Fehler kaum unterscheiden.

Kapitel 7

Das Punktkopplungsmodell: Parametersätze

7.1 Kräfte mit weicher Zustandsgleichung in symmetrischer Kernmaterie

Punktkopplungsmodelle tendieren, wenn sie an Observablen von endlichen Kernen angepasst werden, zu einer Kompressibilität in Kernmaterie von $K \approx 210$ oder höher. Dies betrifft sowohl relativistische Modelle als auch ein nichtrelativistisches Punktkopplungsmodell, das Skyrme-Hartree-Fock-Modell. Es ist interessant zu sehen, welche Kombination nichtlinearer Parameter des Punktkopplungsmodells dagegen zu einer weichen Zustandsgleichung führt. Aus diesem Grund wird das Modell für symmetrische Kernmaterie (Parameter $\alpha_S, \alpha_V, \beta_S, \gamma_S, \gamma_V$) an Punkte der Zustandsgleichung von NL-Z ($K \approx 170$ MeV) einmal mit γ_V (Parametersatz NL-SV) und einmal ohne γ_V (Parametersatz NL-S) angepasst. Die Punkte der Zustandsgleichung von NL-Z, die in den Fit eingehen, sind in Abbildung 7.1 zu sehen. Sie sind im Dichtefenster $\rho = 0.013 - 0.299$ [fm^{-3}] ausgewählt. Die Parameter des RMF-PC-Modells werden mit der Levenberg-Marquardt-Methode angepasst. Die *bulk properties* sind in Tabelle 7.1 zusammengestellt. Man erkennt an den Werten deutlich, dass der Fit mit der Kraft NL-SV eine Zustandsgleichung erzeugt hat, die deutlich näher an der von NL-Z liegt als die von NL-S. NL-S sagt für die Kompressibilität und die Bindungsenergie deutlich zu kleine Werte voraus. Die Sättigungsdichte besitzt einen Wert, der weit über dem von herkömmlichen RMF-Modellen liegt. Ein Blick auf Abbildung 7.1 zeigt den Grund für diese ungewöhnliche Eigenschaft von NL-S: Die Zustandsgleichung von NL-S schmiegt sich im Bereich von $\rho \approx 0.15$ [fm^{-3}] sehr schlecht an die Datenpunkte an, während die Punkte für kleinere und größere Dichten gut angepasst werden. Offensichtlich kann die Krümmung der Zustandsgleichung von NL-Z schlecht wiedergegeben werden. Interessanterweise – besonders weil in diesem Bereich keine Fitpunkte liegen – verhält sich NL-S für hohe Dichten sehr ähnlich wie NL-Z.

Der Fit von NL-SV an die Datenpunkte von NL-Z gelingt deutlich besser: die Krümmung der Zustandsgleichung wird relativ genau reproduziert. Sie ist im Bereich der Sättigungsdichte etwas größer, was im Vergleich mit NL-Z zu einer etwas größeren Bindungsenergie und Kompressibilität führt. Die Potentiale der verschiedenen Kräfte sind in Abbildung 7.2 dargestellt. Man erkennt, dass diese sehr genau mit den Potentialen der Kraft NL-Z übereinstimmen. Größere Abweichungen ergeben sich nur für höhere Dichten. Der Verlauf des vektoriiellen Potentials weicht nur für NL-SV von einem linearen Verhalten ab, da dieser Parametersatz einen nichtlinearen isoskalar-vektoriellen Term besitzt. Der korrespondierende Parameter γ_V hat einen negativen Wert. Dies führt zu einem weicherem Verhalten als dem linearen. Die Parameter der beiden Sätze sind in Tabelle 7.2 aufgelistet. Die nichtlinearen Parameter von NL-S sind sehr groß, was zu einer extrem weichen Zustandsgleichung führt. Der Parameter

	NL-Z	NL-S	NL-SV
ρ_0 [fm^{-3}]	0.151	0.177	0.153
E/A [MeV]	-16.18	-15.31	-16.69
m^*/m	0.583	0.52	0.57
K [MeV]	173	130	192

Tabelle 7.1: Grundzustandseigenschaften von Kernmaterie für die betrachteten Kräfte. Dabei bezeichnet ρ_0 die Grundzustandsdichte, E/A die Bindungsenergie pro Nukleon, m^*/m die effektive Masse und K die Kompressibilität.

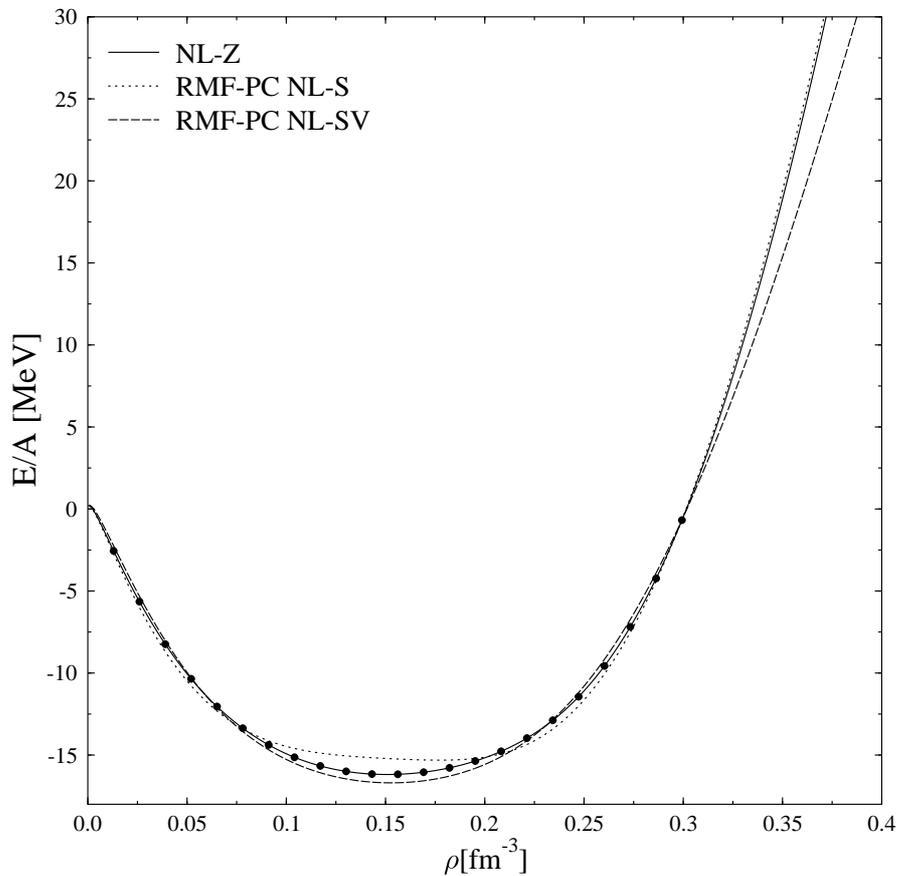


Abbildung 7.1: Die Abbildung zeigt die Zustandsgleichungen von NL-Z und den zwei angepassten RMF-PC Kräften, sowie die im Fit verwendeten Datenpunkte.

γ_S ist bei NL-SV nur noch halb so groß wie bei NL-S. Der Grund dafür ist γ_V , dessen negativer Wert eine weiche Zustandsgleichung mit kleineren Werten von γ_S ermöglicht. Das totale χ^2 von NL-SV ist deutlich niedriger als das von NL-S, was die obige Diskussion unterstützt.

Fits an endliche Kerne mit diesen Werten zu initialisieren sind nicht erfolgreich. Der Fitalgorithmus endet oft in Bereichen mit sehr großen Werten für χ^2 . Eine kleine Änderung der Parameter in diesen Bereichen führt zu intermediären Parametersätzen, die bei einzelnen Kernen nicht zu einer konvergenten Lösung führen. Dies kann als Anzeichen gedeutet werden, dass das Punktkopplungs-

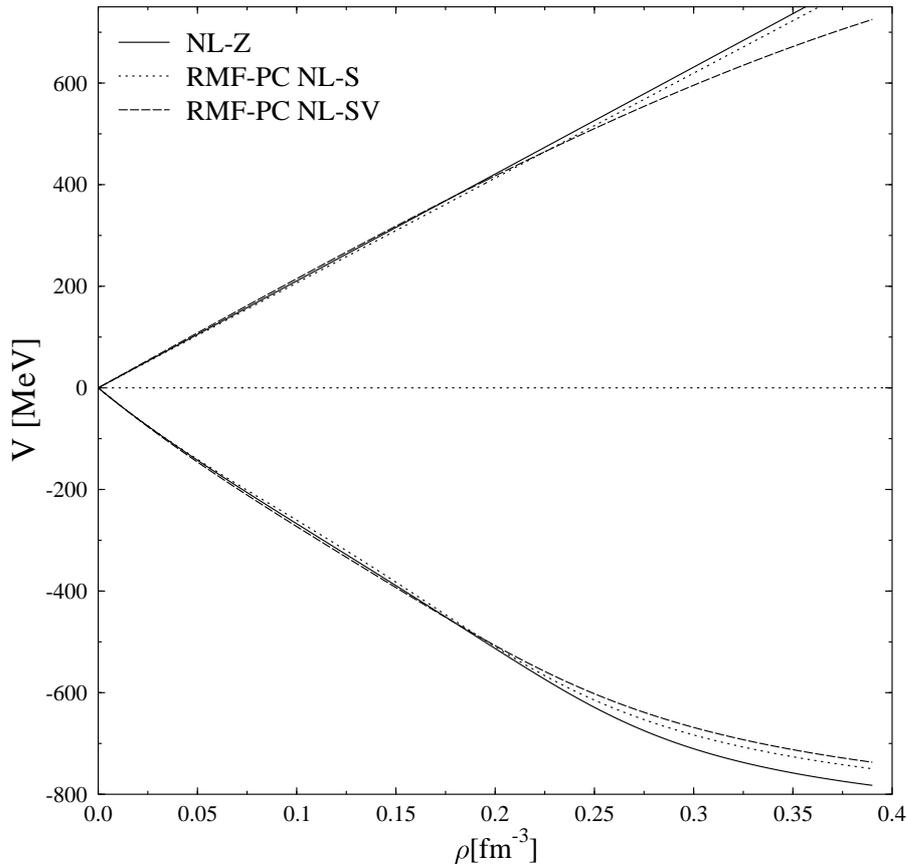


Abbildung 7.2: Die Abbildung zeigt die vektoriellen (oben) und skalaren (unten) Potentiale von NL-Z und den zwei angepassten RMF-PC Kräften.

modell zur Beschreibung endlicher Kerne eine hohe Kompressibilität benötigt (siehe auch die Diskussion zur Kernmaterie weiter unten). Weiterhin scheint der Parameter γ_V eine wichtige Rolle für die Dichteabhängigkeit des Modells, auch im Bereich der Sättigungsdichte, zu spielen.

7.2 Kräfte für endliche Kerne

7.2.1 Die Kraft PC-LA

Mit PC-LA wird der Parametersatz bezeichnet, der in [Nik92] als optimaler Satz veröffentlicht wurde. Er wurde nach der NHM-Fitstrategie gefittet, nachdem Fits mit einer größeren Zahl an Kernen und Observablen nur unbefriedigende Ergebnisse geliefert hatten. Die Autoren fanden eine Reihe von lokalen Minima, von denen keines als optimal bzw. bevorzugt charakterisiert werden konnte. Deshalb wurde die Auswahl der Kerne auf die oben diskutierten eingeschränkt. Es ergab sich eine Kraft, die hier im folgenden PC-LA bezeichnet wird (LA steht für *Los Alamos*).

Die Kraft PC-LA wird bei den numerischen Ergebnissen stets als Referenzkraft mituntersucht, so dass eine detaillierte Diskussion ihrer Eigenschaften auf später verschoben wird (Kapitel 8). Hier sollen nur die wichtigsten Punkte aufgezählt werden, die eine Verbesserung wünschenswert machten:

- Ein seltsames Verhalten der Zustandsgleichung von Kernmaterie, das durch die nichtlinearen Parameter hervorgerufen wird und eine daraus folgende Instabilität des Modells für große Dich-

	NL-S	NL-SV
$M[\text{MeV}]$	938.9	938.9
$\alpha_S[\text{fm}^2]$	-16.3636	-16.3949
$\beta_S[\text{fm}^5]$	49.005	34.0137
$\gamma_S[\text{fm}^8]$	-214.168	-127.164
$\alpha_V[\text{fm}^2]$	10.4637	10.9889
$\gamma_V[\text{fm}^8]$	0.0	-10.3037
χ^2	441	380

Tabelle 7.2: Die Parameter der in diesem Abschnitt diskutierten Kräfte. Die letzte Zeile enthält das aus dem Fit resultierende totale χ^2 .

ten.

- Schlechte Reproduktion der Spin-Bahn-Aufspaltungen in bekannten Kernen.
- Verletzung der Forderung nach Natürlichkeit der Parameter bei den nichtlinearen Kopplungskonstanten.

Als erste Konsistenzüberprüfung wurde ein Fit mit den Parametern der Kraft PC-LA initialisiert und mit dem Bevington-Curved-Step gestartet. Der Parametervektor zeigte nur eine minimale Variation, bevor Konvergenz erreicht wurde. Dieses Ergebnis zeigt, dass mit den implementierten Programmen das (lokale) Minimum aus der Arbeit [Nik92] reproduziert werden kann.

7.2.2 Die erste neue Kraft: PC-Fx

Diese Kraft war die erste in Frankfurt gefittete Kraft (F steht für *Frankfurt*), die in den oben aufgezählten Punkten eine drastische Verbesserung brachte. Die Kraft entstand zunächst durch eine Anpassung des nichtlinearen Punktkopplungsmodells an die Zustandsgleichung von Kernmaterie, wie sie von dem RMF-Parametersatz NL-Z vorhergesagt wird. Dieser Fit wurde jedoch vorzeitig beendet, da nur geeignete Startwerte für die linearen und nichtlinearen Parameter gefunden werden sollten. Davon ausgehend wurde das Modell mit der NHM-Fitstrategie gefittet. Die Paarkraftstärken wurden mit einer Näherungsformel aus [Rut99] unter Verwendung der effektiven Masse m^* in unendlicher symmetrischer Kernmaterie bestimmt:

$$V_n = -\left(512 - 293\frac{m^*}{m}\right)\text{MeV} \cdot \text{fm}^3, \quad V_p = -\left(484 - 238\frac{m^*}{m}\right)\text{MeV} \cdot \text{fm}^3. \quad (7.1)$$

Diese Kraft stellte bereits eine erhebliche Verbesserung gegenüber PC-LA dar. Der endgültige Fit sollte aber aus folgenden Gründen mit der Fitstrategie von NL-Z2 durchgeführt werden:

- Die NL-Z2-Strategie erhält eine deutlich größere Menge an Kernen und Observablen. Zusätzlich zur NHM-Strategie werden auch Diffraktionsradien und Oberflächendicken angepasst, dafür jedoch keine Spin-Bahn-Aufspaltungen.
- Durch Vergleich mit der Referenzkraft NL-Z2 kann der Einfluß der Fitstrategie sowie die Bedeutung der endlichen Reichweite studiert werden.
- Die Paarkraftstärken können simultan mit den Parametern angepasst werden.

7.2.3 Die Kraft PC-F1

Die Kraft PC-F1 ist das Resultat einer umfangreichen Parameterexploration und dem darauf folgenden Fit mit der Bevington-Curved-Step-Prozedur. Wie oben bereits diskutiert, erweist sich eine Kombination von Monte-Carlo-Verfahren mit rechenbasierten Methoden als sehr effektiv. Für die Parameterexploration wurde aufgrund der höheren Geschwindigkeit die NHM-Strategie verwendet. Es wurden, ausgehend von PC-Fx, mehrmals Populationen von bis zu 4 Läufern auf die Reise im Parameterraum geschickt. Es wurde sehr langsam exponentiell abgekühlt bei einer Starttemperatur von $T = 1000$ und einem Abkühlfaktor von 0.999. Bei hinreichend geringer Temperatur wurde – ausgehend von den Parameterlösungen der Läufer – die NHM-Strategie mit Bevington-Curved-Step verwendet. Führte dies zum Erfolg, d.h. zu einer weiteren deutlichen Verringerung des χ^2 , wurde erneut ein Fit durchgeführt, diesmal aber mit der NL-Z2-Strategie und Bevington-Curved-Step.

Wie man in Fig 6.3 erkennt kann, werden durch DMC+SA große Parameterbereiche durchgekämmt, so dass das Auffinden der relevanten Minima sehr wahrscheinlich ist. Diese Prozedur kann damit auch prinzipiell das *manuelle Ausprobieren der Startwerte* ersetzen. Sie wird durch die vorherigen Explorationen motiviert, die eine sehr hügelige Struktur der χ^2 Fläche zum Vorschein gebracht hatten.

Kopplungskonstante	Wert	Dimension	nichtkorrelierter Fehler	korrelierter Fehler
α_S	-14.9357	fm ²	0.00040	0.12
β_S	22.994	fm ⁵	0.0048	1.1
γ_S	-66.7657	fm ⁸	0.047	9.5
δ_S	-0.6346	fm ⁴	0.0013	0.14
α_V	10.0979	fm ²	0.00037	0.12
γ_V	-8.918	fm ⁸	0.039	4.9
δ_V	-0.1807	fm ⁴	0.0011	0.14
α_{TV}	1.350	fm ²	0.016	0.15
δ_{TV}	-0.063	fm ⁴	0.040	1.07
V_P	-321	MeV fm ³	4.1	6.4
V_N	-308	MeV fm ³	3.6	7.2

Tabelle 7.3: Die Kraft PC-F1. Zu jeder Kopplungskonstante sind die korrespondierenden unkorrelierten und korrelierten Fehler angegeben. Das totale χ^2 ist 99.1, $\chi_{pt}^2 = 2.11$, $\chi_{df}^2 = 2.75$.

Im Vergleich zu PC-Fx hat PC-F1 als zusätzlichen Freiheitsgrad einen Ableitungsterm in der isovektoriellen Vektordichte mit dem Parameter δ_{TV} . Die Hinzunahme dieses Terms gibt dem isovektoriellen Kanal der Wechselwirkung die gleiche Flexibilität wie den isoskalaren Kanälen, und behandelt sie, von den Nichtlinearitäten abgesehen, auf gleichem Niveau. Der korrelierte Fehler dieses Terms macht ihn jedoch mit dem Wert Null verträglich, so dass diese Erweiterung nicht genau fixiert werden konnte.

Mit der Kraft PC-F1 hat das Punktkopplungsmodell eine Qualität, die mit den RMF- und SHF-Modellen vergleichbar ist. Diese Behauptung wird bei der Diskussion der numerischen Ergebnisse untermauert und dokumentiert werden. Das χ^2 des Fits beträgt 99.1, das χ^2 von NL-Z2 ist 132.

Zur Bewertung der Kräfte können neben dem totalen χ^2 noch zwei weitere Zahlen hinzugezogen werden: das χ^2 pro Datenpunkt, χ_{pt}^2 , sowie das χ^2 pro Freiheitsgrad (engl. degree of freedom), χ_{df}^2 . Die Zahl der Datenpunkte ist die Anzahl an Observablen, die in die Anpassung der Parameter eingehen. Die Anzahl der Freiheitsgrade errechnet sich aus der Anzahl der Datenpunkte, abzüglich der Anzahl der im Fit variierten Parameter. Wir werden alle drei Werte für die einzelnen Kräfte angeben.

7.2.4 Die gefitteten Paarkraftstärken

Die Paarkraftstärken für PC-F1 wurden während des Fits der Modell-Parameter bestimmt, ihre Werte sind

$$V_p = -321 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3, \quad V_n = -308 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3.$$

7.2.5 Beschreibung der angefitteten Kerne mit PC-F1

In Abbildung 7.3 sind für die Kräfte PC-F1 und zum Vergleich NL-Z2 die prozentualen Fehler der gefitteten Observablen gezeigt. Auf der rechten Seite sind die über jeweils alle Observablen einer Gruppe gemittelten Fehler zu sehen. Die Kraft NL-Z2 hat bei den Bindungsenergien einen deutlich kleineren Fehler als die Kraft PC-F1 und bleibt innerhalb des bei der Anpassung geforderten Fehlers. Die Kerne ^{40}Ca und ^{58}Ni verursachen die größten Schwierigkeiten bei beiden Kräften. RMF-PC+PC-F1 zeigt bei den rms- und Diffraktionsradien deutlich bessere Ergebnisse. Die Fehler bei NL-Z2 überschreiten die beim Fit geforderte Genauigkeit. Die Oberflächendicken werden bei NL-Z2 mit etwas besserer Genauigkeit reproduziert als bei PC-F1. Diese Observable verursacht bei den betrachteten Kräften sowie generell bei RMF Modellen die größten Schwierigkeiten: Oberflächendicken werden tendenziell unterschätzt, wobei der Grund dafür noch unklar ist.

7.2.6 Parameterkorrelationen in PC-F1

Wie wir in Tabelle 7.3 gesehen haben, besitzen die Parameter der Kraft PC-F1 große korrelierte Fehler, die oft eine Größenordnung größer sind als die nichtkorrelierten Fehler. Gründe dafür sind große Korrelationen zwischen den einzelnen Parametern. In diesem Abschnitt wollen wir einige zwischen jeweils zwei Parametern betrachten¹. Das Ergebnis dieser Betrachtungen kann in zukünftigen Anpassungen von Parametern verwendet werden.

Die wichtigste Korrelation im Punktkopplungsmodell besteht zwischen den Parametern α_S und α_V , die mit den dazugehörigen Termen den größten Beitrag zum Kern-Potenzial liefern:

$$V_{\text{kern}} \approx \alpha_S \rho_S + \alpha_V \rho_V \approx 50 \text{ MeV}. \quad (7.2)$$

Wir werten im Folgenden das totale χ^2 von unterschiedlichen Kombinationen der zwei jeweils betrachteten Parameter aus und stellen es mit Hilfe einer Grauskala dar. Die Variationen der Parameter in Abbildung 7.4 (sowie den folgenden Abbildungen) sind entsprechend ihrer korrelierten Fehler gewählt. Man erkennt eine deutlich lineare Kombination der Parameter mit mehreren Bergen und Tälern entlang einer Diagonalen. Diese Korrelation ist verständlich, da sich ein Kern-Potenzial von $\approx 50 \text{ MeV}$ durch verschiedene Kombinationen von α_S und α_V realisieren lässt. Allerdings deuten die Erhöhungen in χ^2 für gewisse Kombinationen darauf hin, dass diese Realisation nicht mit allen Kombinationen gleich gut gelingt. Sensitiv auf die Summe der beiden Parameter ist das Spin-Bahn-Potenzial. Innerhalb der korrelierten Fehler zeigen sich dadurch jedoch keine großen Auswirkungen auf das χ^2 .

¹Die übrigen Parameter werden bei diesen Rechnungen nicht variiert.

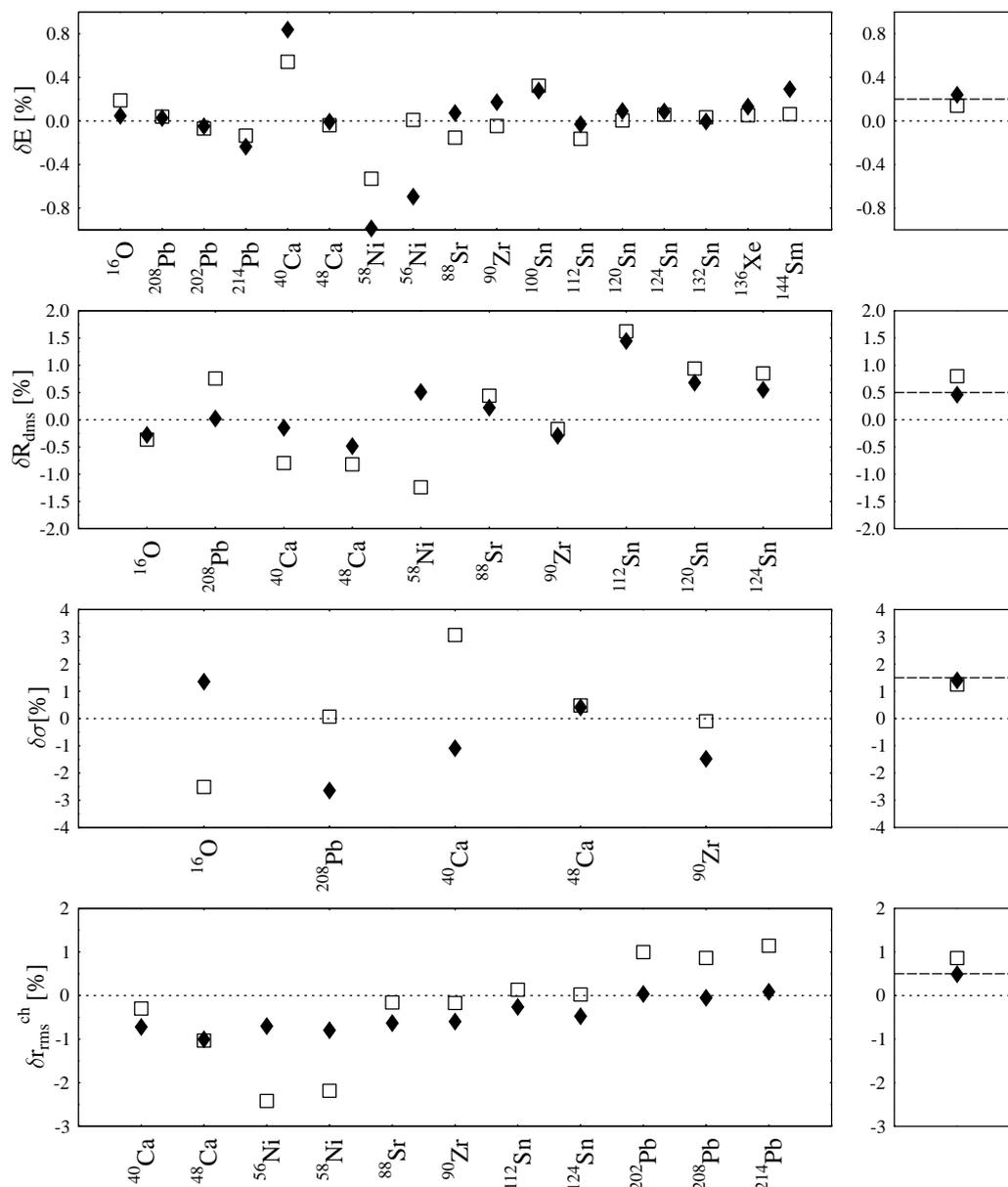


Abbildung 7.3: Prozentuale Abweichungen der berechneten Observablen von den experimentellen Daten für die Kräfte PC-F1 (volle Rauten) und NL-Z2 (Quadrate): von oben nach unten sind Bindungsenergie, Diffraktionsradius, Oberflächendicke und rms-Radius aufgetragen. Die Grafiken rechts zeigen jeweils den gemittelten Fehler.

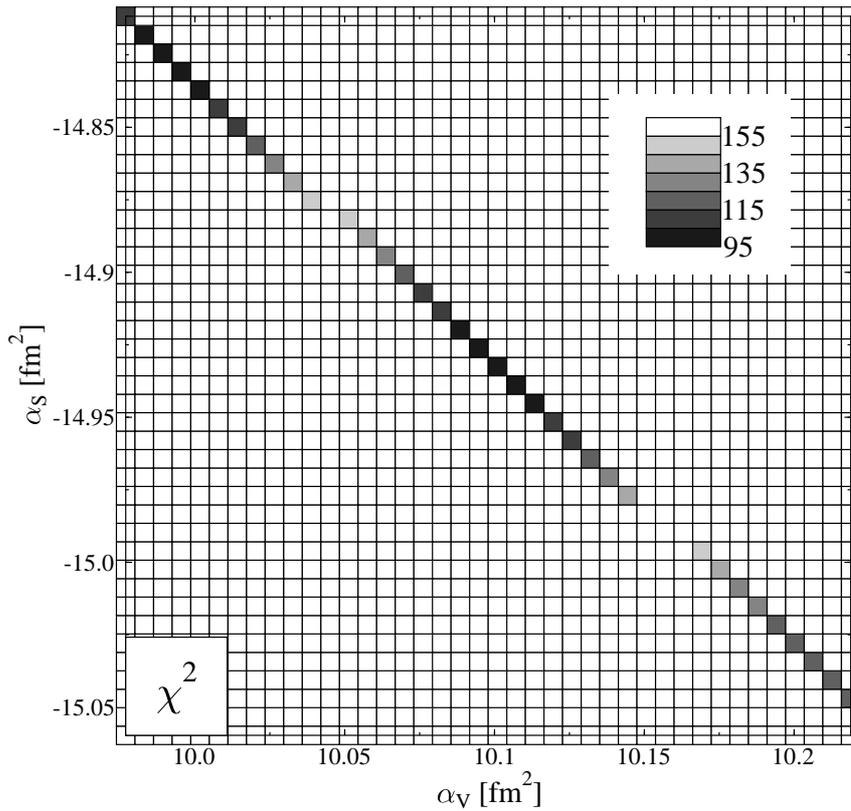


Abbildung 7.4: Parameterkorrelation zwischen α_S und α_V . Aufgetragen ist in der Grauskala das totale χ^2 . Werte größer als 155 sind weiss. Die Parameterkombination der Kraft PC-F1 entspricht der Mitte der Abbildung.

Noch etwas anderes wird durch Abbildung 7.4 deutlich: es existieren verschiedene lokale Minima, deren χ^2 sich kaum unterscheidet. Genau diese Problematik hatte zu den Studien aus Kapitel 6 geführt.

R. J. Furnstahl und Mitarbeiter schlagen vor, bei Parameteranpassungen zu den neuen Parametern

$$\alpha_{\text{summe}} = \alpha_S + \alpha_V, \quad (7.3)$$

$$\alpha_{\text{differenz}} = \alpha_S - \alpha_V \quad (7.4)$$

überzugehen, um diesen Korrelationen Rechnung zu tragen [Fur97, Fur98]. Dem Problem der lokalen Minima kann dadurch allerdings nicht Rechnung getragen werden. Die Korrelationen zwischen den Parametern, die vor den Ableitungstermen der isoskalar-skalaren und vektoriellen Dichte stehen (δ_S und δ_V) sind in Abbildung 7.5 zu sehen. Sie sind fast identisch mit denen der Parameter α_S und α_V , die wir oben untersucht haben. Als Erklärung dafür kann wiederum das Argument herangezogen werden, dass das mittlere Kern-Potenzial nur sensitiv auf die Summe der beiden Anteile aus skalarem und vektoriellem Potenzial ist. Interessant ist hierbei, dass dies genauso auf die Oberfläche des Atomkerns zutrifft, für die die Ableitungsterme die größten Beiträge liefern.

Abbildung 7.6 zeigt die Korrelationen zwischen den zwei nichtlinearen Parametern β_S und γ_S . Auch hier ist eine lineare Korrelation zu erkennen. Diese ist aber nicht auf den ganzen Bereich, der durch die korrelierten Fehler aufgespannt ist, ausgedehnt. Das bedeutet, dass hier Korrelationen mit anderen Parametern wichtig sind, während die Korrelationen der beiden isoskalaren linearen Parameter weitgehend unabhängig davon sind. Die Parameterkorrelationen innerhalb der korrelierten

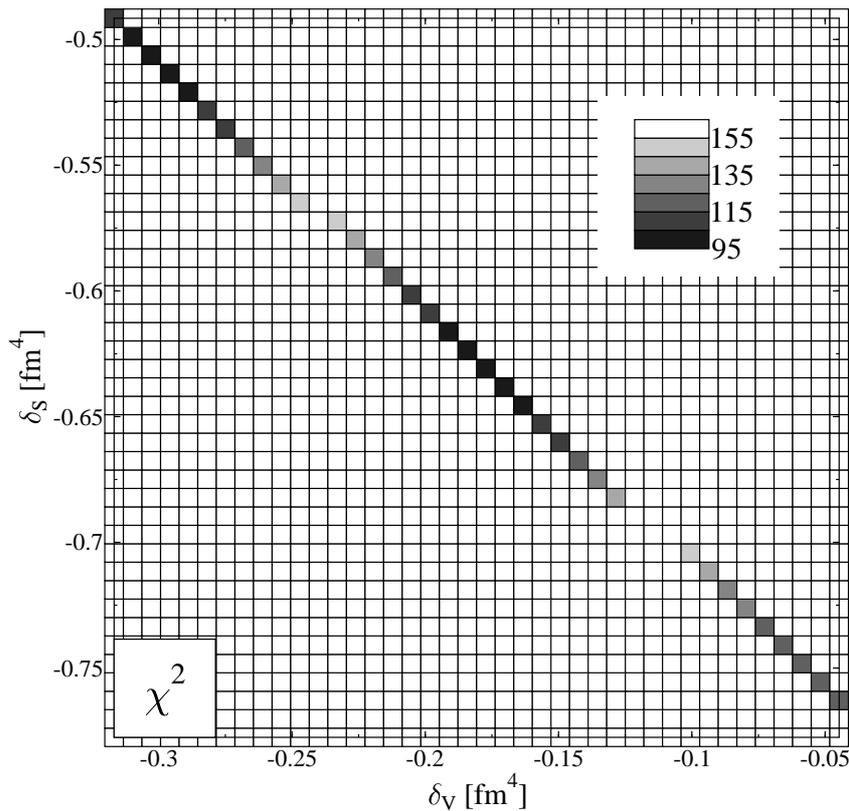


Abbildung 7.5: Parameterkorrelation zwischen δ_S und δ_V . Aufgetragen ist in der Grauskala das totale χ^2 . Die Parameterkombination der Kraft PC-F1 entspricht der Mitte der Abbildung.

Fehler für die Kombinationen α_S und δ_S sowie α_V und δ_V sind in Abbildung 7.7 zu sehen. Bei dieser Kombination der Parameter sieht man, dass ein eindeutiges Minimum existiert und Korrelationen kaum vorhanden sind. Mit anderen Worten: Für einen gegebenen Parametersatz gibt es genau eine Kombination der Parameter α_S und δ_S und α_V und δ_V , die das χ^2 minimiert, d.h. es ist ein starker Zusammenhang zwischen beiden Kopplungskonstanten festzustellen. Im Falle der Parameter des vektoriellen Kanals der Wechselwirkung ist dies besonders interessant, da sich δ_V deutlich von dem zu erwartenden Wert aus der Entwicklung des Propagators des ω -Mesons unterscheidet.

7.3 Parametersätze für die erweiterten RMF-PC Modelle

7.3.1 Ein linearer Term in der isovektoriellen skalaren Dichte: PC-F2

Tabelle 7.4 zeigt das Ergebnis des Fits des neuen Parametersatzes mit der Erweiterung im isovektoriellen skalaren Kanal, wodurch der zusätzliche Parameter α_{TS} eingeführt wird. Die Kopplungskonstante ist positiv, was den physikalischen Erwartungen widerspricht, da dies zu einem repulsiven skalaren Meson korrespondieren würde. Die Summe der beiden isovektoriellen Parameter entspricht in etwa dem Wert von α_{TV} bei der Kraft PC-F1. Der Wert von δ_{TV} ist gegenüber PC-F1 vergrößert. Weiterhin sind die korrelierten und unkorrelierten Fehler kleiner geworden. Im Vergleich zu PC-F1 wurde χ^2 um 0.6% vermindert. Zusätzliche Fitversuche ergaben auch negative Werte für α_{TS} , wobei in Bezug auf die Beschreibung von Observablen keine nennenswerten Unterschiede oder Verbesserungen festzustellen waren.

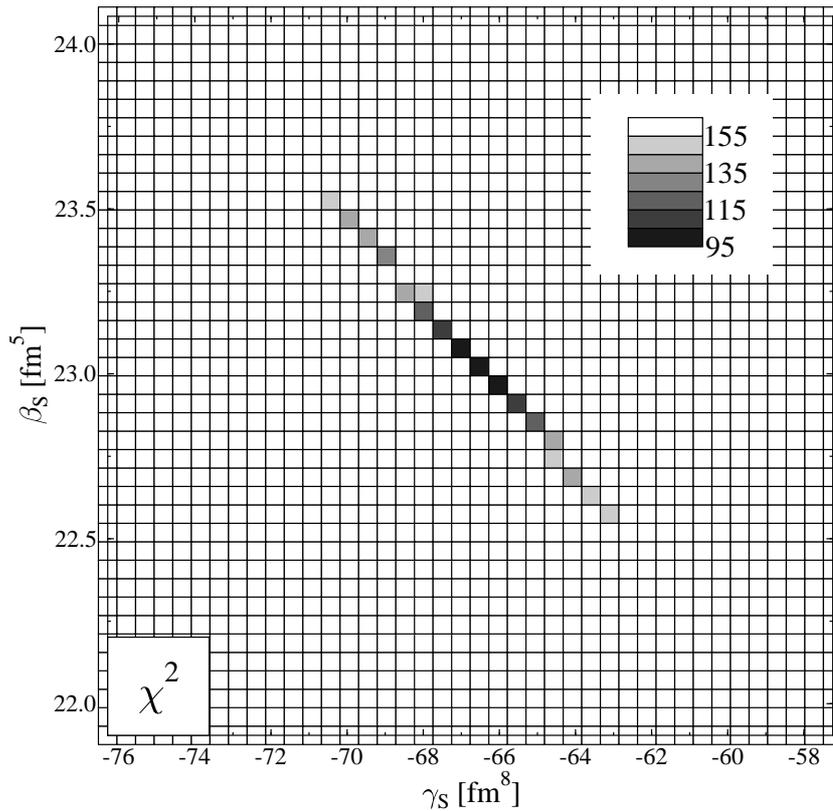


Abbildung 7.6: Parameterkorrelation zwischen β_S und γ_S . Aufgetragen ist in der Grauskala das totale χ^2 . Die Parameterkombination der Kraft PC-F1 entspricht der Mitte der Abbildung.

7.3.2 Ein nichtlinearer Term in der isovektoriellen-vektoriellen Dichte: PC-F3

Tabelle 7.5 zeigt das Resultat der Parameteranpassung eines Parametersatzes mit einem zusätzlichen nichtlinearen Term der isovektoriell-vektoriellen Dichte. Der zugehörige Parameter ist γ_{TV} . Dieser Parameter besitzt große unkorrelierte und korrelierte Fehler. Der korrelierte Fehler ist mit Werten von γ_{TV} größer oder gleich Null verträglich. Zusätzlich dazu haben sich die Fehler von δ_{TV} vergrößert. Es wird deutlich, dass dieser zusätzliche Freiheitsgrad nicht zufriedenstellend fixiert werden kann. Das χ^2 dieser Kraft ist nur um 0.3% kleiner als das von PC-F1. Der Test dieser Kraft ergibt keine nennenswerte Verbesserung gegenüber PC-F1.

Die Ergebnisse der letzten beiden Abschnitte machen deutlich, dass die Erweiterungen des isovektoriellen Kanals des Punktkopplungsmodells mit der hier verwendeten Fistrategie nicht sinnvoll bewerkstelligt werden können. Aber gerade dieser Aspekt der RMF-Modelle gibt uns noch einige Rätsel auf. So ist bisher noch ungeklärt, warum der Asymmetrie-Koeffizient in symmetrischer unendlicher Kernmaterie im Gegensatz zu den meisten Skyrme-Kräften größer ausfällt als im Tropfenmodell.

7.3.3 Ein Satz mit vier Ableitungstermen: PC-F4

Zuletzt studieren wir einen Satz von Kopplungskonstanten, in dem die acht linearen Parameter α_S , δ_S , α_V , δ_V , α_{TS} , δ_{TS} , α_{TV} und δ_{TV} enthalten sind. Die Propagatoren, die zu dem σ -, ω -, ρ - und δ -Meson gehören, werden alle bis zur gleichen Ordnung entwickelt. Der aus dem Fit resultierende Parametersatz PC-F4 ist in Tabelle 7.6 zu sehen. Die Kraft besitzt einen negativen Wert für α_{TS} , was

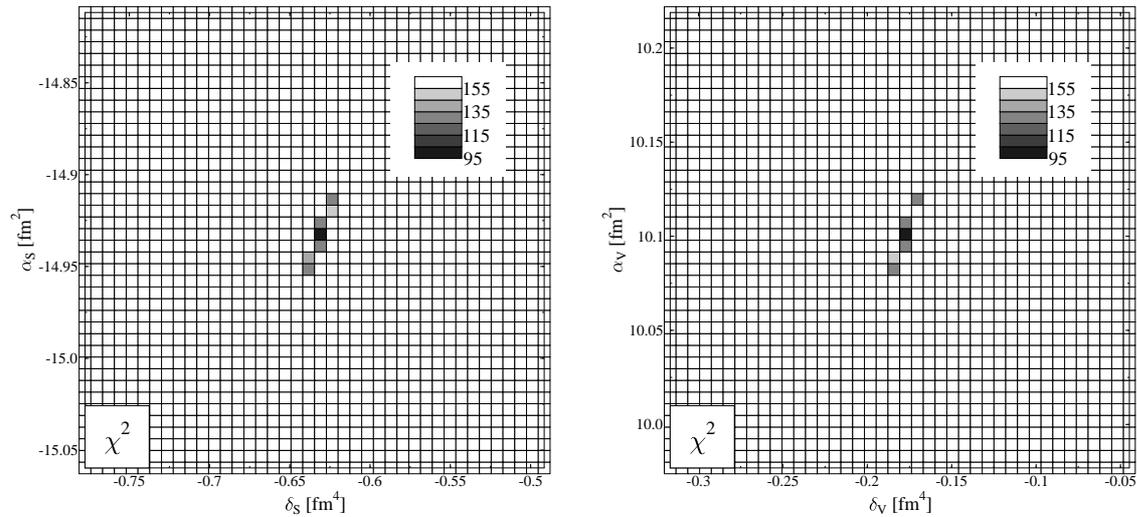


Abbildung 7.7: Parameterkorrelation zwischen α_S und δ_S (links) sowie α_V und δ_V (rechts). Aufgetragen ist in der Grauskala das totale χ^2 . Die Parameterkombination der Kraft PC-F1 entspricht der Mitte der Abbildung.

Kopplungskonstante	Wert	Dimension	nichtkorrelierter Fehler	korrelierter Fehler
α_S	-14.9359	fm^2	0.00028	0.12
β_S	22.9875	fm^5	0.0036	1.1
γ_S	-66.928	fm^8	0.035	8.9
δ_S	-0.6304	fm^4	0.0017	0.12
α_V	10.0986	fm^2	0.00029	0.13
γ_V	-8.790	fm^8	0.029	4.5
δ_V	-0.1847	fm^4	0.0032	0.13
α_{TS}	0.091	fm^2	0.014	2.2
α_{TV}	1.262	fm^2	0.013	2.0
δ_{TV}	-0.09	fm^4	0.02	0.34
V_P	-321	MeV fm^3	2.8	5.2
V_N	-308	MeV fm^3	2.5	4.1

Tabelle 7.4: Die Parameter des Satzes PC-F2 mit einem zusätzlichen linearen Term in der isovektoriellen skalaren Dichte. Das totale χ^2 ist 98.5, $\chi_{\text{pt}}^2 = 2.10$, $\chi_{\text{df}}^2 = 2.80$.

einem attraktiven Potenzial entspricht. Die Summe $\alpha_{TS} + \alpha_{TV}$ ist ≈ 1.3 , das entspricht dem Wert von α_{TV} in der Kraft PC-F1. Es zeigt sich, dass dieser Wert zwar durch die Observablen, an die die Kopplungskonstanten angepasst werden, bestimmt ist, nicht aber die Aufteilung auf den skalaren und vektoriellen Kanal. Aufgrund der großen korrelierten Fehler sind alle isovektoriellen Parameter bis auf α_{TV} mit Null verträglich, d.h. alle Erweiterungen gegenüber PC-F1 sind nur sehr lose bestimmt bzw. nicht wirklich relevant.

Kopplungskonstante	Wert	Dimension	nichtkorrelierter Fehler	korrelierter Fehler
α_S	-14.9358	fm ²	0.00038	0.15
β_S	22.9928	fm ⁵	0.0046	1.22
γ_S	-66.8052	fm ⁸	0.0454	11.3
δ_S	-0.6337	fm ⁴	0.0013	0.15
α_V	10.098	fm ²	0.00036	0.17
γ_V	-8.903	fm ⁸	0.038	5.4
δ_V	-0.1819	fm ⁴	0.0013	0.15
α_{TV}	1.382	fm ²	0.016	0.10
γ_{TV}	-124.6	fm ⁸	70.6	225.2
δ_{TV}	-0.06	fm ⁴	0.07	0.25
V_P	-321	MeV fm ³	4.4	5.5
V_N	-308	MeV fm ³	3.8	4.0

Tabelle 7.5: Die Kopplungskonstanten von PC-F3 mit der nichtlinearen Erweiterung im Isovektor-Vektor-Kanal. Das totale χ^2 ist 98.8, $\chi_{pt}^2 = 2.10$, $\chi_{dr}^2 = 2.82$.

Hier stehen wir vor einem interessanten Rätsel: Obwohl der isovektorielle Kanal in Standard-RMF-Modellen sehr unflexibel ist (die ganze Abhängigkeit steckt im ρ -Meson bzw. in seinem entwickelten Propagator), lassen sich Erweiterungen nicht fixieren. Versionen des RMF-FR-Modells, welche Tensorkopplungen der Vektormesonen (NL-VT1) oder das δ -Meson (NL δ -20) enthalten, zeigen im Gegensatz zu Standardkräften keine Verbesserungen [Rut99]².

Die Lösung kann in einer Erweiterung der Fitstrategie bestehen dahingehend, dass mehr Kerne mit großem Isospin (exotische Kerne) oder Informationen über Neutronenmaterie berücksichtigt werden.

Die oben präsentierten Parametersätze machen deutlich, dass Sätze mit mehr als neun Parametern mit der gegenwärtigen Fitstrategie nicht bzw. nur sehr ungenau angepasst werden können. Bereits δ_{TV} der Kraft PC-F1 ist nicht genau fixiert. Aus diesem Grund wurde davon abgesehen, Parametersätze mit noch mehr Parametern zu untersuchen.

7.3.4 Reduzierung der Parameter und Zusammenhang mit Walecka-artigen Modellen

In unserem Ansatz für das Punktkopplungsmodell korrespondiert zu jedem Term, außer den Termen für die freien Nukleonen und den elektromagnetischen Termen, eine Kopplungskonstante. Diese Situation unterscheidet sich von der mit RMF-FR-Modellen. Dort sind Fits nicht sensitiv auf die Werte der Massen des ρ - und des ω -Mesons, so dass diese Parameter bereits vor der Anpassung fixiert werden können (dies geschieht mit Hilfe der Werte aus Ein-Boson-Austausch-Potenzialen). Solch eine Möglichkeit kann es beim Punktkopplungsmodell auch geben, obwohl die unkorrelierten Fehler für

²Dies ist in Bezug auf die Tensorkopplung des ρ -Mesons interessant, da ihr Beitrag in Ein-Boson-Austausch-Potenzialen deutlich den der vektorialen Kopplung überwiegt [Eri88].

Kopplungskonstante	Wert	Dimension	nichtkorrelierter Fehler	korrelierter Fehler
α_S	-14.9352	fm ²	0.00043	0.15
β_S	22.9787	fm ⁵	0.0046	1.3
γ_S	-66.904	fm ⁸	0.045	12.5
δ_S	-0.6308	fm ⁴	0.0013	0.15
α_V	10.099	fm ²	0.00036	0.15
γ_V	-8.836	fm ⁸	0.038	5.95
δ_V	-0.1843	fm ⁴	0.0013	0.14
α_{TS}	-0.231	fm ²	0.018	1.5
δ_{TS}	-0.170	fm ⁴	0.070	1.4
α_{TV}	1.533	fm ²	0.016	1.4
δ_{TV}	0.004	fm ⁴	0.070 1.4	
V_P	-321	MeV fm ³	4.4	4.9
V_N	-308	MeV fm ³	3.8	4.2

Tabelle 7.6: Die Kopplungskonstanten von PC-F4 mit vier Ableitungstermen. Das totale χ^2 ist 98.2, $\chi_{pt}^2 = 2.09$, $\chi_{df}^2 = 2.89$.

die Kraft PC-F1 in dieser Hinsicht keine klare Aussage ermöglichen (der Parameter δ_{TV} ist nur sehr ungenau bestimmt). Weiterhin ergibt die Entwicklung der mesonischen Propagatoren einen direkten Zusammenhang zwischen den Parametern der 4-Fermionen-Terme und den korrespondierenden Ableitungstermen. Im RMF-FR-Modell wird die Kopplung zwischen den nukleonischen Dichten durch einen Propagator mit endlicher Reichweite vermittelt. Dieser kann entwickelt werden. Die wichtigsten Terme sind der nullreichweitige Term und ein Term mit Ableitungen. Im skalaren Fall ergibt sich

$$\begin{aligned}
\int d^3r \mathcal{L}_S &= \int d^3r \rho_S \frac{g_\sigma^2}{m_\sigma^2 + \Delta} \rho_S \\
&\approx \int d^3r \left(\underbrace{\frac{g_\sigma^2}{m_\sigma^2}}_{\alpha_S} \rho_S^2 + \underbrace{\frac{g_\sigma^2}{m_\sigma^4}}_{\delta_S} (\nabla \rho_S)^2 \right) .
\end{aligned} \tag{7.5}$$

Dabei werden die entsprechenden Parameter des Punktkopplungsmodells gekennzeichnet. Die umgekehrten Relationen lauten entsprechend

$$m_\sigma^2 = \alpha_S / \delta_S, \quad g_\sigma^2 = -\alpha_S^2 / \delta_S. \tag{7.6}$$

Die Beziehungen für das ω - und das ρ -Meson lauten

$$\alpha_V = \frac{g_\omega^2}{m_\omega^2}, \quad \delta_V = \frac{g_\omega^2}{m_\omega^4}, \tag{7.7}$$

$$\alpha_{TV} = \frac{g_\rho^2}{m_\rho^2}, \quad \delta_{TV} = \frac{g_\rho^2}{m_\rho^4}. \tag{7.8}$$

In Tabelle 7.7 sind die (gerundeten) Kopplungskonstanten der vier angepassten Parametersätze sowie

Kopplungskonstante	Wert von NL-Z2	PC-F1	PC-F2	PC-F3	PC-F4
$\alpha_S [\text{fm}]^2$	-16.451	-14.936	-14.936	-14.936	-14.935
$\delta_S [\text{fm}]^4$	-2.634	-0.635	-0.630	-0.634	-0.631
$\alpha_V [\text{fm}]^2$	10.665	10.098	10.099	10.098	10.099
$\delta_V [\text{fm}]^4$	6.826	-0.181	-0.185	-0.182	-0.184
$\alpha_{TV} [\text{fm}]^2$	1.389	1.350	1.262	1.382	1.533
$\delta_{TV} [\text{fm}]^4$	0.093	-0.063	-0.09	-0.06	0.004
$\alpha_{TS} [\text{fm}]^2$	–	–	0.091	–	-0.231
$\delta_{TS} [\text{fm}]^4$	–	–	–	–	-0.170

Tabelle 7.7: Die aus NL-Z2 berechneten Parameter und die korrespondierenden Werte der Parametersätze PC-F1 bis PC-F4.

die Werte, die man aus der Kraft NL-Z2 extrahieren kann, angegeben. Die Werte für die isoskalaren linearen Parameter sind in recht guter Übereinstimmung, die aus NL-Z2 sind vom Betrag her etwas größer. Ein Grund dafür kann sein, dass im RMF-PC die nichtlinearen Terme explizit in den Potenzialen auftauchen³, und auf diese Weise die totalen Potenziale vergrößern: sie sind wichtig für die akkurate Beschreibung der Spin-Bahn-Aufspaltungen in endlichen Kernen. In Kapitel 8 werden wir bei der Diskussion von symmetrischer unendlicher Kernmaterie sehen, dass die Größe der Potenziale bei RMF-FR- und RMF-PC-Modellen übereinstimmt.

Für die Parameter der Ableitungsterme ergeben sich dramatische Diskrepanzen: Nur in der Kraft PC-F4 stimmen die Vorzeichen der isovektoriellen Ableitungs-Parameter mit denen der linearen Parameter überein. Dabei muss man aber bedenken, dass sie aufgrund der großen korrelierten Fehler mit Null verträglich sind. Die Werte von α_{TV} bzw. $\alpha_{TV} + \alpha_{TS}$ stimmen bei allen Kräften mit dem Wert aus NL-Z2 überein. Dies führt bei diesen Modellen zu der erhöhten Asymmetrieenergie. Der Parameter δ_V hat in allen Kräften das falsche Vorzeichen. Um sicherzugehen, dass dies nicht durch den nichtlinearen Term in der isoskalaren Vektordichte verursacht wird, wurde ein Fit mit γ_V durchgeführt. Dieser brachte aber keine Vorzeichenänderung für δ_V .

Die freie Wahl der Parameter der Ableitungsterme erlaubt es, diverse Effekte in diese Parameter zu absorbieren. Dennoch könnte es in der Zukunft möglich sein, gewisse Parameter oder Relationen zwischen ihnen vor dem Fit zu fixieren und physikalisch zu motivieren, was eine Reduktion der Zahl der freien Parameter zufolge hätte. Andererseits deuten die oben diskutierten Diskrepanzen darauf hin, dass echte Ableitungsterme ein wichtiger Bestandteil des Modells sind. In zukünftigen Untersuchungen kann man auch über ein Hybridmodell nachdenken, welches sowohl Mesonen als auch genuine Kontakt- und Ableitungsterme beinhaltet.

Den starken Korrelationen zwischen den Parametern (besonders zwischen α_{TS} und α_{TV} kann in Zukunft eventuell durch modifizierte Anpassungsverfahren Rechnung getragen werden. So werden in [Fur98] für gewisse Paare von Parametern deren Summe und ihre Differenz angepasst, statt beide Parameter einzeln anzupassen. Dies kann den Vorteil haben, dass kleine Modifikationen dieser neuen Parameter nicht zu drastischen Änderungen in χ^2 führen. Das Problem der unterschiedlichen lokalen Minima bleibt aber weiterhin bestehen. Die Erforschung der relevanten Korrelationen stellt somit

³Im RMF-FR-Modell stehen sie in der Klein-Gordon-Gleichung für das σ -Meson.

eine wichtige Aufgabe der nahen Zukunft dar.

7.3.5 Kräfte mit Coulomb-Austauschterm

In Abschnitt C des Anhangs finden sich vier Punktkopplungskräfte und eine Kraft des RMF-FR-Modells, bei denen während des Fits der Coulomb-Austauschterm berücksichtigt wird⁴. Die Anpassungen erfolgten mit dem Bevington-Curved-Step-Verfahren ausgehend von den Parametersätzen PC-F1 bis PC-F4, der Satz des RMF-FR-Modells wurde ausgehend von NL-Z2 angepasst.

Die χ -Werte der einzelnen Punktkopplungskräfte zeigen nur geringe Unterschiede, woraus folgt, dass die Hinzunahme des Coulomb-Kraft nichts an der Unmöglichkeit ändert, die Erweiterungen im isovektoriellen Kanal anzupassen. Die χ^2 sind insgesamt etwas schlechter (ca 4%) als das der RMF-PC-Kraft PC-F1. Dies kann bedeuten, dass sich die gegenwärtige Hartree-Version nicht so gut für diese Studien eignet. Andererseits wurden zum Anpassen dieser Sätze die Startwerte der Kräfte PC-F1 bis PC-F4 verwendet. Die sehr hügelige Struktur der χ^2 -Hyperfläche legt nahe, dass andere Bereiche im Parameterraum existieren können, die eine Verbesserung der Kräfte ermöglichen.

Diese Kräfte können für zukünftige Studien verwendet werden, in denen der Einfluss des Coulomb-Austauschterms studiert werden soll. Seine Berücksichtigung in Modellen, die bisher fast ausschließlich in der Hartree-Näherung verwendet werden, ist nicht konsistent. Trotzdem können erste Explorationen gemacht werden, um die prinzipiellen Effekte zu verstehen. Er kann später konsistent in einer Hartree-Fock-Version des Punktkopplungsmodells verwendet werden.

⁴Dieser ist bei den üblichen Kräften nicht vorhanden.

Kapitel 8

Tests des Punktkopplungsmodells

”Das also war des Pudels Kern.“
(J. W. v. Goethe)

8.1 Testkriterien und Auswahl an Observablen

In diesem Kapitel untersuchen wir das Verhalten des Modells mit der Kraft PC-F1 im Bereich der experimentell bekannten Kerne für eine Vielzahl an Observablen. Dabei vergleichen wir es sowohl mit experimentellen Daten als auch mit anderen Mean-Field-Modellen. Dadurch können verschiedene Einsichten gewonnen werden: einerseits lernen wir etwas über die Qualität des neuen Modells, andererseits können wir aus Vergleichen mit anderen Modellen auch etwas über den Zusammenhang bestimmter Eigenschaften der Modelle mit ihrem Verhalten für bestimmte Klassen an Observablen lernen. So können wir z.B. den Einfluss einer relativistischen Beschreibungsweise gegenüber einer nichtrelativistischen untersuchen, oder auch den Einfluss von Nullreichweite gegenüber endlicher Reichweite (wie bei den RMF-FR-Modellen) studieren. Die Situation in der Kernstruktur ist noch immer so, dass die Modelle nicht alle Observable gleichzeitig mit ähnlicher Qualität beschreiben können. Die Auswahl der Observablen bei der Anpassung der Kopplungskonstanten bestimmt dabei, welche Observablen mit guter Qualität beschrieben werden können. Die Vergleiche zwischen RMF-PC, RMF-FR und SHF können helfen, den Einfluss verschiedener Ingredienzien der Modelle auf die Beschreibung von Observablen zu testen.

Wir werden hauptsächlich Vergleiche zwischen den beiden Varianten des RMF-Modells (RMF-FR und RMF-PC) ziehen, in einigen Fällen betrachten wir auch die Vorhersagen des Skyrme-Hartee-Fock-Modells. Dazu verwenden wir die Skyrme-Kräfte SkI3 [Rei95] und SLy6 [Cha95]. SLy6 wurde konstruiert, um Kerne mit großem Isospin sowie Neutronenmaterie beschreiben zu können. SkI3 besitzt eine Spin-Bahn-Kraft, deren isovektorielle Eigenschaften analog zu denen des RMF-FR-Modells sind. Systematische Untersuchungen der Unterschiede von SHF- und RMF-Modellen finden sich in [Ben97, Rut99].

8.2 Symmetrische, unendliche Kernmaterie

In symmetrischer, unendlicher Kernmaterie lassen sich die Mean-Field-Gleichungen deutlich vereinfachen. Die nukleonischen Wellenfunktionen sind ebene Wellen und wir haben Entartung durch Spin und Isospin vorliegen. Der Zusammenhang zwischen Fermi-Impuls k_F und totaler Dichte ist im

Fermi-Gas-Modell gegeben durch

$$\rho_0 = \sum_{\text{Isospin}} \sum_{\text{Spin}} \int_0^{k_F} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3.$$

Für die skalare Dichte ergibt sich

$$\begin{aligned} \rho_s = \sum_{\text{Isospin}} \sum_{\text{Spin}} \int_0^{k_F} d^3 k \frac{m^*}{\sqrt{k^2 + m^{*2}}} &= \frac{1}{\pi^2} m^* (k_F \sqrt{k_F^2 + m^{*2}} \\ &- m^{*2} \ln \frac{k_F + \sqrt{k_F^2 + m^{*2}}}{m^*}). \end{aligned} \quad (8.1)$$

Aufgrund der räumlichen Homogenität des Systems verschwinden alle Terme mit Ableitungen der Dichten. Die Gleichungen für die Potentiale lauten

$$\begin{aligned} V_S &= \alpha_S \rho_S + \beta_S \rho_S^2 + \gamma_S \rho_S^3, \\ V_V &= \alpha_V \rho_0 + \gamma_V \rho_0^3. \end{aligned}$$

Die Beiträge der isovektoriellen Dichte zum mittleren Potenzial verschwinden aufgrund der Gleichheit von Protonen- und Neutronendichte¹. Durch die gegenseitige Abhängigkeit von skalarer Dichte und effektiver Masse, die sich schreiben lässt als

$$m^* = \alpha_S \rho_S + \beta_S \rho_S^2 + \gamma_S \rho_S^3, \quad (8.2)$$

muss das System für die jeweils vorgegebene Baryondichte iteriert werden. Im Gegensatz zum RMF-FR-Modell tauchen hier, wie wir schon gesehen haben, die nichtlinearen Terme explizit in der effektiven Masse auf.

Die Energie pro Teilchen ergibt sich aus der T_{00} -Komponente des Energie-Impuls-Tensors zu

$$\begin{aligned} E/A &= \frac{3}{8k_F^3} \left(k_F \sqrt{k_F^2 + m^{*2}} (2k_F^2 + m^{*2}) - m^{*4} \ln \frac{k_F + \sqrt{k_F^2 + m^{*2}}}{m^*} \right) \\ &- \frac{1}{2} \rho_S^2 - \frac{2}{3} \beta_S \rho_S^3 - \frac{3}{4} \gamma_S \rho_S^4 + \frac{1}{2} \alpha_V \rho_0^2 + \frac{3}{4} \gamma_V \rho_0^4. \end{aligned}$$

Neben Sättigungsdichte und Bindungsenergie am Sättigungspunkt ist noch die Kompressibilität eine wichtige Größe. Sie entspricht der Krümmung der Zustandsgleichung am Sättigungspunkt und berechnet sich zu

$$K = 9\rho^2 \left. \frac{\partial^2 E/A}{\partial \rho^2} \right|_{\rho=\rho_0}. \quad (8.3)$$

Sie spielt eine wichtige Rolle bei Dichtefluktuationen, wie sie z.B. bei Riesenresonanzen auftreten.

Der Asymmetriekoeffizient a_4 lässt sich berechnen als [Rut99]

$$a_4 = \left(\frac{k_F^2}{6\sqrt{k_F^2 + m^{*2}}} + \frac{1}{2} \alpha_{TV}^2 \rho_0 \right) \Big|_{\rho=\rho_0}. \quad (8.4)$$

Er steht im Zusammenhang mit der Symmetrieenergie im Tropfenmodell.

Tabelle 8.1 zeigt für die Kräfte die Eigenschaften von symmetrischer, unendlicher Kernmaterie. Die relativistischen Kräfte produzieren eine höhere Bindungsenergie und geringere Dichte am Sättigungspunkt als die Skyrme-Kräfte. Interessanterweise kommen diese beiden Observablen auch für NL3 größer heraus, als sie im Fit vorgegeben wurden. Die RMF-Modelle favorisieren demnach größere

	PC-F1	PC-LA	NL-Z2	NL3	SLy6	SkI3
ρ_0 (fm ⁻³)	0.151	0.148	0.151	0.148	0.159	0.158
E/A (MeV)	-16.17	-16.126	-16.07	-16.24	-15.90	-15.96
m^*/m	0.61	0.575	0.583	0.595	0.690	0.577
K (MeV)	270	264	172	272	230	258
a_4 (MeV)	37.8	37.194	39.0	37.4	32.0	34.8

Tabelle 8.1: Eigenschaften von symmetrischer unendlicher Kernmaterie für die betrachteten Kräfte. ρ_0 und E/A bezeichnen die Sättigungsdichte und Bindungsenergie pro Teilchen, m^*/m ist das Verhältnis von effektiver Masse zu freier Masse, K ist die Kompressibilität und a_4 der Asymmetriekoeffizient.

Werte. Dieses unterschiedliche Verhalten, das kein Effekt der Reichweite ist (RMF-FR und RMF-PC verhalten sich in dieser Hinsicht sehr ähnlich), ist noch unverstanden. Die Kompressibilität kommt bei den Punktkopplungsmodellen automatisch relativ hoch heraus. Der Wert ist dennoch realistischer als der von NL-Z2 hervorgesagte Wert, der den heute als realistisch eingestuften Wert von $K \approx 240$ MeV deutlich unterschätzt. NL3 produziert eine Kompressibilität von ähnlicher Größe, allerdings war hier die Annahme $K = 250$ MeV Bestandteil des Fits. Die Tendenz zu einer Kompressibilität größer als ≈ 240 MeV scheint eine allgemeine Eigenschaft der Punktkopplungsmodelle zu sein. So erhalten auch Furnstahl et al. [Fur98] Werte in dieser Größenordnung oder noch höhere Werte, abhängig von der Anzahl und Art der verwendeten Terme im Ansatz des Modells.

Der Asymmetrie-Koeffizient a_4 liegt bei den RMF-Modellen systematisch höher als bei den Skyrme-Kräften. Dieses systematische Verhalten ist bisher noch nicht geklärt. Der Wert des Skyrme-Hartree-Fock-Modells liegt näher am allgemein akzeptierten Wert von ≈ 30 MeV.

In Abbildung 8.1 sind die Zustandsgleichung sowie die effektive Masse der Nukleonen und der Verlauf der isoskalaren Potentiale eingezeichnet. Man erkennt deutlich den seltsamen Verlauf der Zustandsgleichung für die alte Punktkopplungskraft PC-LA. Er führt zu einem Dichte-Isomer in der Zustandsgleichung und lässt das Modell für Dichten größer als $\rho \approx 0.375 \text{ fm}^{-3}$ instabil werden. Der Grund dafür lässt sich an den Potenzialen erkennen. Ihr Verlauf ist nicht monoton als Funktion der Dichte, sondern ihre Steigung verändert das Vorzeichen, so dass sie beide bei $\rho \approx 0.375 \text{ fm}^{-3}$ den Wert Null erreichen. Genau ab diesem Punkt existieren keine Lösungen für die Zustandsgleichung. Die Ursache dieses Dichte-Isomers ist ein Artefakt der nichtlinearen Parameter des Modells und sollte nicht als physikalische Vorhersage interpretiert werden.

Der nichtlineare Term in der isovektoriellen-vektoriellen Dichte bei PC-F1 führt zu einem weichen Verlauf als bei den RMF-FR-Kräften. Im RMF-FR-Modell kann solch ein Verlauf, der auch durch Resultate von DBHF-Rechnungen² motiviert wird [Sug94], durch eine Selbstwechselwirkung des ω -Mesons erreicht werden. Während diese die Vorhersagekraft des RMF-FR-Modells nicht stark verbessert, führt die Nichtlinearität beim Punktkopplungsmodell zu einer sichtbaren Verbesserung (siehe [Nik92]). Grund dafür kann die unterschiedliche Parametrisierung der mittleren Felder als Funktion der Dichte sein. RMF-FR-Kräfte mit nichtlinearen, vektoriellen Termen produzieren weniger steife Zustandsgleichungen als Modelle ohne diese Art von Selbstwechselwirkung des ω -Mesons [Rut99]. Die weichere Zustandsgleichung von PC-F1 lässt sich auch mit der im Verhältnis zu den RMF-FR-Kräften etwas größeren effektiven Masse in Verbindung bringen, siehe [Bog83, Rut99].

¹Die Coulombkraft wird in Rechnungen zu Kernmaterie nicht berücksichtigt, da sie aufgrund ihrer großen (mathematisch sogar unendlichen) Reichweite einen unendlich großen Energiebeitrag liefern würde.

²DBHF = Dirac-Brückner-Hartree-Fock

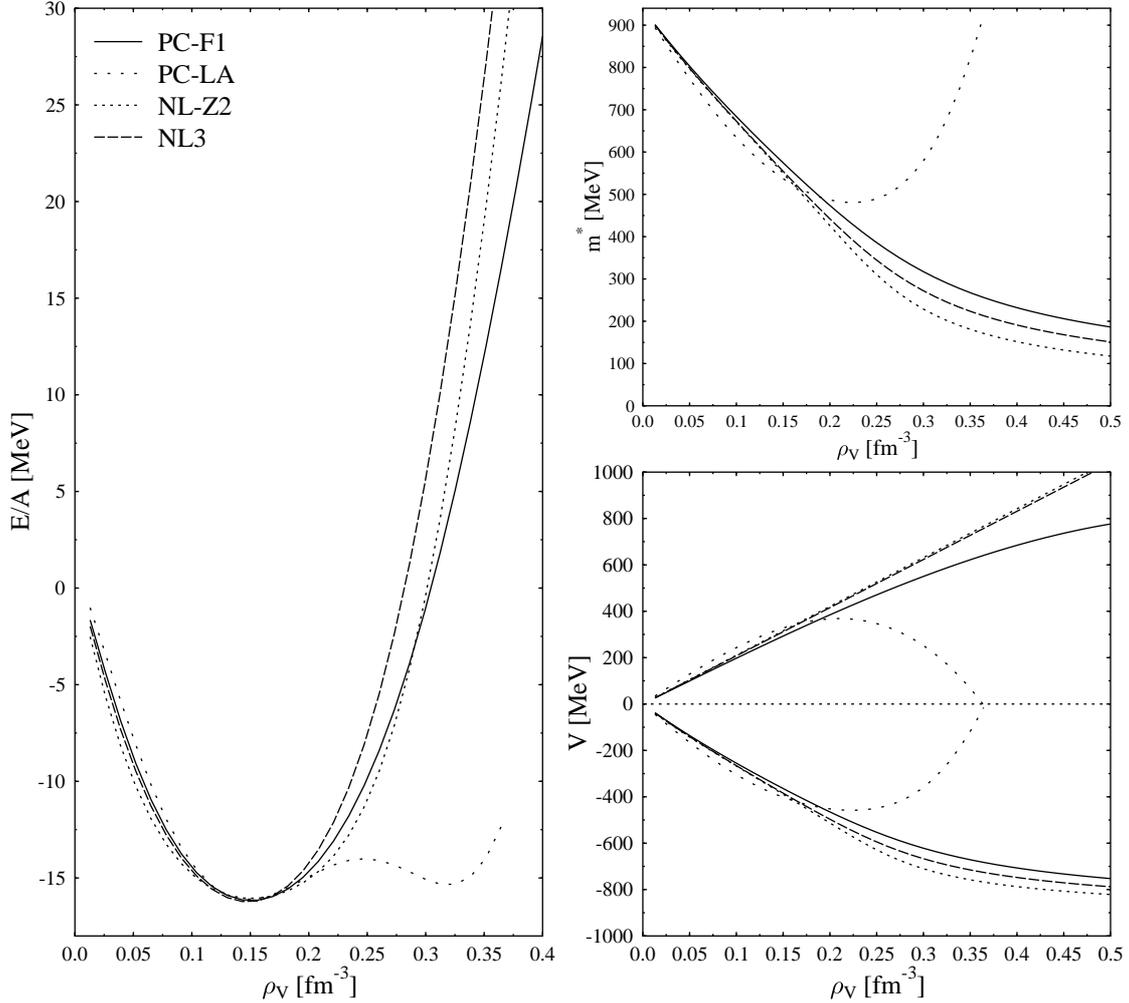


Abbildung 8.1: Die linke Abbildung zeigt die Energie pro Teilchen als Funktion der Baryondichte für die angegebenen Kräfte. Auf der rechten Seite sind die effektive Masse (obere Figur) und die Mean-Field Potentiale gezeichnet (untere Figur).

Die Abhängigkeit des skalaren Potentials von der skalaren Dichte entspricht einer Potenzreihenentwicklung in der skalaren Dichte. Im RMF-FR-Modell wird die Selbstwechselwirkung im Feld und nicht in der Dichte eingeführt, was zu einem gänzlich anderen Verhalten führt³.

Die *bulk properties* stimmen trotz dieser ganz unterschiedlichen Dichteabhängigkeiten sehr gut überein. Dennoch führt die Steigung des Potentials als Funktion der Dichte im Bereich des Sättigungspunktes zu einem Nachteil der Kraft PC-LA, der u. a. bei der Beschreibung von Spin-Bahn-Aufspaltungen in endlichen Kernen sichtbar wird. Dies bildet eine interessante Brücke zwischen dem idealisierten System der Kernmaterie und endlichen Kernen, an deren Beschreibung man schließlich mit Hilfe dieser Modelle interessiert ist.

Die effektive Masse ist bei den RMF-Modellen mit $0.58 \leq m^*/m \leq 0.61$ tendenziell geringer als bei den meisten Skyrme-Kräften. Hierbei muss man aber beachten, dass in den RMF-Modellen

³Zudem wird hier in jedem Iterationsschritt die Mesonenfeldgleichung gelöst.

die effektive Masse vom Impuls abhängt gemäß [Ben99]

$$\frac{m^*(k_F)}{m} = \sqrt{\left(\frac{m^*(0)}{m}\right)^2 + \left(\frac{k_F}{m}\right)^2}. \quad (8.5)$$

Meistens wird als effektive Masse gerade $m^*(0)$ bezeichnet. Dabei wird ein typischer Impuls von $k_f = 1.35/\text{fm}$ angenommen, erhält man aus obiger Gleichung den Ausdruck

$$\frac{m^*}{m} = \sqrt{\left(\frac{m^*(0)}{m}\right)^2 + 0.08}. \quad (8.6)$$

Es ist ersichtlich, dass sich der Wert für die effektive Masse erhöht und näher an die Werte der Skyrme-Kräfte herankommt.

8.3 Neutronenmaterie

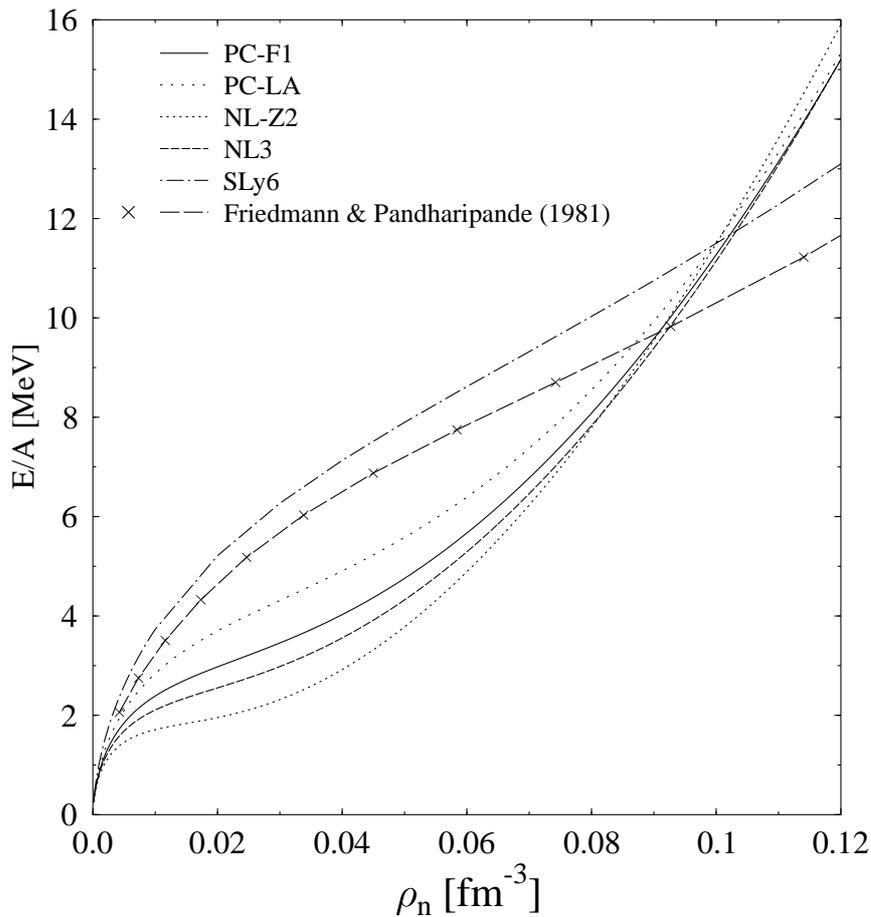


Abbildung 8.2: Die Energie pro Teilchen als Funktion der Dichte für reine Neutronenmaterie.

Neben Kernmaterie ist auch die Untersuchung von reiner Neutronenmaterie interessant. Bei diesem System verhindert im Allgemeinen das Pauli-Prinzip die Existenz eines gebundenen Zustandes.

Trotzdem existieren gebundene Systeme, die hauptsächlich aus (wenn auch nicht reiner) Neutronenmaterie zu bestehen scheinen: Neutronensterne⁴. Diese Systeme sind gravitativ gebunden. Der hohe Gravitationsdruck führt zu dem Auftreten des inversen β -Zerfalls, bei dem sich Protonen zusammen mit Elektronen und Neutrinos in Neutronen verwandeln. Ist auch der Fermi-Druck der Neutronen zu schwach (bzw. exakter: der Druck der durch das Pauli-Prinzip für Quarks verursacht wird), so kollabiert das System, es bildet sich eine Singularität in der Raumzeit. Diese Objekte, für die es Hinweise aus astronomischen Beobachtungen gibt, werden als *schwarze Löcher* bezeichnet.

Die Formeln von symmetrischer Kernmaterie ändern sich an zwei Punkten: Die Beziehung zwischen Fermi-Impuls und Dichte ändert sich, da die Entartung nur noch durch den Spin zustande kommt. Protonen und Neutronen werden separat betrachtet:

$$\rho_{p/n} = \frac{1}{3\pi^2} k_F^3. \quad (8.7)$$

Zusätzlich dazu verschwindet nicht mehr die Quelle des isovektoriellen Mesons bzw. die isovektoriell-vektorielle Dichte. Auf diese Weise entsteht ein Beitrag der Symmetrieenergie zur Energie des Systems:

$$E_{\text{sym}} = \frac{1}{2} \alpha_{\text{TV}} \rho_{\text{TV}}^2. \quad (8.8)$$

Da in Kernmaterierechnungen nicht die Coulomb-Energie berücksichtigt wird, liefern die Formeln für reine Neutronen- oder Protonenmaterie die gleichen Resultate.

Quasi-experimentelle Daten zur Zustandsgleichung von Neutronenmaterie sind aus [Fri81] entnommen. Im Folgenden wollen wir die Vorhersagen der verschiedenen Mean-Field-Modelle berücksichtigen. Figur 8.2 zeigt die Energie pro Teilchen als Funktion der Neutronendichte für die Kräfte PC-F1, PC-LA, NL-Z2, NL3 und die Skyrme-Kraft SLy6. Die relativistischen Kräfte fächern im Bereich der Dichte von $\rho = 0.01 - 0.09 \text{ fm}^{-3}$ auf, sind aber in ihrem Verlauf sehr ähnlich. PC-LA produziert die größten Energien. Wir erkennen ein gemeinsames Verhalten der RMF-FR- und RMF-PC-Kräfte. Es weicht systematisch von der Vorhersage der Skyrme-Kraft SLy6 und den Daten aus [Fri81] ab. Die Zustandsgleichung von SLy6 liegt sehr nahe an den Daten. Auch die Tendenz entspricht ihrem Verlauf. Es muss allerdings beachtet werden, dass die Kraft SLy6 besonders im Hinblick auf die Beschreibung neutronenreicher Systeme erstellt wurde.

Der Punktkopplungsansatz kuriert also nicht die Schwierigkeiten, die bei der Beschreibung von Neutronenmaterie mit relativistischen Mean-Field-Modellen entstehen. Vielleicht kann sie aber gerade deshalb zukünftig zur Fixierung isovektorieller Freiheitsgrade dieser Modelle verwendet werden, siehe dazu auch die Diskussion in Kapitel 6.

8.4 Kernmaterie mit beliebiger Asymmetrie

Die Verallgemeinerung auf beliebige Asymmetrie des Protonen- und Neutronenverhältnisses ist nun einfach: Aus der Protonen- bzw. Neutronendichte $\rho_{p/n}$ müssen die zugehörigen Fermi-Impulse einzeln berechnet werden:

$$k_F^{p/n} = (3.0\pi^2 \cdot \rho_{p/n})^{1/3}. \quad (8.9)$$

Gleichermaßen muss die skalare Dichte für Protonen und Neutronen separat berechnet werden:

$$\rho_s^{p/n} = \sum_{\text{Spin}} \int_0^{k_F^{p/n}} d^3k \frac{m^*}{\sqrt{k_{p/n}^2 + m^{*2}}} = \frac{1}{2\pi^2} m^* (k_F^{p/n})^3 \sqrt{k_F^{p/n^2} + m^{*2}}$$

⁴Dies entspricht einem sehr einfachen Modell eines Neutronensterns. Man muss in realistischen Beschreibungen die Elektronen sowie die Existenz anderer möglicher Materiezustände berücksichtigen (Quarkmaterie, seltsame Materie usw.).

$$- m^{*2} \ln \frac{k_F^{p/n} + \sqrt{k_F^{p/n^2} + m^{*2}}}{m^*}. \quad (8.10)$$

Die Einteilchenenergien der Protonen und Neutronen ergeben zusammen mit dem Beitrag der Energie des mittleren Feldes (ebenso wie bei Neutronenmaterie gibt es auch hier wieder einen Beitrag des ρ -Mesons bzw. im Fall des RMF-PC-Modells der isovektoriell-vektoriellen Dichte) die Energie pro Teilchen. Abbildungen 8.3 zeigen die Zustandsgleichung als Graustufen-Darstellung in der

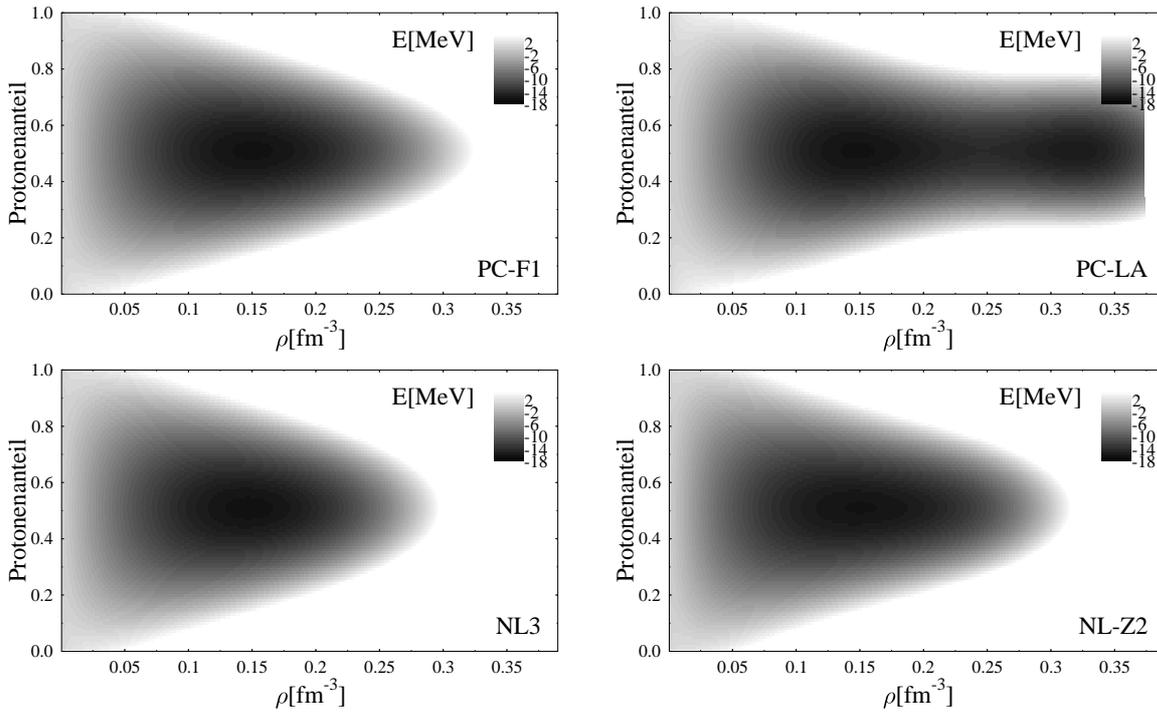


Abbildung 8.3: Bindungsenergie (dargestellt in der Grauskala) in asymmetrischer Kernmaterie für die Kräfte PC-F1, PC-LA, NL3 und NL-Z2.

$\rho - (N - Z)/A$ Ebene. Die Symmetrie der Darstellungen rührt daher, dass in diesen Rechnungen die Coulombkraft, die die Protonen gegenüber den Neutronen auszeichnen würde, unberücksichtigt bleibt. Am stärksten fällt der Unterschied zwischen den Zustandsgleichungen für PC-F1, NL-Z2 und NL3 und der für die Kraft PC-LA auf. Man erkennt deutlich den Sattelpunkt in der $\rho - (N - Z)/A$ Ebene, der zu dem zweiten Minimum in der Zustandsgleichung korrespondiert. Im Gegensatz zu PC-F1 und NL3 ist das *Oval* bei der Kraft NL-Z2 stärker zu höheren Dichten hin ausgedehnt, für kleinere Dichten ähneln sich die Zustandsgleichungen mehr.

Um die Unterschiede in den Kräften genauer zu sehen, sind unten Schnitte in diese Ebene bei verschiedenen Werten für ρ und $(N - Z)/A$ gelegt. Abbildung 8.4 zeigt die Bindungsenergie pro Nukleon als Funktion des Verhältnisses der Neutronen- zur Gesamtdichte von 0,5 bis 1,0 in Schritten von 0,1 (das Verhältnis von 1,0 entspricht reiner Neutronenmaterie). Für symmetrische Kernmaterie stimmen alle Kräfte am Punkt der Sättigungsdichte überein (siehe auch obige Diskussion zu den *bulk properties*). Dieser Punkt, an dem sich alle Kurven schneiden, gleitet mit steigendem Neutron/Protonverhältnis zu kleineren Dichten. PC-LA zeigt deutlich die Existenz eines zweiten Minimums in der Zustandsgleichung, diese anomale Struktur⁵ ist auch noch bei reiner Neutronenmaterie sichtbar. Die Punktkopplungskraft PC-F1 besitzt bei hohen Dichten die weichste Zustandsgleichung.

⁵Es gibt Modelle, in denen ein Dichteisomer in Kernmaterie auftritt. Dies geschieht dann jedoch durch eine strukturelle Veränderung von Kernmaterie, wie z.B. Pion-Kondensation. Siehe z.B. [Eri88], S.175ff.

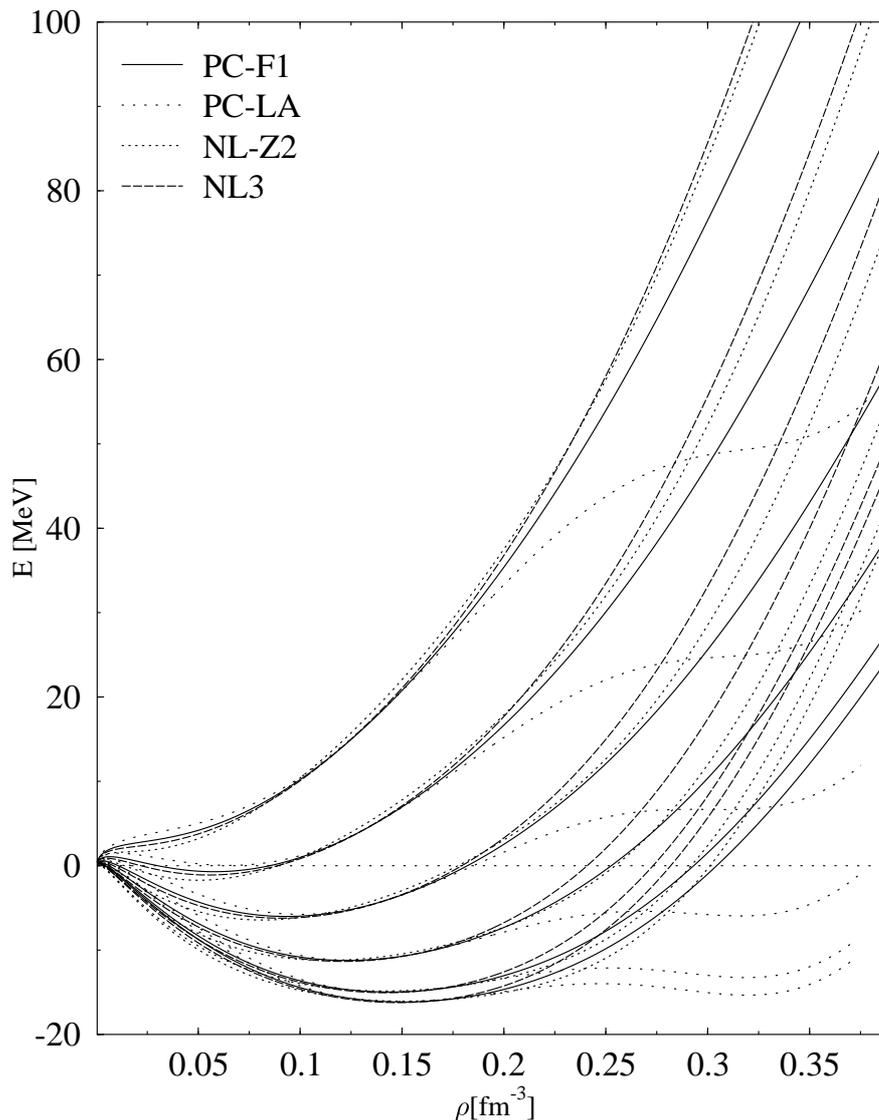


Abbildung 8.4: Die Bindungsenergie als Funktion der Gesamtdichte der Nucleonen bei Neutronen-/Gesamtdichteverhältnissen von (von unten nach oben) 0,5, 0,6, 0,7, 0,8, 0,9, 1,0.

Dies verdeutlicht, dass sich kein direkter Zusammenhang zwischen der Kompressibilität und dem Verhalten bei hohen Dichten herstellen lässt.

In Abbildung 8.5 sind Schnitte bei fester Nucleonengesamtdichte dargestellt. Aufgetragen ist jeweils die Bindungsenergie pro Teilchen als Funktion von $(N - Z)/A$. Die Zustandsgleichung stimmt bei Sättigungsdichte in Richtung der Asymmetrie bei allen Kräften nahezu exakt überein. Der Grund dafür ist, dass die im Fit enthaltenen Kerne bzw. Observablen diese Abhängigkeit am stärksten festlegen. In Kernmaterie verschwinden zusätzlich dazu die räumlichen Ableitungen der Mesonenfelder, so dass die funktionale Abhängigkeit des isovektoriellen-vektoriellen Potentials von der Isovektor-Vektor Dichte in beiden Modellen identisch ist:

$$V_{TV} \propto \rho_{TV}. \quad (8.11)$$

Unterschiede ergeben sich bei geringeren und höheren Dichten. Obwohl die Krümmungen der Kurven weitestgehend identisch sind, ergeben sich doch, besonders im Bereich symmetrischer Kernma-

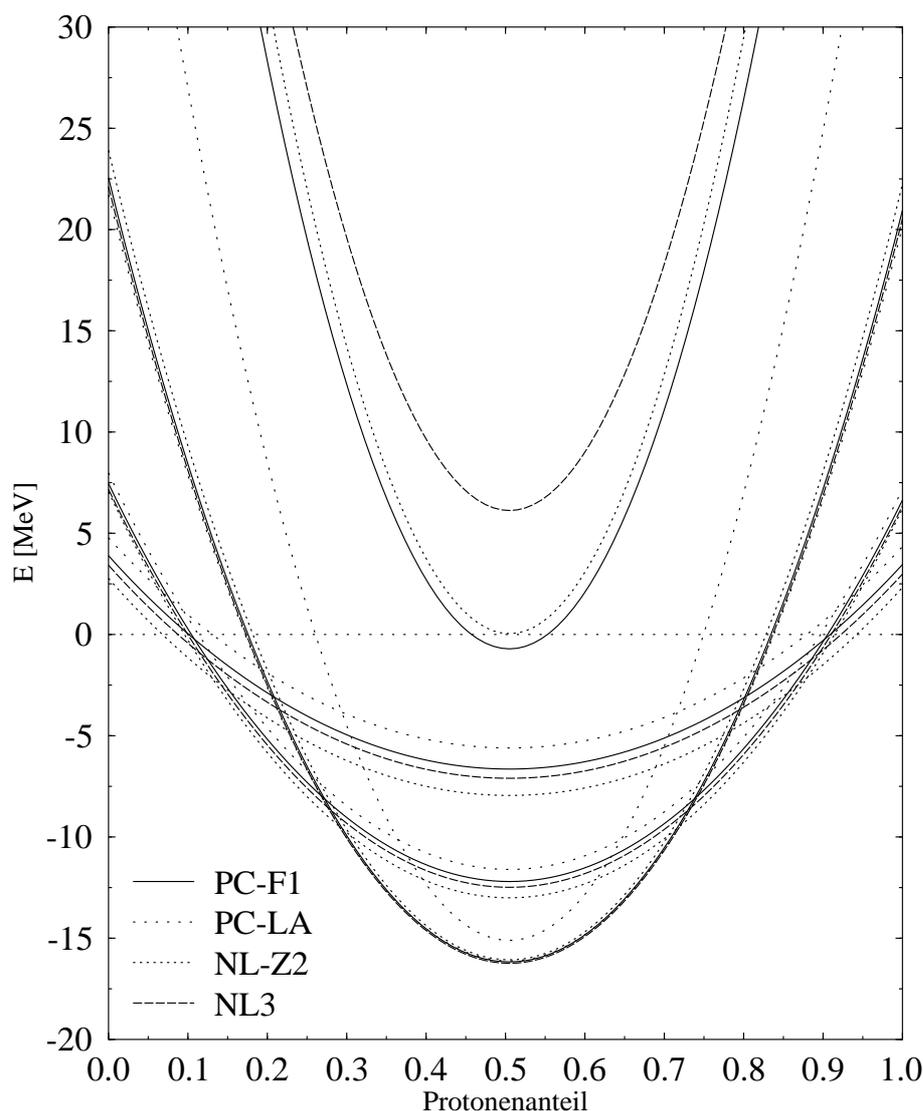


Abbildung 8.5: Die Bindungsenergie als Funktion des Neutron-/Gesamtdichte-Verhältnisses bei jeweiliger Sättigungsdichte der Kräfte und halber, viertel und doppelter Sättigungsdichte von PC-F1 und NL-Z2 (von unten nach oben).

terie, Differenzen im Betrag der Bindungsenergie. Der große Wert von ≈ 15 MeV bei PC-LA für doppelte Sättigungsdichte rührt von dem zweiten Minimum in seiner Zustandsgleichung. Diese Resultate zeigen, dass zur genaueren Bestimmung der Dichteabhängigkeit der Zustandsgleichung Kerne mit großem Isospin (exotische Kerne) bzw. Daten von Neutronenmaterie benötigt werden. Erst dann können auch zusätzliche Freiheiten im isovektoriellen Kanal der effektiven Wechselwirkung adjustiert werden⁶.

⁶Dies haben wir bereits bei der Diskussion der Kräfte PC-F2 bis PC-F4 gesehen.

8.5 Energetische Observablen

Die experimentell am genauesten vermessene Observable von Atomkernen ist ihre Masse und damit auch ihre Bindungsenergie. Die experimentellen Fehler sind von der Größenordnung einiger keV und somit weit geringer als die Präzision, die man von den Mean-Field-Modellen fordern kann. Aus diesem Grund wird den Modellen bei der Anpassung der Kopplungskonstanten eine deutlich größere Fehlertoleranz zugewiesen, sie ist in unserem Fall 0.2% des experimentellen Wertes.

8.5.1 Sphärische Rechnungen

Die Rechnungen in sphärischer Symmetrie, die in diesem Abschnitt diskutiert werden sollen, betreffen einfach- oder doppelt-magische Kerne, bei denen ein sphärischer Grundzustand wahrscheinlich oder experimentell bekannt ist. Das Vorhandensein einer magischen Zahl garantiert im Allgemeinen nicht die sphärische Form. Dies ist in den Rechnungen ein Effekt der Selbstkonsistenz: Protonen und Neutronen beeinflussen sich gegenseitig, wodurch die nichtmagische Nukleonensorte den Kern zu einer endlichen Deformationen treiben kann (oder umgekehrt die magische Nukleonensorte die Sphärizität des Kerns gewährleistet). Die experimentellen Daten stammen aus [Aud95]. Abb. 8.6

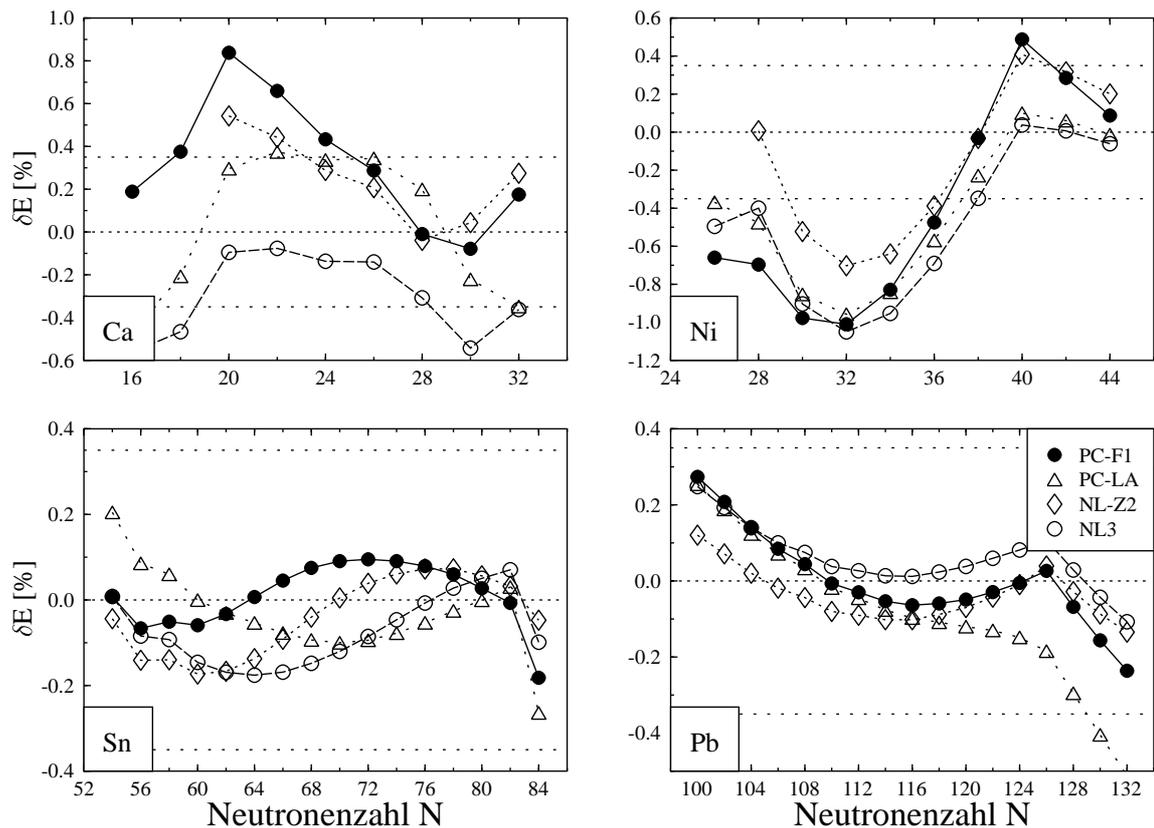


Abbildung 8.6: Relative Fehler der berechneten Bindungsenergien zu den experimentellen Werten für Isotopenketten aus Rechnungen in sphärischer Symmetrie.

zeigt verschiedene Isotopenketten und den prozentualen Fehler der Bindungsenergie E gemäß

$$\delta E = \frac{E_{\text{mf}} - E_{\text{expt.}}}{E_{\text{expt.}}} \quad (8.12)$$

Global betrachtet, liegen alle Kräfte für die meisten Kerne innerhalb eines Fehlers von 0.4% (oftmals ist er noch kleiner und entspricht der von den Fitkernen geforderten Genauigkeit). Die einzelnen Kräfte haben mehr Probleme bei der Beschreibung von leichten Kerne. Der Grund dafür ist, dass der Effekt von Grundzustandskorrelationen, der durch die Näherung unabhängiger Teilchen (bzw. von Quasiteilchen im BCS-Formalismus) vernachlässigt wird, bei kleineren Kernen stärker zu Buche schlägt als bei schweren Kernen, wo das Bild eines mittleren Potentials angemessener erscheint.

Die Fehler in den Bindungsenergien sind im Allgemeinen in den betrachteten Ketten nicht konstant sondern hängen von der jeweils anderen Nukleonenzahl ab: hier äußern sich Fehler im isovektoriellen Kanal der Modelle.

Eine weitere interessante Beobachtung lässt sich an den Zinn-Isotopen machen. Der qualitative Verlauf der Fehlerkurve ist bei PC-F1 und NL-Z2 sowie NL3 und PC-LA ähnlich. Der Grund dafür ist, dass bei PC-F1 und NL-Z2 fünf Zinn-Isotope im Fit berücksichtigt wurden, während bei NL3 drei und bei PC-LA kein einziger Zinn-Kern Verwendung fanden. Die Krümmung der Kurve ist ein Resultat der Vernachlässigung von Grundzustandskorrelationen [ReiPR]. Die Spitzen in den Kurven zeigen eine Überschätzung der Schaleneffekte. Man sieht hier sehr deutlich, wie die Fitstrategie, genauer, die Auswahl an Kernen und Observablen, das Verhalten des Modells beeinflusst. Die beiden Kräfte PC-F1 und NL-Z2 sind auch jene, die bei den Zinn-Isotopen sowie fast allen betrachteten Kernen die geringsten Fehler aufweisen. Die Verbesserung eines Modells kann also immer auf mindestens zwei Arten geschehen, die stark miteinander wechselwirken:

- Einführung/Modifikation von Termen und
- Modifikation/Erweiterung der Fitstrategie.

Die Fehler in den Isotonenkettens (siehe Abbildung 8.7) sind insgesamt größer als bei den Isotopen. Bei ersteren ist die Balance zwischen Coulomb-Energie und Symmetrieenergie besonders entscheidend. Die größeren Fehler und das Verhalten aller Kräfte zeigen, dass das RMF-FR/PC Modell hier noch eine Schwäche hat, die noch nicht genau verstanden ist. Die etwas schlechteren Ergebnisse von PC-F1 im Vergleich zu NL-Z2 zeigen, dass diese Schwäche im Punktkopplungsmodell stärkere Auswirkungen zeigt⁷.

Systematische Untersuchungen zu den Parametern im Isovektor-Kanal der effektiven Wechselwirkung können vielleicht darüber Aufschluß geben, warum z. B. der Asymmetrie-Koeffizient deutlich größer ist als der des Liquid-Drop-Modells und der von den meisten Skyrme-Kräften. Zusätzliche Terme in diesem Kanal führen jedoch, wie wir oben bereits gesehen haben, bei Beibehaltung der Fitstrategie zu keiner nennenswerten Verbesserung des Modells. Die Größenordnung der Fehler (in fast allen Fällen kleiner als 1%) zeigt aber, daß die Modelle diese Observable mit einer akzeptablen Genauigkeit beschreiben.

8.5.2 Deformierte Rechnungen

Wir werfen einen Blick auf Bindungsenergien für die schwersten gg-Kerne, bei denen die Masse experimentell bekannt ist. Wir betrachten speziell die Kerne mit Protonenzahlen $Z = 98 - 108$. Diese Kerne, die stark prolat deformiert sind (für Nobelium wurde experimentell eine Grundzustandsdeformation von $\beta_2 = 0.27 \pm 0.02$ [Rei99, Lei99] ermittelt), erfordern axialsymmetrische Rechnungen (für die Kerne werden reflektionsymmetrische Formen angenommen).

In Abb. 8.8 sind die Abweichungen der Bindungsenergien von den experimentellen Werten in Prozent angegeben. Weiterhin sind die Grundzustandsdeformationen eingezeichnet. Die Abweichungen

⁷Hier könnte eine genaue Untersuchung der Coulomb-Kraft in RMF-Modellen nützlich sein. Im Gegensatz zu SHF-Modellen wird der Austauschterm nicht berücksichtigt.

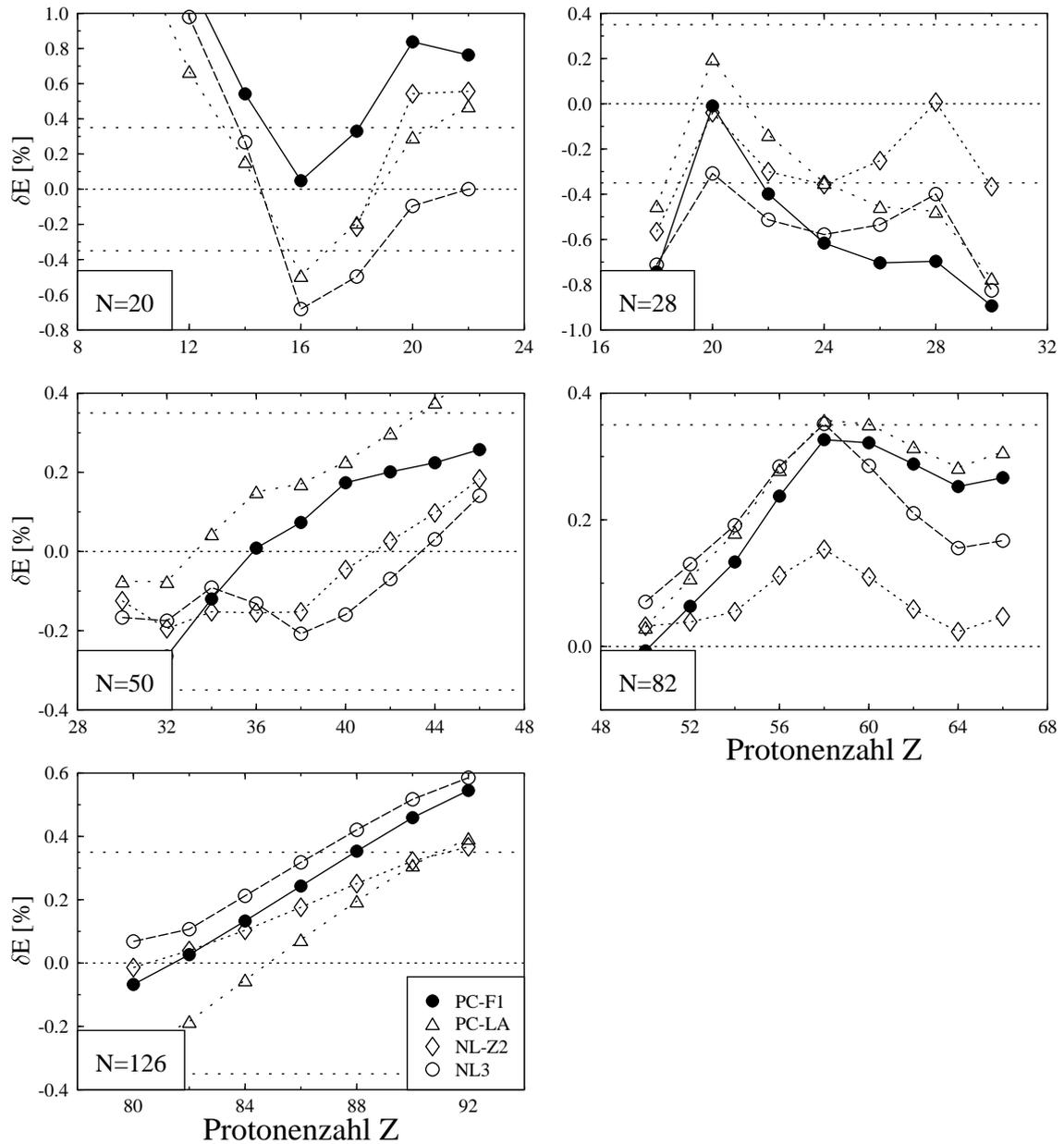


Abbildung 8.7: Relative Fehler der berechneten Bindungsenergien zu den experimentellen Werten für Isotonenketten aus Rechnungen in sphärischer Symmetrie.

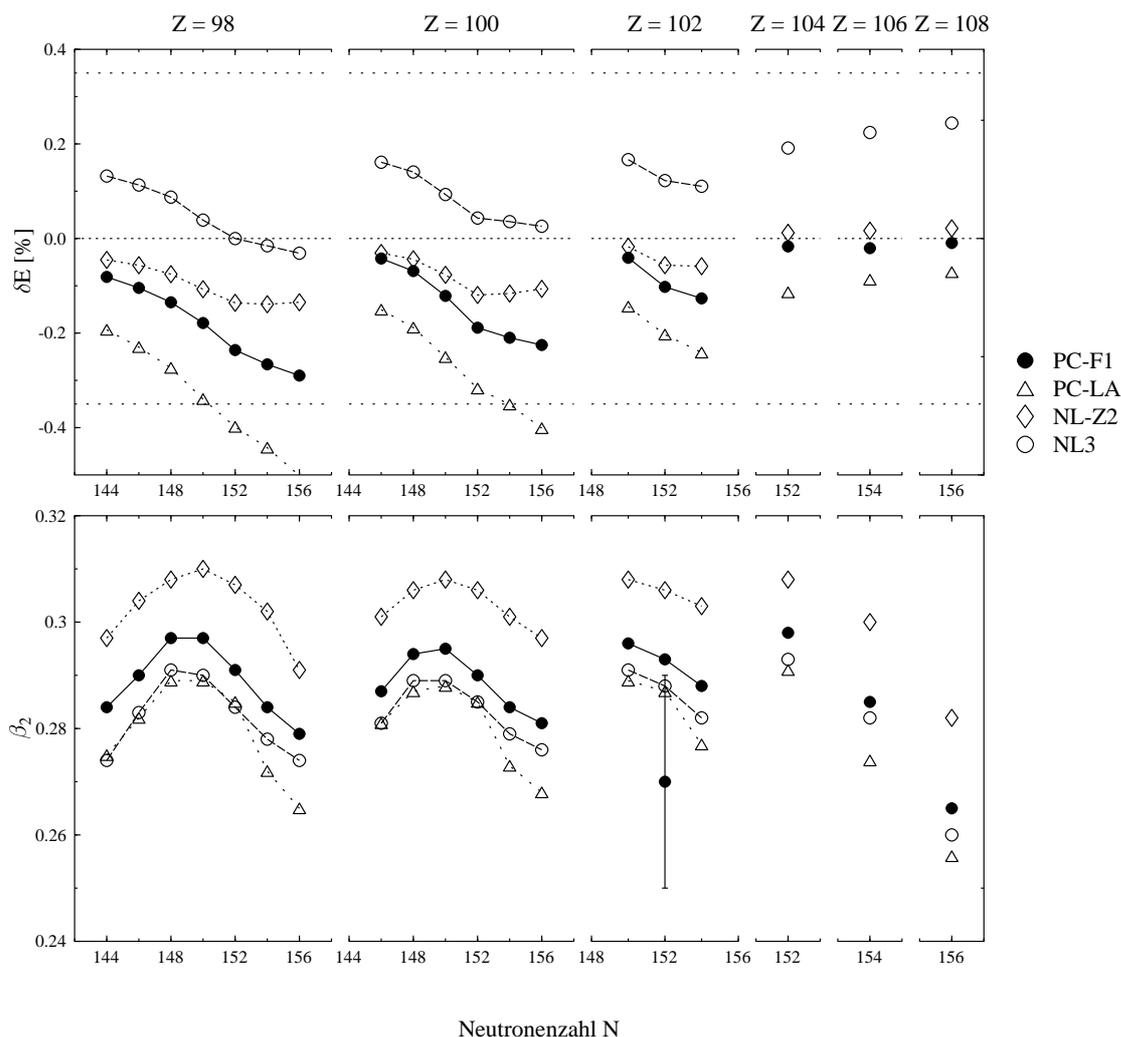


Abbildung 8.8: Relative Abweichungen von berechneten Bindungsenergien zu den experimentellen Werten (oben) und Grundzustandsdeformationen der Kerne (unten).

sind in der gleichen Größenordnung wie die der leichteren Kerne, was ein ausgezeichnetes Resultat darstellt (wir sind mindestens 26 Ladungszahlen entfernt von den schwersten Kernen, den Blei-Isotope, die Bestandteil der Fitprozedur sind). Im Detail ergeben sich wieder Unterschiede zwischen den Kräften, die sich im wesentlichen in den Steigungen der Kurven äußern. Dies sind Auswirkungen der Mängel der Modelle im isovektoriellen Kanal. Interessanterweise sind die Kerne nur mit der RMF-FR-Kraft NL3 für die kleineren Neutronenzahlen überbunden, während die anderen Kräfte zu kleine Bindungsenergien vorhersagen. Die Kraft PC-F1 zeigt trotz identischer Fitstrategie nicht so gute Ergebnisse wie die Kraft NL-Z2. Diesen Befund konnten wir bereits an den leichteren Kernen festmachen. Der Grund dafür, der in den unterschiedlichen Parametrisierungen der effektiven Wechselwirkung liegen muss, bedarf noch eines genauen Studiums.

NL-Z2 beschreibt systematisch größere Deformationen als die anderen drei Mean-Field-Kräfte. Hier gibt es einen Zusammenhang zur Oberflächenenergie von NL-Z2. Sie ist niedriger als die von NL3 [Rut99].

Das Symbol mit Fehlerbalken für den Kern ^{254}No bezeichnet die gemessene Grundzustandsdeformation sowie die experimentelle Unsicherheit. Alle Kräfte überschätzen diesen Wert, wobei die

Vorhersagen von NL3 und PC-LA noch innerhalb des experimentellen Fehlers liegen. Der maximale Fehler in den Vorhersagen ist 13% für die Kraft NL-Z2, was noch akzeptabel ist.

8.6 Observablen der Schalenstruktur

8.6.1 Separationsenergien

Im Folgenden wollen wir für Isotopen- und Isotonenkettens die Vorhersagen der Modelle für Zwei-Protonen- und Zwei-Neutronen-Separationsenergien untersuchen. Wir zeigen sie hier für sphärische Rechnungen von Ketten aus Isotopen und Isotonen (siehe Abbildungen 8.9 und 8.10). Der Ver-

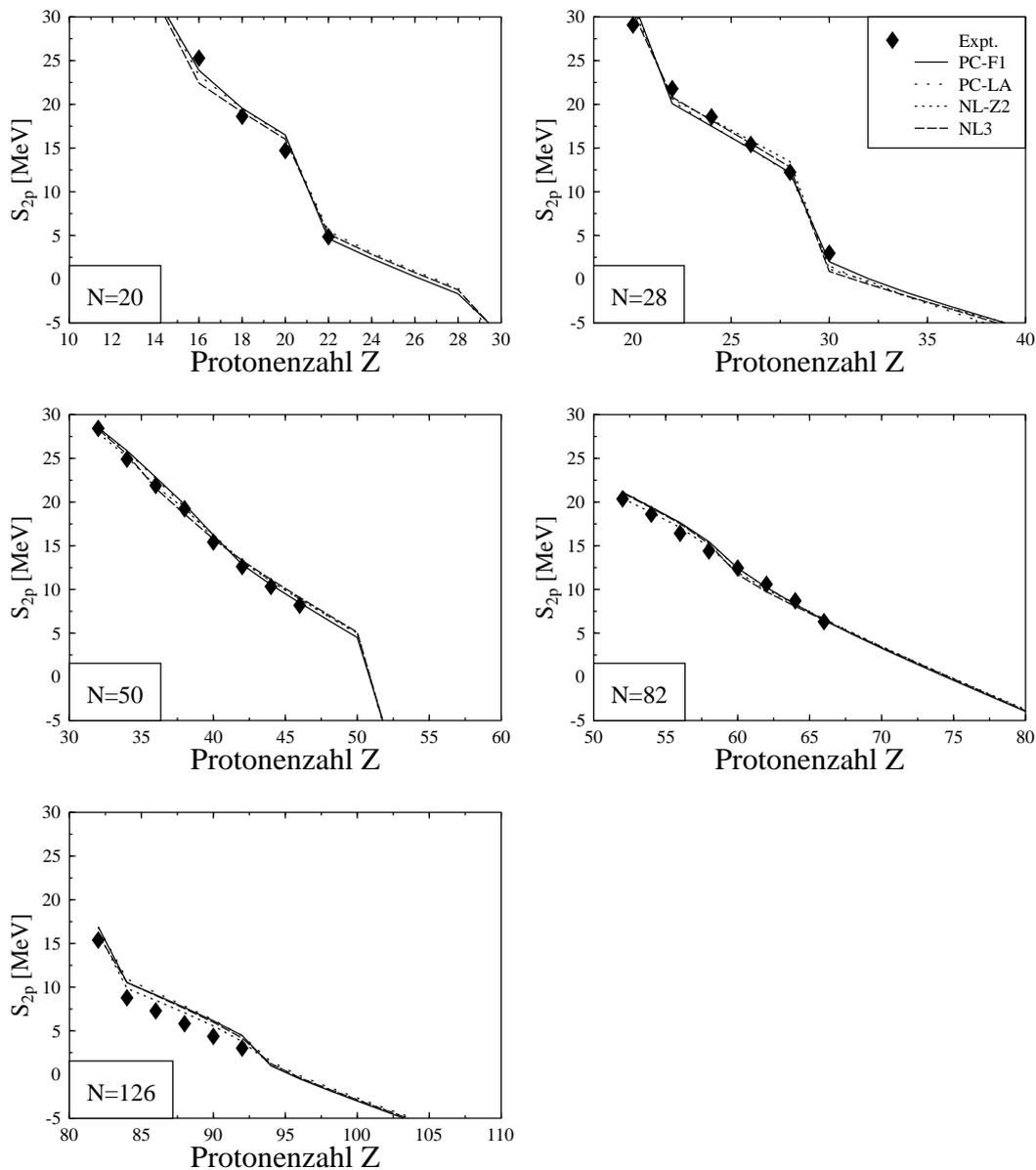


Abbildung 8.9: 2-Protonen Separationsenergien für die angegebenen Isotopenketten.

lauf der Kurven ist für alle Kräfte ähnlich. Der Sprung der Zwei-Neutronen-Separationsenergien

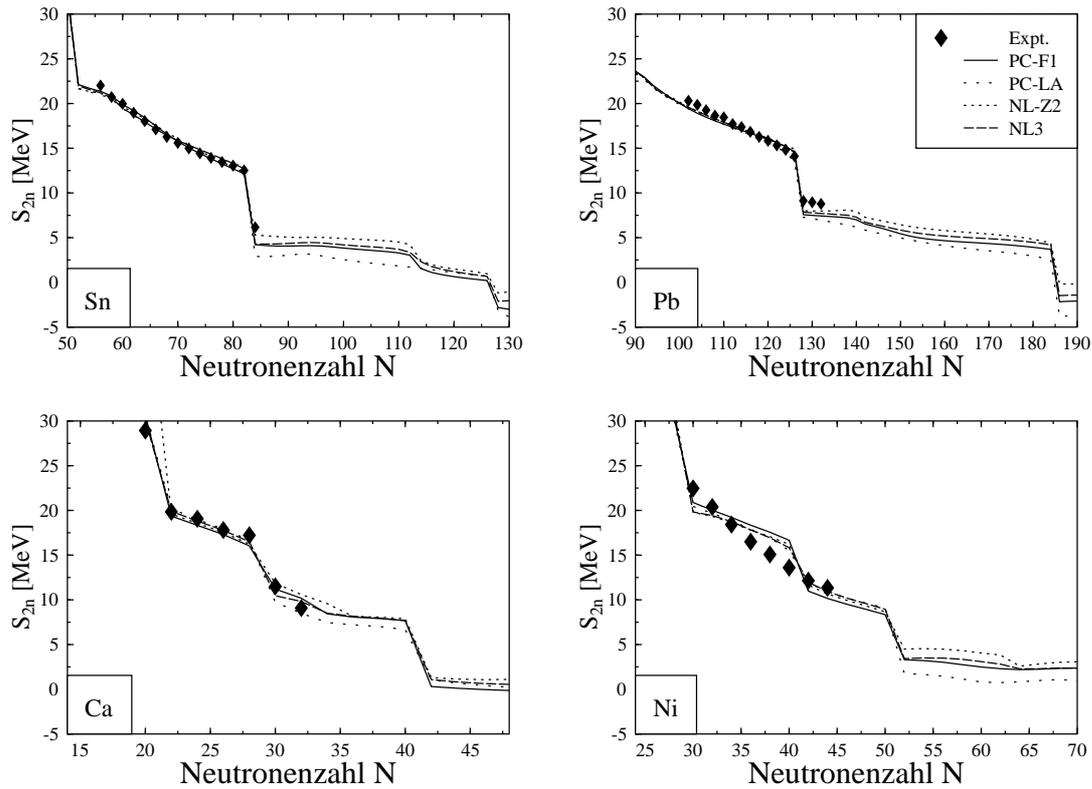


Abbildung 8.10: 2-Neutronen Separationsenergien für die angegebenen Isotonenketten.

beim Überschreiten von Schalenabschlüssen wird von der Punktkopplungskraft PC-LA am stärksten überschätzt. Die Kraft NL-Z2 liegt den Daten in den meisten Fällen am nächsten. Alle Kräfte zeigen die Tendenz zu zu großen Sprüngen in den Separationsenergien. Es ist zu erwarten, dass dieser Effekt zu einem großen Teil durch die Berücksichtigung von Grundzustandskorrelationen kuriert werden kann.

Bei den Kalzium- und Nickel-Isotopen ist ein deutlicher Abfall der Separationsenergien bei der Neutronenzahl $N = 40$ zu sehen, der sich nicht in den experimentellen Daten manifestiert. Dieser Effekt findet seinen Grund vermutlich in den fehlenden Grundzustandskorrelationen der Modelle, z.B. besitzen die Kerne ^{66}Ni und ^{70}Ni sehr weiche Potenziellflächen, so dass eine Beimischung von Vibrationszuständen einen großen Einfluss haben kann. Insbesondere bei den Nickelisotopen fächern die Fehler unter den verschiedenen Kräften nach dem Schalenabschluß bei $N = 50$ sehr stark auf.

Interessanterweise erkennen wir in den Blei-Isotopen bei $N = 184$ einen Sprung in den Separationsenergien. Diese magische Neutronenzahl taucht bei den überschweren Elementen für Protonenzahlen kleiner als $Z = 120$ auf⁸ (siehe dazu das kommende Kapitel 9). Dieser Schalenabschluß zeichnet sich also bereits ansatzweise bei den bekannten Kernen ab. Allerdings ist er hier mit der Zwei-Neutronen-Dripline gekoppelt.

Die Separationsenergien in der $N = 126$ Isotonenkette werden deutlich und systematisch von allen Kräften überschätzt. Das korrespondiert mit den systematischen Fehlern in den Bindungsenergien der $N = 126$ Isotonenkette.

Zwei-Nukleonen-Separationsenergien werden von den getesteten Modellen in den meisten Fällen zufriedenstellend beschrieben, sie tendieren zum Überschätzen der Sprünge der Separationsenergien an

⁸Zu $Z = 120$ korrespondiert die magische Neutronenzahl $N = 172$.

Schalenabschlüssen. Es lässt sich kein systematischer Unterschied zwischen dem RMF-FR- und dem RMF-PC-Modell erkennen.

8.6.2 Spin-Bahn-Aufspaltungen

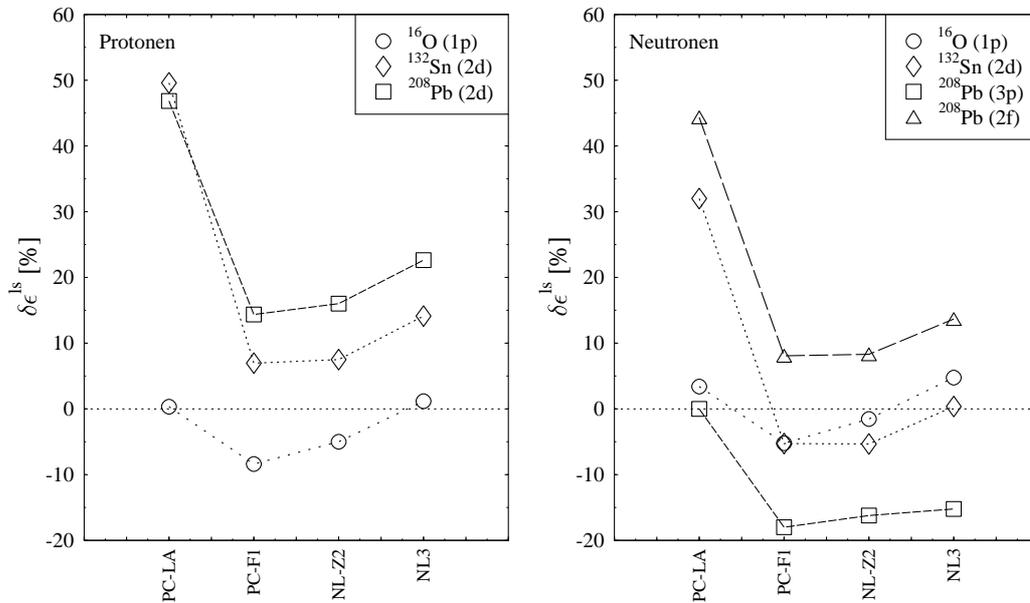


Abbildung 8.11: Prozentuale Abweichungen der Spin-Bahn-Aufspaltungen von den experimentellen Werten für drei Protonenzustände (links) und vier Neutronenzustände (rechts).

Eine wichtige Observable, die mit der Schalenstruktur der Kerne zusammenhängt, ist die Aufspaltung von Energieniveaus aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Diese ist bei relativistischen Modellen intrinsischer Bestandteil des Formalismus, während sie in der SHF-Methode von Hand und unter Einführung eines oder mehrerer Parameter hinzugefügt werden muss. Es ist aus mehreren Gründen interessant, diese Observable zu untersuchen. Einerseits ist das Spin-Bahn-Potenzial an der Kernoberfläche gepeakt, d.h. in einem Bereich großer Steigungen in der Dichte. Hier kann getestet werden, ob die Gradiententerme im Punktkopplungsmodell diesem Verhalten ausreichend Rechnung tragen. Andererseits kann im Vergleich RMF-FR zu RMF-PC untersucht werden, ob endliche Reichweite (oder formaler ausgedrückt, eine Faltung der Dichten) für eine erfolgreiche Spin-Bahn-Wechselwirkung notwendig ist und wie sensitiv die konkrete Dichteabhängigkeit des Modells in Bezug auf diese Observable ist. Um diesen Fragen nachzugehen, betrachten wir für drei Kerne Vorhersagen und experimentelle Daten für drei Protonenzustände und vier Neutronenzustände in Abb. 8.11. Diese Zustände haben sich in früheren Untersuchungen [Rut99] als stabil gegenüber Polarisationsseffekten erwiesen.

Wir sehen sofort, dass sich die drei Kräfte PC-F1, NL3 und NL-Z2, mit geringen Unterschieden im Detail, sehr ähnlich verhalten: sie erlauben eine Beschreibung der experimentellen Daten innerhalb von ca. 20%. Aus der Reihe fällt die Kraft PC-LA. Bei ihr sind die Fehler oftmals mehr als doppelt so groß. Die Kraft PC-F1 stellt in dieser Hinsicht eine Verbesserung dar. Der Grund für dieses Verhalten wurde bereits im Abschnitt *Kernmaterie* erwähnt und wird mit Abbildung 8.12 verdeutlicht. Das Verhalten der Mean-Field-Potenziale (und damit auch der effektiven Masse) in Abhängigkeit von der Nukleonendichte unterscheidet sich für PC-LA deutlich von den anderen Kräften: die effektive Masse nimmt als Funktion der Dichte für größere Dichten langsamer zu. Daraus resultiert ein Spin-Bahn-

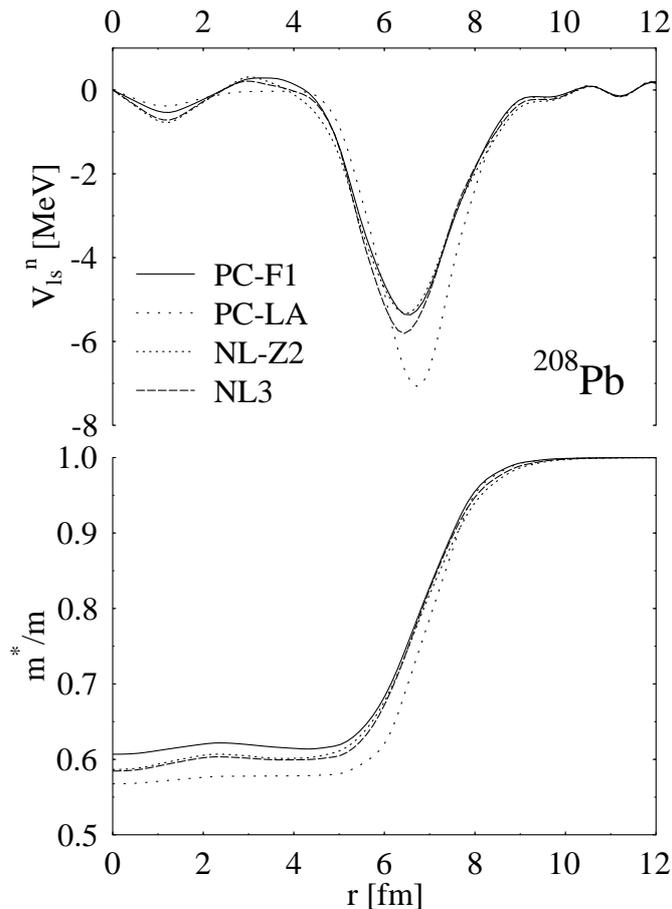


Abbildung 8.12: Das Spin-Bahn Potenzial (oben) und die effektive Masse (unten) der Neutronen im Kern ^{208}Pb für vier RMF Kräfte.

Potenzial, das bei größeren Radien gepeakt und tiefer ist. Die anderen drei Kräfte stimmen exakt überein bezüglich des Peak-Radius, kleine Unterschiede ergeben sich nur in der Tiefe.

Offensichtlich ist für die akkurate Beschreibung von Spin-Bahn-Aufspaltungen die Dichteabhängigkeit des Modells essentiell. Wir können daraus folgern, dass für eine zufriedenstellende Beschreibung von Spin-Bahn-Aufspaltungen in relativistischen Mean-Field-Modellen nicht die Reichweite entscheidend ist, sondern die Parametrisierung der mittleren Potenziale als Funktion der Dichte.

Dies ist auch wichtig in Hinblick auf die Untersuchungen von Spin-Bahn-Aufspaltungen mit Skyrme-Kräften [Ben97, Rut99]. Die Kräfte SkI3 und SkI4 mit gegenüber Standard-Skyrme-Kräften erweiterten bzw. modifizierten Spin-Bahn-Termen sowie die Standard-Kraft SkM* produzieren deutlich größere Fehler (bis zu 80% für den 2d-Protonen-Zustand in ^{132}Sn mit der Kraft SkI4). Daraus ist ersichtlich, dass die Parametrisierungen des RMF-Modells in dieser Hinsicht den untersuchten Skyrme-Kräften überlegen sind. Offensichtlich eignet sich der relativistische Formalismus und seine intrinsische Beschreibung des Spinfreiheitsgrades von Fermionen besser zur Beschreibung der Spin-Bahn-Aufspaltungen. Hier sind Verbesserungen der Skyrme-Kräfte wünschenswert.

8.6.3 Einteilchenspektren

In diesem Abschnitt werden die Einteilchenspektren von zwei ausgewählten Kernen, ^{132}Sn und ^{208}Pb , betrachtet. Dabei werden die Vorhersagen der einzelnen Modelle untereinander und – soweit möglich

– mit dem Experiment verglichen. Da es sich in beiden Fällen um doppelmagische Kerne handelt, können die Rechnungen in sphärischer Symmetrie ausgeführt werden. In realistischeren Rechnungen müsste der Einfluss von Korrelationen auf die Einteilchenenergien berücksichtigt werden. Wir nehmen hier für den Vergleich der einzelnen Kräfte untereinander an, dass diese bei den hier untersuchten Kräften und Modellen in etwa gleich groß sind. Figur 8.13 zeigt die Einteilchenspektren der Protonen

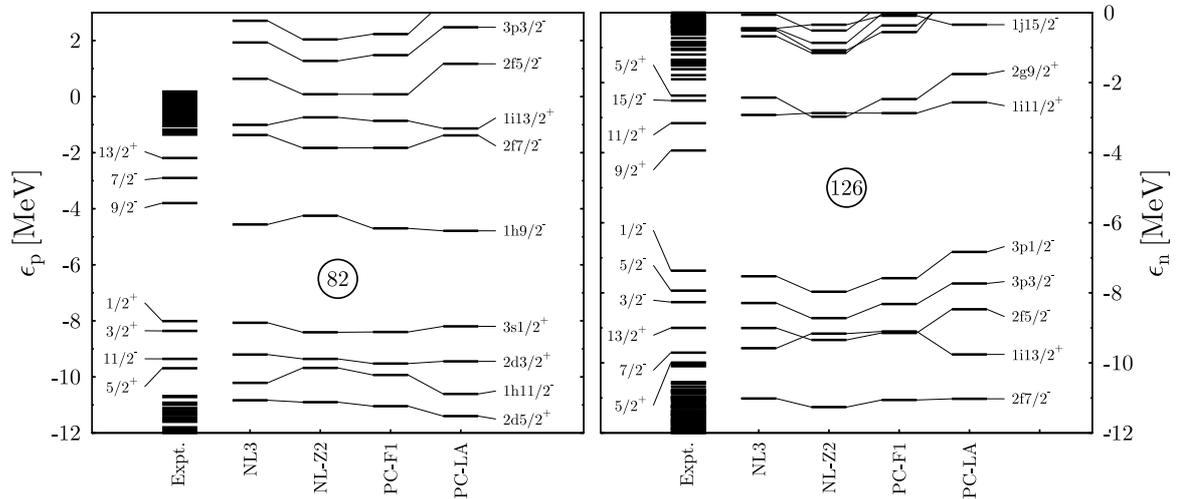


Abbildung 8.13: Einteilchenspektren der Protonen (links) und Neutronen (rechts) von ^{208}Pb für die vier angegebenen Kräfte aus Rechnungen in sphärischer Symmetrie. Zum Vergleich sind die experimentellen Daten mit den zugehörigen Quantenzahlen eingetragen.

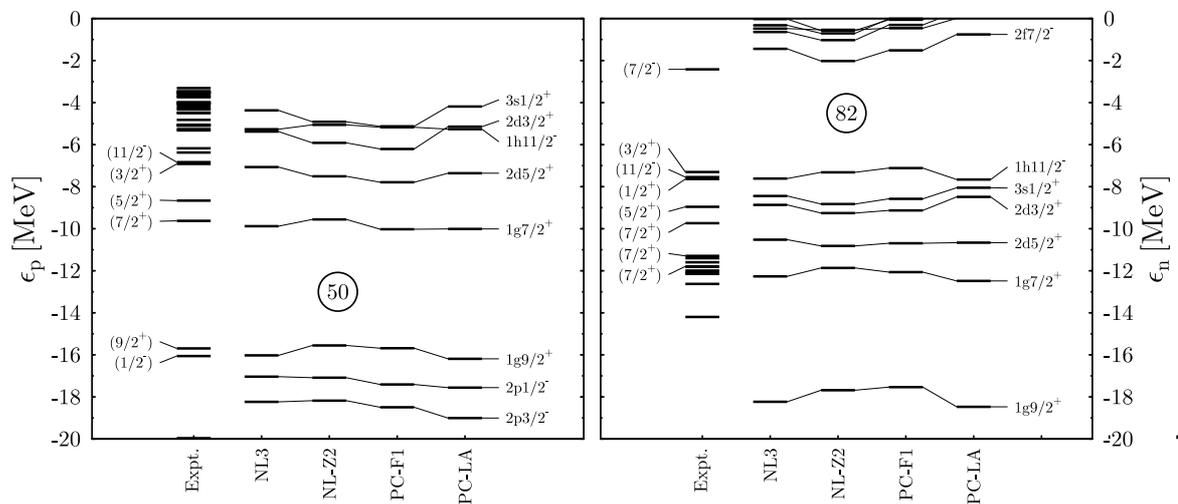


Abbildung 8.14: Einteilchenspektren der Protonen (links) und Neutronen (rechts) von ^{132}Sn für die vier angegebenen Kräfte aus Rechnungen in sphärischer Symmetrie. Zum Vergleich sind die experimentellen Daten mit den zugehörigen Quantenzahlen eingetragen.

und Neutronen sowie – soweit vorhanden – experimentelle Werte zum Vergleich. Obwohl die Niveaureihenfolge der Protonen bei allen Kräften übereinstimmt, ergeben sich Unterschiede in der Größe der Spin-Bahn-Aufspaltungen sowie der relativen Lage einiger Niveaus zueinander. Die Kraft PC-LA liefert, wie man aufgrund obiger Diskussion erwarten kann, die größten Spin-Bahn-Aufspaltungen. Dies erkennt man z.B. an den $2f$ -Teilchen- bzw. den $2d$ -Lochzuständen. Die Aufspaltungen der übrigen

drei Kräfte stimmen gut überein. Die Kräfte NL-Z2 und PC-F1 verhalten sich für einige Niveaus gleich und deutlich anders als die Kräfte NL3 und PC-LA: So sind bei den Protonen die Niveaus $1h11/2^-$ und $1i13/2^-$ energetisch deutlich höher, während die $2f5/2^-$ und $3p3/2^-$ Niveaus entschieden niedriger liegen. Dieses übereinstimmende Verhalten lässt sich wahrscheinlich auf den Einfluss der identischen Fitstrategie zurückführen. Der Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt, dass die Niveaureihenfolge richtig reproduziert wird, dass allerdings die Abstände der Zustände stark überschätzt werden. In dieser Hinsicht stimmt auch die Gruppierung der Niveaus nicht, der $1h9/2^-$ -Zustand liegt im Verhältnis zu den energetisch höheren Zuständen zu niedrig.

Im Neutronenspektrum tauchen grössere Unterschiede auf, die Kraft NL3 sagt z.B. eine falsche Reihenfolge der $i13/2^+$ - und $2f5/2^-$ -Zustände voraus. Bei allen Kräften liegt der $2f5/2^-$ -Zustand im Spektrum zu niedrig. Wie bei den Neutronen werden die Abstände zwischen den einzelnen Zuständen deutlich überschätzt. Bei den Lochzuständen reproduziert NL3 als einzige Kraft die Reihenfolge der $i11/2^+$ - und $2g9/2^+$ -Zustände, die bei NL-Z2 quasi energetisch entartet sind.

In Abbildung 8.14 sind für die vier RMF-Kräfte die Einteilchenniveaus der Protonen und Neutronen des Kerns ^{132}Sn dargestellt. Wo verfügbar sind die experimentellen Daten eingezeichnet. Die Niveaudichte der Einteilchenzustände wird auch hier von allen Kräften überschätzt. Die energetische Entartung der Protonenzustände $3/2^+$ und $11/2^-$ wird nur von den Kräften NL3 und PC-LA reproduziert. Bei den Neutronen stimmen alle Kräfte in Bezug auf die Reihenfolge der einzelnen Zustände überein, die absoluten Energien werden allerdings nicht korrekt wiedergegeben. Insbesondere die energetische Quasientartung der drei Zustände $1/2^+$, $3/2^+$, $11/2^-$ wird von keiner der Mean-Field-Kräfte wiedergegeben. Der $7/2^-$ -Lochzustand wird von den Kräften energetisch zu hoch angesetzt, was zu einem etwas zu grossen Schallengap korrespondiert. Dies unterstützt die Diskussion in Abschnitt 8.6.1, in der wir gesehen haben, dass sich die Überschätzung in den 2-Neutronen-Separationsenergien niederschlägt.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass zum Teil erhebliche Differenzen zwischen den experimentellen Daten und den Ergebnissen der Mean-Field-Rechnungen bestehen. Dies betrifft sowohl die absoluten Energien der Einteilchenzustände als auch ihre Reihenfolge im Spektrum. Im Fall von ug-Kernen kann das dazu führen, dass die Konfiguration mit minimaler Energie nicht den experimentell bekannten Spin des Kerngrundzustandes beinhaltet ([Rut99]).

8.7 Observablen der Dichteverteilung

8.7.1 Radien und Oberflächendicken

Weitere experimentell zugängliche Größen von Atomkernen sind der rms-Radius der Ladungsverteilung, der Diffraktionsradius sowie die Oberflächendicke. Diese sind in Abbildung 8.15 für Zinn-Isotope (links) und in für Blei-Isotope (rechts) dargestellt.

Die rms-Radien der Zinn-Isotope werden von allen Kräften gut beschrieben. Die Kurven verlaufen glatt und ohne sichtbare Schaleneffekte. Bei den Blei-Isotopen fällt NL-Z2 als einzige Kraft aus der Rolle und sagt zu große Radien vorher. Hier ist ein Schaleneffekt bei $N = 126$ sichtbar.

Die Diffraktionsradien werden für beide Isotopenketten von allen Kräften überschätzt, das Punktkopplungsmodell mit PC-F1 liegt in beiden Fällen am dichtesten an den Daten. Bei den Zinn-Isotopen überschätzt die Punktkopplungskraft PC-LA die Radien am meisten, während bei Blei NL-Z2 die größten Fehler aufweist. Bei den Blei-Isotopen ist wieder ein Schaleneffekt bei der Neutronenzahl $N = 126$ zu sehen.

RMF-Modelle tendieren im Allgemeinen zu zu kleinen Oberflächendicken, wenn keine Informationen über sie in den Fit einfließen (siehe z.B. die Kraft NL3). Die Resultate für NL-Z2 und PC-F1 zeigen, dass sich durch das Anpassen von Oberflächendicken eine etwas bessere Beschreibung dieser Observablen erreichen lässt. Die Zinn-Isotope zeigen einen deutlichen Schaleneffekt bei der

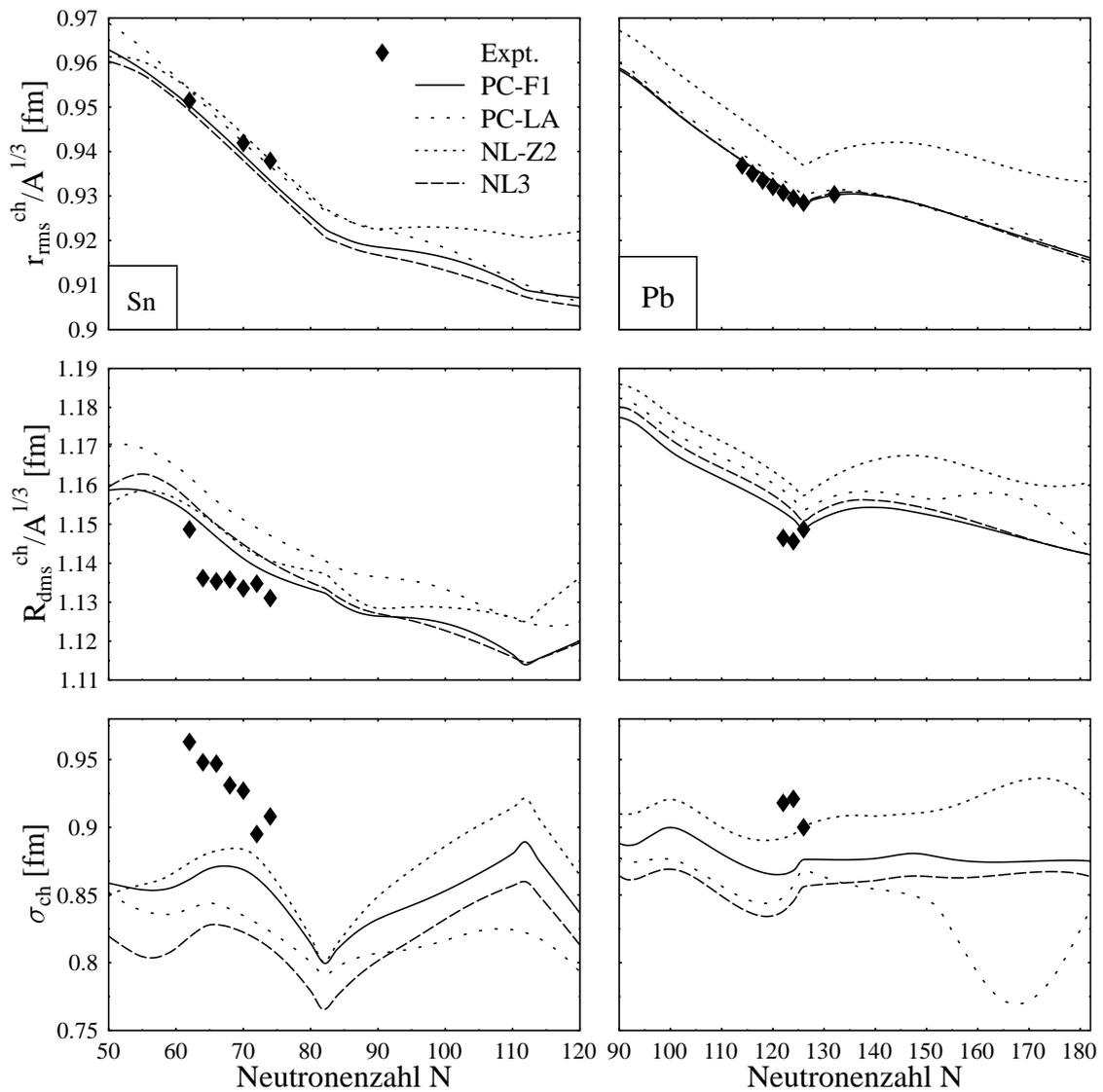


Abbildung 8.15: rms-Radien (oben), Diffraktionsradien (Mitte) und Oberflächendicken (unten) für Zinn- (links) und Blei-Isotope (rechts). Die Radien wurden durch den Term $A^{1/3}$ geteilt, um den Trend mit der Nukleonenzahl herauszunehmen.

magischen Neutronenzahl $N = 82$. Bei den Blei-Isotopen ist der Schaleneffekt mehr ausgewaschen. RMF-PC+PC-LA zeigt ab der Neutronenzahl $N = 150$ einen Trend zu kleineren Oberflächendicken, die ab der Neutronenzahl $N = 170$ wieder ansteigen. Ein Grund dafür kann die Wahl der nichtlinearen Parameter und damit die Art der Dichteparametrisierung sein.

8.7.2 Dichteprofile

In Figur 8.16 betrachten wir für zwei ausgewählte Kerne die vorhergesagten Baryondichten. An

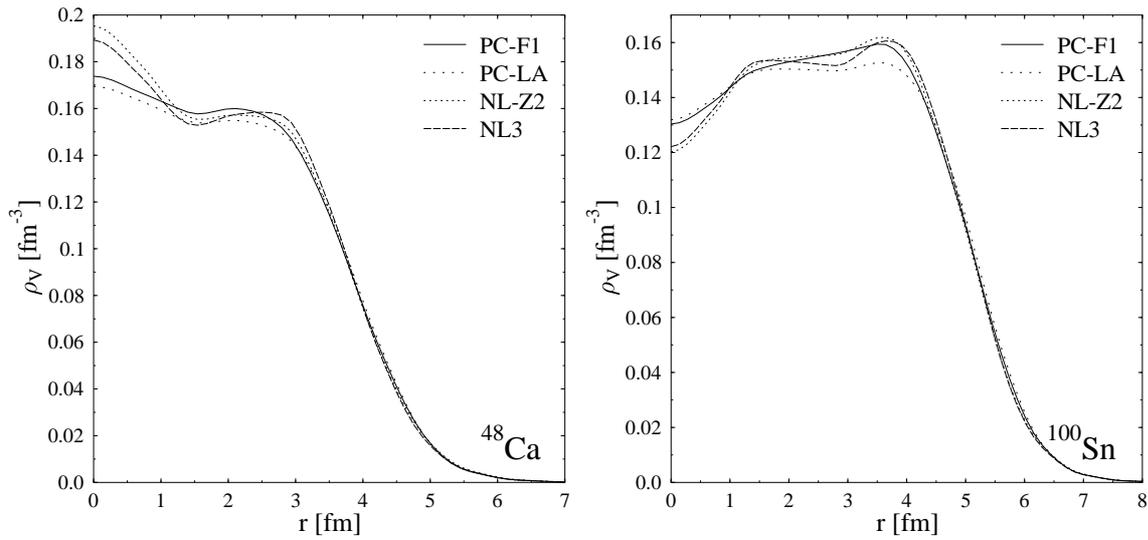


Abbildung 8.16: Baryondichten der Kerne ^{48}Ca und ^{100}Sn aus Rechnungen in sphärischer Symmetrie.

dieser Stelle entdecken wir einen Effekt der kürzeren Reichweite bzw. fehlenden Faltung der Dichten im Punktkopplungsmodell: Die Dichtefluktuationen im Innern der Kerne sind für die RMF-FR-Kräfte stärker ausgeprägt als für die RMF-PC-Kräfte (es sind zwei Gruppen zu unterscheiden). Grund dafür ist die fehlende Faltung. Die mittleren Potenziale bzw. Felder müssen eine weiche Funktion der Dichte sein. Im Punktkopplungsmodell kann dies analog zu Hartree-Fock mit Skyrme-Kräften nur durch weiche Dichten erreicht werden. Im RMF-FR können Fluktuationen in der Dichte durch die Faltungen geglättet und ausgeschmiert werden. Die Größe der Fluktuationen von ca. 1 – 2 fm entspricht gerade der Reichweite der effektiven Mesonen des RMF-FR-Modells. Die Betrachtung dieser Observablen und der Vergleich mit gemessenen Formfaktoren kann helfen zu entscheiden, welcher der beiden RMF-Varianten in dieser Hinsicht der Vorzug zu geben ist. Aber gerade diese Schalenoszillationen werden stark durch Grundzustandskorrelationen beeinflusst. Sie müssen erst besser verstanden werden, bevor eine Entscheidung über die Bedeutung von endlicher Reichweite getroffen werden kann.

8.8 Deformationseigenschaften

8.8.1 Deformationsenergien von Magnesium-Isotopen

Um die Deformationseigenschaften des Punktkopplungsmodells mit denen der RMF-Modelle mit Mesonenaustausch vergleichen zu können, betrachten wir die Potenzialenergieflächen von Magnesium-Isotopen. Die Rechnungen sind in axialer Symmetrie durchgeführt unter Einhaltung der Reflexionssymmetrie. Sie sind für die vier in dieser Arbeit berücksichtigten RMF-Kräfte in Abb. 8.17 zu sehen.

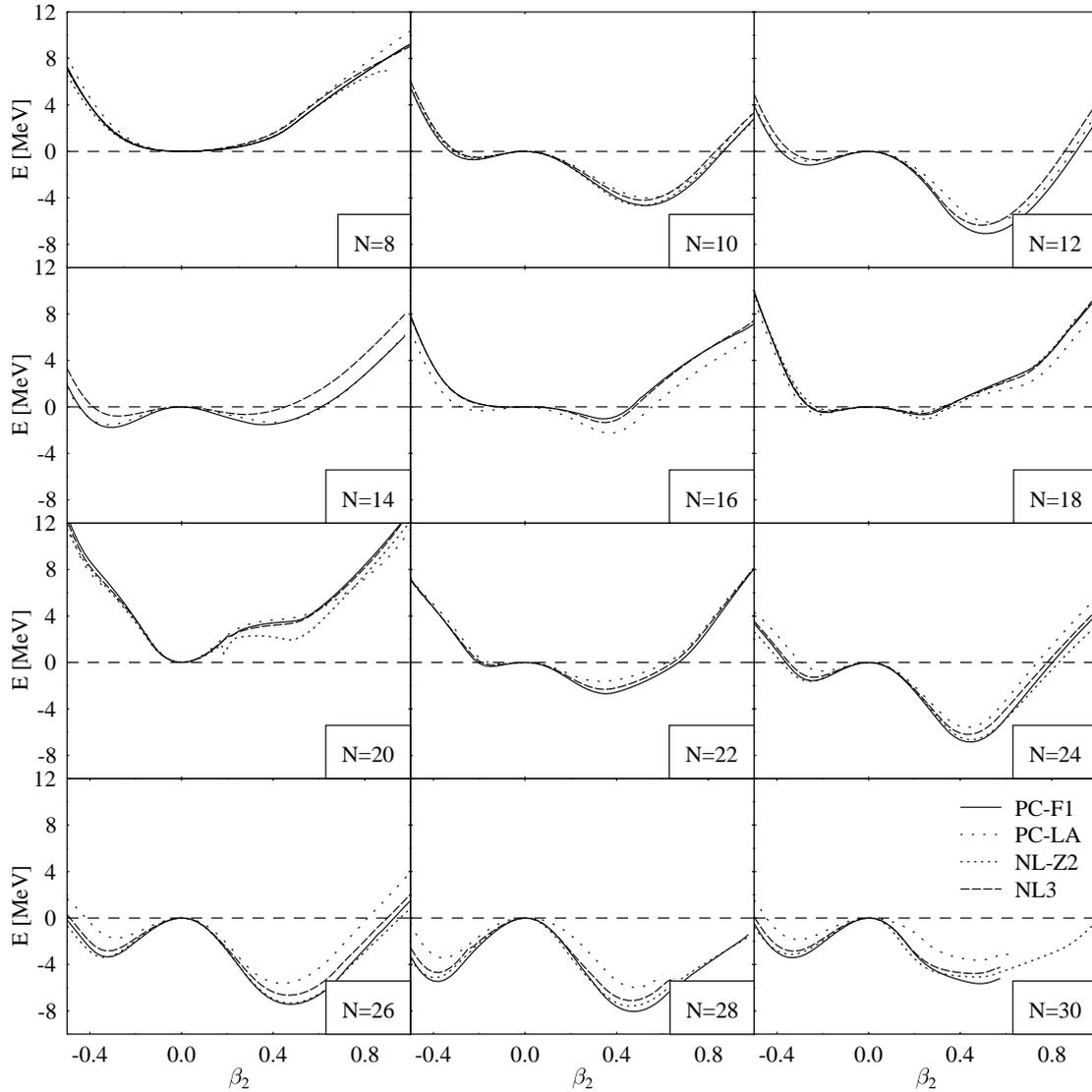


Abbildung 8.17: Potenzialenergieflächen für Magnesium-Isotope, gerechnet in axialer Symmetrie für reflektions-symmetrische Kernformen. Die Kurven sind jeweils auf die Energie des sphärischen Punktes normiert.

Die Vorhersagen der unterschiedlichen Parametrisierungen unterscheiden sich nur im Detail. Alle Kräfte sagen für die magischen Magnesium-Isotope ($N = 8$ bzw. $N = 20$) sphärische Kerne voraus, wobei aber besonders im Falle $N = 8$ die Potenzialenergiefläche sehr weich ist, so dass die kollektive Wellenfunktion des Kerns über einen weiten Deformationsbereich ausgeschmiert sein wird. In den wenigsten Fällen existieren deutlich ausgebildete prolate oder oblate Minima, und es ist zu vermuten, dass die Potenzialenergieflächen auch weich bezüglich triaxialer Freiheitsgrade sind. In den meisten Fällen wird der Kern aufgrund der Nullpunktsenergie nicht in einem der flachen Minima lokalisiert sein. Wie in [Ben97] gezeigt wird, wird der Grad der Ausprägung der Minima auch deutlich durch die Wahl des Pairing-Rezeptes beeinflusst. Im Gegensatz zu dichteabhängigem δ -Kraft-Pairing bzw. *Lipkin-Nogami*-Pairing [Lip60, Lip61, Nog65] produziert das δ -Kraft Pairing die tiefsten Minima.

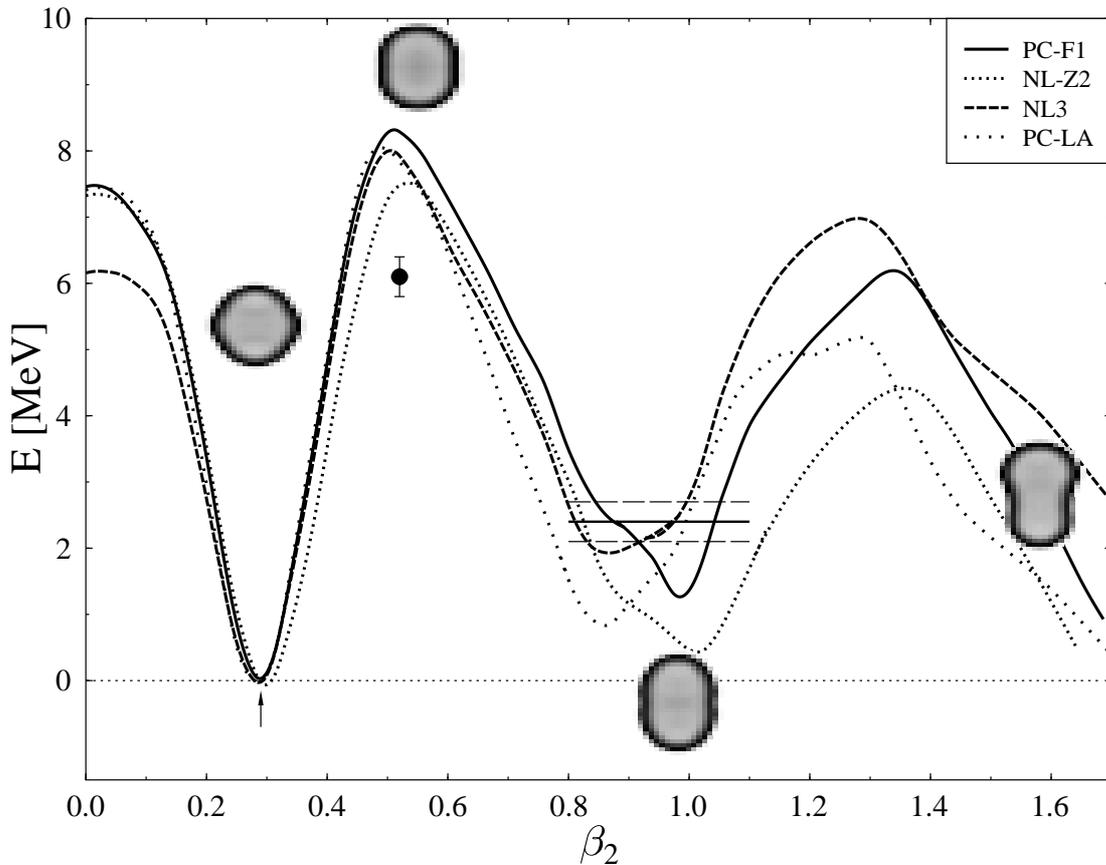


Abbildung 8.18: Die Spaltbarriere von ^{240}Pu in axialsymmetrischen und reflektionsasymmetrischen Rechnungen für die angegebenen Kräfte.

8.8.2 Die Spaltbarriere von ^{240}Pu

Zur Untersuchung der Deformationseigenschaften des Modells für schwere Kerne ist es hilfreich, die Spaltbarriere von ^{240}Pu zu betrachten (Abb. 8.18). Die Kräfte stimmen bezüglich der experimentellen Grundzustandsdeformation des Kerns exakt überein. Die erste Barriere wird mit ca. 1 – 2 MeV überschätzt. Untersuchungen [Rut99] haben gezeigt, dass die Berücksichtigung triaxialer Kernformen die Barriere noch um etwa diesen Betrag vermindert. Eine zusätzliche Verminderung entsteht durch die Berücksichtigung der Nullpunktsenergien [Rei79].

Hinter der ersten Barriere treten reflektionsasymmetrische Kernformen auf. Alle Kräfte reproduzieren die doppelhöckrige Spaltbarriere. Große Unterschiede gibt es bezüglich der Energie des isomeren Zustands sowie dessen Deformation und auch bezüglich der Struktur der Potenzialenergiefläche an dieser Stelle, die sich auf kollektive Anregungen in diesem Minimum auswirkt [Fle01]. Die Energie des isomeren Minimums wird von allen Kräften unterschätzt. Besonders NL-Z2 produziert eine deutlich zu geringe Energie. Das hängt mit der Oberflächenenergie der Kräfte zusammen: Kräfte mit höherer Oberflächenspannung sagen eine höhere Energie für das isomere Minimum vorher. Nullpunktsenergien der Vibration können die Vorhersage von NL3 noch knapp an die experimentellen Daten bringen, aber die anderen Kräfte unterschätzen die energetische Lage des Isomers deutlich.

Die Parametrisierung der Dichteabhängigkeit des Punktkopplungsmodells erweist sich demnach als geeignet für die Beschreibung deformierter Kerne und von Spaltbarrieren.

8.8.3 Grundzustandsdeformationen leichter und schwerer Kerne

Die von T. Cornelius im Rahmen seiner Diplomarbeit durchgeführten Rechnungen zur Frage nach der Existenz des *shell quenching* in Zinn- und Blei-Isotopen wurden von ihm für die Kraft PC-F1 wiederholt und sollen hier dokumentiert werden. Eine ausführliche Diskussion der Ergebnisse der übrigen Mean-Field-Kräfte findet sich in [Cor00]. Die Abbildungen 8.19 und 8.20 zeigen den Ver-

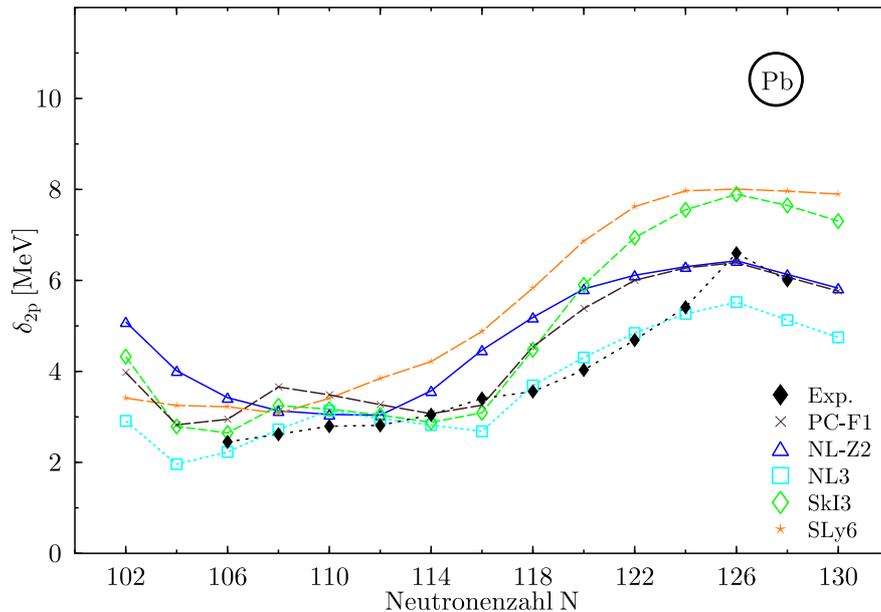


Abbildung 8.19: Die 2-Protonen Gaps für Blei-Isotope aus deformierten Rechnungen.

lauf der Zwei-Protonen-Gaps für drei RMF-Kräfte und zwei Skyrme-Kräfte. In beiden Fällen erkennt man, dass alle Mean-Field-Parametrisierungen in der Lage sind, den Trend der experimentellen Daten qualitativ wiederzugeben. Gerade bei den Zinn-Isotopen zeigt sich jedoch in der Mitte der Kette eine deutliche Abweichung. Diese Diskrepanz lässt sich aber zu einem großen Teil durch die Relevanz der Grundzustandskorrelationen erklären [Fle01]. Die Kraft PC-F1 verhält sich bei beiden Ketten ähnlich wie NL-Z2. Der Grund dafür liegt in der sehr ähnlichen Beschreibung der Schalenstruktur. Rechnungen in sphärischer Symmetrie können den experimentellen Trend nicht wiedergeben [Cor00]. Dies lässt den Schluss zu, dass sich in den experimentellen Daten ein Deformationseffekt äußert. Die Schalenstruktur der magischen Kerne bzw. ihre Magizität bleibt von der Neutronenzahl weitestgehend unbeeinflusst.

Die Deformationsenergien und die korrespondierenden Grundzustandsdeformationen der zu Zinn bzw. Blei benachbarten Kerne (es sind die nächsten gg-Kerne gemeint) sind in den Abb. 8.21 und 8.22 dargestellt. Hier entdecken wir eine Observable, bei der sich das Punktkopplungsmodell deutlich anders verhält als das RMF-FR-Modell: es sagt in dem meisten Fällen Deformationsenergien vorher, die systematisch grösser sind als die der RMF-FR-Parametrisierungen. Die Vorhersagen liegen in etwa zwischen denen der RMF-FR- und der SHF-Kräfte. Die β_2 -Werte allerdings stimmen sehr genau mit den anderen Vorhersagen überein.

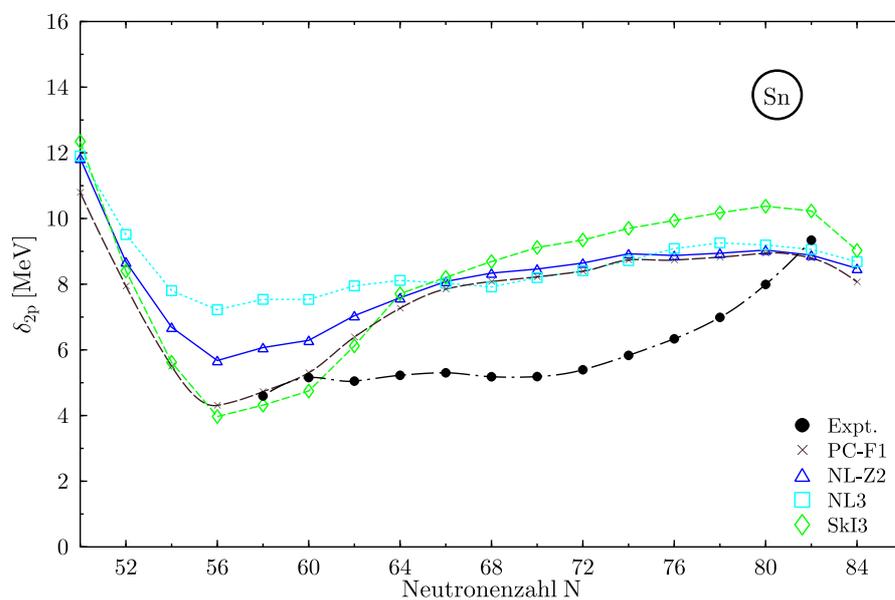


Abbildung 8.20: Die 2-Protonen-Gaps für Zinn-Isotope aus Rechnungen in axialer Symmetrie.

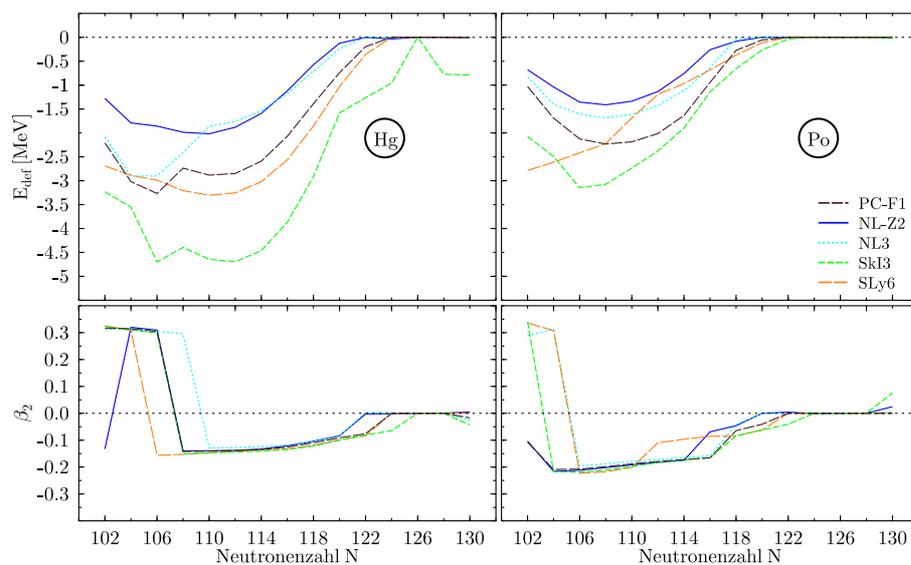


Abbildung 8.21: Deformationsenergien (oben) und Grundzustandsdeformationen (unten) für Blei-Isotope aus deformierten Rechnungen.

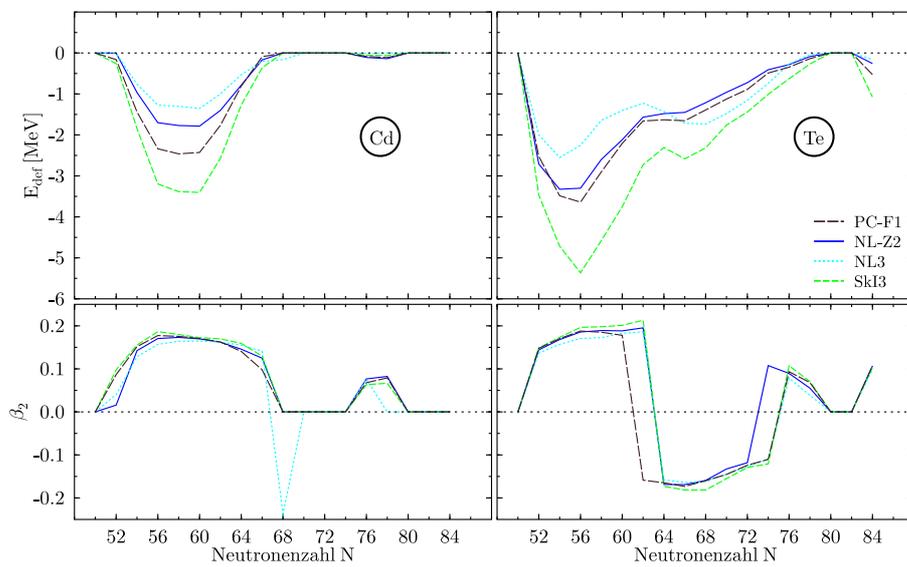


Abbildung 8.22: Deformationsenergien (oben) und Grundzustandsdeformationen (unten) für Zinn-Isotope aus deformierten Rechnungen.

Kapitel 9

Extrapolationen zu überschweren Elementen

9.1 Die Extrapolationsfähigkeit des Modells

Die Einschätzung des Extrapolationsvermögens des in dieser Arbeit weiterentwickelten Punktkopplungsmodells muss auf dessen Verhalten im Bereich der experimentell bekannten Kerne beruhen. Dieses Verhalten wurde in den vorangegangenen Kapiteln ausführlich beschrieben. Dort haben wir gesehen, dass das Punktkopplungsmodell eine Qualität erreicht hat, die vergleichbar mit den herkömmlichen Mean-Field-Modellen ist. Das RMF-PC-Modell kann Spin-Bahn-Aufspaltungen so gut wie das RMF-FR-Modell beschreiben. Aufgrund der hohen Niveaudichte in überschweren Elementen ist dies bei Vorhersagen von magischen Zahlen besonders wichtig.

9.2 Überschwere Elemente

Eine immer noch hochaktuelle und faszinierende Fragestellung in der Kernstruktur ist, ob die Natur die Existenz überschwerer Kerne ermöglicht [Rei00, Arm00]. Diese Kerne verdanken ihre Existenz ausschließlich den Schaleneffekten, da Kerne ab $Z \geq 100$ nicht mehr durch die Oberflächenenergie stabilisiert werden können. Die Barriere des Tropfenmodells verschwindet für diese hohen Kernladungszahlen. Schaleneffekte könnten zu einer *Insel* schalenstabilisierter überschwerer Elemente führen, umgeben von Bereichen schwächerer Stabilität.

In den Jahren 1995-98 gelang die Synthese von Kernen mit den Protonenzahlen $Z = 110 - 112$ [Hof95, Ghi95, Hof96, Laz96b, Hof98]. Experimente jüngerer Datums im FLNR, JINR, Dubna unter der Leitung von Prof. Oganessian führten zur Synthese von Elementen mit $Z = 114$ und $Z = 116$ [Oga99]. Aus Berkeley wurde die Synthese des Elements $Z = 118$ gemeldet [Nin99]. Die Veröffentlichung dazu wurde jedoch vor kurzem von den Autoren zurückgezogen. Der Grund dafür waren drei Experimente in GANIL, an der GSI und RIKEN sowie die Wiederholung des Experiments in Berkeley, bei denen kein Element mit der Protonenzahl $Z = 118$ synthetisiert werden konnte. Zudem führte eine erneute Analyse der Originaldaten aus Berkeley aus dem Jahr 1999 zu dem Schluß, dass die Zerfallsdaten nicht genuiner Bestandteil der Daten sind. Zusätzlich dazu standen zur erneuten Analyse nicht alle Daten zur Verfügung, so dass keine verlässliche Untersuchung möglich war.

Dies zeigt besonders deutlich auf, dass die Experimente in Dubna eine unabhängige Bestätigung benötigen. Das könnte z.B. durch den Einsatz chemischer Methoden geschehen.

Die hohen Wirkungsquerschnitte der Kerne mit $Z \geq 114$ sind dem Trend gegenläufig, der aus Ex-

perimenten an der GSI folgt¹. Andererseits können die Experimente auf das Erreichen der Ausläufer der Insel der überschweren Kerne hindeuten.

Durch die relativ hohen Lebenszeiten der schwersten bekannten Elemente scheint auch die Suche nach überschweren Kernen in der Natur wieder ein interessantes Projekt zu sein [Itk01].

9.2.1 Frühere Rechnungen

Die ersten Vorhersagen zur Schalenstruktur überschwerer Elemente verwendeten das phänomenologische Schalenmodell [Gre95]. Um Lebenszeiten gegenüber spontaner Spaltung abzuschätzen, wurde die Schalenkorrektur-Methode verwendet [Str67, Str68], bei der die Energie des Kerns in Abhängigkeit von der Deformation als die Summe der Energie des Tropfenmodells und den sogenannten Schalenkorrekturen berechnet wird. Letztere beinhalten quantenmechanischen Effekte, die den Kern von einem Flüssigkeitstropfen unterscheiden. Sie werden aus einem mikroskopischen Modell extrahiert. Dieses Konzept wird als makroskopisch-mikroskopische-(*mac-mic*)-Methode bezeichnet.

Die ersten Vorhersagen wurden im Nilsson Modell von W. Greiner und U. Mosel et al. [Mos66, Mos68, Mos69, Gru69, Gru71] sowie S. G. Nilsson et al. [Nil68, Nil69] durchgeführt. Diese frühen Extrapolationen deuteten auf ein Zentrum der Stabilität bei dem Kern $Z = 114$, $N = 184$ hin.

Spätere Rechnungen mit der *mac-mic*-Methode (die Schalenkorrekturen wurden mit dem Yukawa-Einteilchenmodell bestimmt) [Bol72, Fis72] bestätigten diese Ergebnisse.

Zur Berechnung ganzer Potentialenergieflächen von Kernen wurde das Zwei-Zentren-Schalenmodell entwickelt [Sch70, Mos71, Mar72]. Diese Flächen zeigen "kalte Täler", die besonders günstigen Projektil- und Target-Kombinationen für die Fusion des Kerns entsprechen. Die Berechnung der Potentialenergieflächen sowie der kollektiven Massenparameter erlaubte die Vorhersage von Lebenszeiten bezüglich spontaner Spaltung [Kle92b, Sch92].

Rechnungen mit Hilfe des *finite-range-liquid-drop*-(FRDM)-Modells von P. Möller und J. R. Nix [Mö92] lieferten die größten Schaleneffekte für den Kern $Z = 114$, $N = 178$.

Die ersten selbstkonsistenten Rechnungen zu überschweren Elementen gehen zurück bis in die siebziger Jahre [Bei74]. M. Beiner et al. führten Skyrme-Hartree-Fock-Rechnungen mit der Skyrme-Kraft SIII durch. Anhand der Einteilchenspektren wurden die magischen Zahlen $Z = 114, 126, 138$ und $N = 178, 184, 228$ identifiziert. Die Spaltbarriere des Kerns $Z = 114$, $N = 184$ wurde selbstkonsistent zu 7 MeV berechnet, der Grundzustand des Kerns kam als sphärisch heraus.

Rechnungen im Rahmen des relativistischen HFB-Formalismus von G. Lalazissis et al. [Lal96a] mit dem Parametersatz NL-SH und der Gogny-Kraft als Paarkraft wurden Kerne im Bereich $Z = 100 - 114$ und $N = 146 - 190$ berechnet. Magische Schalenabschlüsse ergaben sich für die Protonenzahlen $Z = 106, 114$, für die Neutronen erhielten die Autoren $N = 160, 166, 184$.

Mit der SHF-Methode, den Parametersätzen SkP [Dob84] und SLy7 [Cha95], sowie einer δ -Kraft als Paarkraft wurden 1996 von S. Cwiok et al. Rechnungen zu überschweren Kernen in axialer Symmetrie veröffentlicht [Cwi96]. Die vorhergesagten magischen Zahlen waren $Z = 114, 126$ und $N = 184, 228$. Die Spaltbarriere des Kerns $^{310}126$ wurde unter Einbeziehung triaxialer Freiheitsgrade gerechnet. Die Barrierenhöhe ergab sich zu 12 MeV (SkP) bzw. 9 MeV (SLy7).

In Frankfurt wurden von K. Rutz et al. mit einer großen Auswahl an Kräften im RMF-FR Modell und mit der SHF-Methode sphärische überschwere Kerne, und, damit verbunden, doppelt-magische Systeme untersucht [Rut97]. Die Vorhersage der magischen Zahlen erwies sich als sensitiv auf die gewählte Parametrisierung. Während die Vorhersagen der Skyrme-Kräfte die magischen Zahlen $Z = 114, 120, 126$ und $N = 184$ ergaben, sagten relativistische Kräfte $Z = 120$ und $N = 172, 184$ vorher. In einer späteren Studie von M. Bender et al. [Ben99] konnten die unterschiedlichen Vorhersagen auf die Eigenschaften der Spin-Bahn-Kraft in den verschiedenen Modellen und Kräften zurückgeführt

¹So gelang es bisher nicht, Element $Z = 113$ herzustellen.

werden. Relativistische Modelle sind in dieser Hinsicht den getesteten Skyrme-Kräften überlegen. Die Konsequenz daraus ist, dass der doppelt-magische, überschwere Kern, im Gegensatz zu älteren Vorhersagen, 120 Protonen und 172 Neutronen haben könnte.

Eine Studie in axialer Symmetrie [Bue98a] untersuchte im Bereich von $Z = 100 - 120$ deformierte Schalenabschlüsse, Grundzustandsdeformationen und Abschätzungen für Lebenszeiten gegenüber α -Zerfall mit einigen relativistischen und Skyrme-Kräften. Während beide Modelle den deformierten Schalenabschluss bei $N = 162$ bestätigen, sagen nur die Skyrme-Kräfte $Z = 108$ als magische Protonenzahl vorher. Relativistische Modelle ergeben, abhängig von der Parametrisierung, $Z = 104$ bzw. $Z = 106$.

Weitere Untersuchungen zu überschweren Kernen umfassen erste Studien zu Potenzialenergieflächen [Ben98] sowie zu Schalenkorrekturen [Kru00, Ben01].

Die Deformationsenergien überschwerer Elemente im Bereich des Tals der β -Stabilität mit $100 \leq Z \leq 128$ und $150 \leq N \leq 218$ im Rahmen des HFB-Formalismus wurden in [Ber96, Ber01] vorgestellt.

Im Folgenden wollen wir mit Hilfe des Punktkopplungsmodells zwei Aspekte dieses Themengebiets beleuchten: die Frage nach magischen Zahlen und die Stabilitätsabschätzung der Kerne gegenüber spontaner Spaltung.

Dabei sind einerseits die Eigenschaften dieser Kerne interessant. Andererseits ist ein Vergleich der Vorhersagen der einzelnen Kräfte möglich, um herauszufinden, welche Eigenschaften der Modelle zu bestimmten Ergebnissen führen. Drei Studien [Rut97, Bue98a, Ben99] haben gezeigt, dass die Vorhersagen für Schalenabschlüsse stark von der gewählten Parametrisierung abhängen. Da PC-F1 und NL-Z2 auf gleiche Weise gefittet wurden, kann zudem die Rolle der endlichen Reichweite untersucht werden.

9.2.2 Schalenstruktur

Signaturen für Schalenabschlüsse

Die Zwei-Protonen- bzw. Zwei-Neutronen-Gaps, die wir hier betrachten wollen, sind unter gewissen Umständen nur bedingt geeignet, sphärische Schalenabschlüsse zu identifizieren. Dies ist dann der Fall, wenn die benachbarten Kerne, deren Grundzustandsenergien in die Formel für δ_{2p} eingehen, deformiert sind. Untersuchungen in [Cor00] zeigen, dass die gemessene Abnahme der Schallengaps in Blei- und Zinn-Isotopen nicht auf ein Verschwinden der sphärischen Schalenabschlüsse zurückzuführen ist sondern auf Deformationseffekte.

In den unten diskutierten Fällen sind sie als Kennzeichen für sphärische bzw. deformierte Schalenabschlüsse geeignet, da in sphärischen Rechnungen nach Definition kein Einfluß von Deformationseffekten auftaucht. In den deformierten Rechnungen sind die Trends der Kerne als Funktion der Deformation (mit Ausnahme der sphärischen Schalenabschlüsse) glatt.

Sphärische Rechnungen

In sphärischer Symmetrie wurde ein großes Gebiet überschwerer Kerne mit den vier in dieser Arbeit betrachteten Kräften gerechnet. Abb. 9.1 zeigt diese Karte für die Kräfte NL-Z2, NL3, PC-F1 und PC-LA. Die magische Protonenzahl $Z = 120$ erscheint für die ersten drei der genannten Kräfte, ebenso die magische Neutronenzahl $N = 172$ und, etwas schwächer und für kleinere Protonenzahlen, $N = 184$. Dabei ist der Neutronenabschluss bei der Kraft PC-F1 am schwächsten realisiert. Die Schalenstruktur bei der Kraft PC-LA ist nicht so deutlich ausgeprägt. Man erkennt schwache Anzeichen von Schalenabschlüssen bei $Z = 114$ und $Z = 120$. Bei den Neutronen ist praktisch keine Schalenstruktur erkennbar. Ein Effekt der Schalenstruktur, der in selbstkonsistenten Rechnungen zum Vorschein treten kann, ist in der Abbildung schön zu erkennen. Die Magizität einer Schale ist

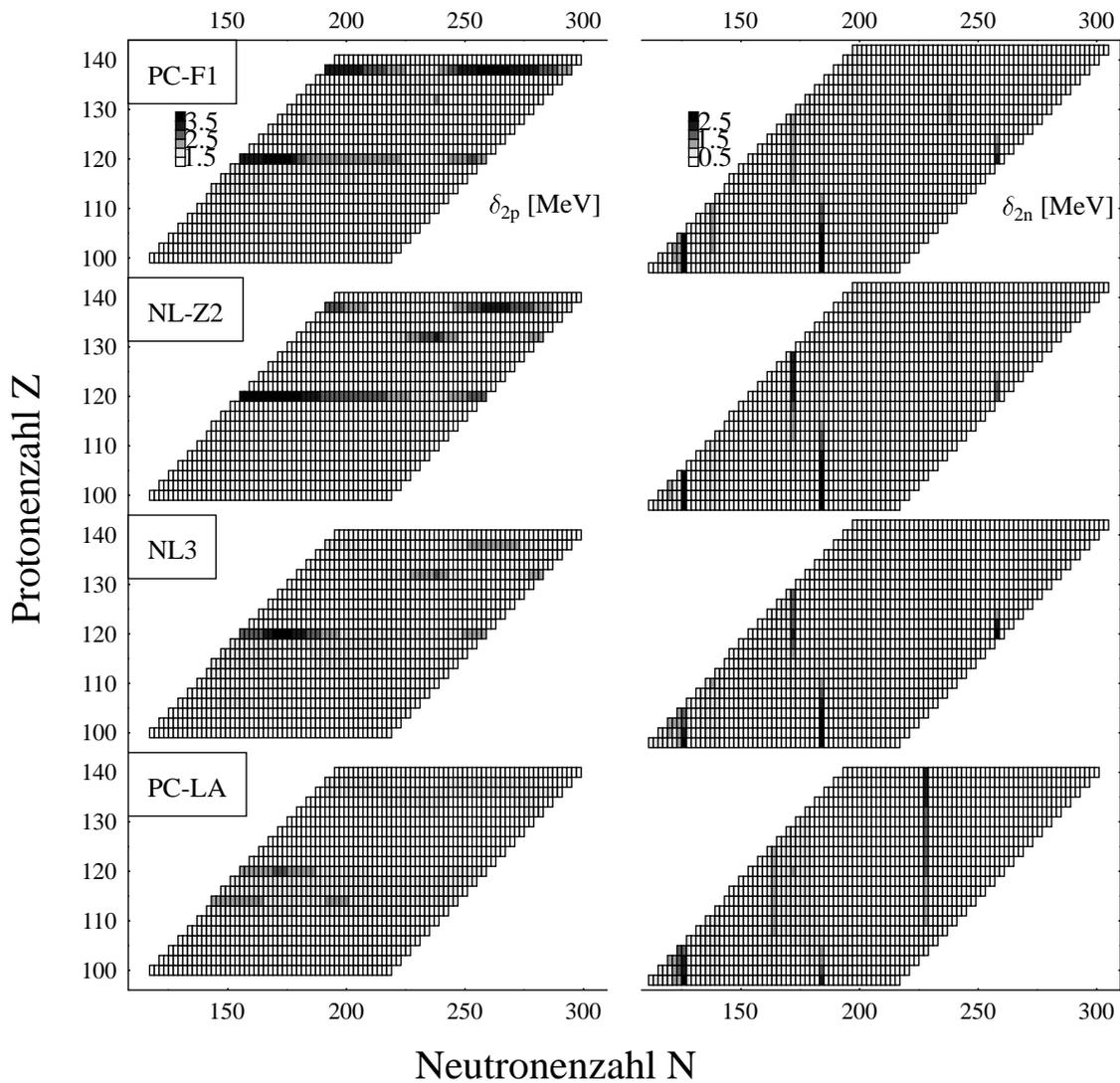


Abbildung 9.1: Zwei-Protonen-Gaps und Zwei-Neutronen-Gaps in sphärischen Rechnungen für die Kräfte PC-F1, NL-Z2, NL3 und PC-LA (von oben nach unten).

nicht unabhängig von der jeweils anderen Nukleonensorte, sondern korreliert mit ihr im Allgemeinen. So wird der zu $Z = 120$ korrespondierende Zwei-Protonen-Gap für hohe Neutronenzahlen deutlich geringer als bei Neutronenzahlen um $N = 172$. Der genaue Verlauf ist dabei von Kraft zu Kraft verschieden.

Die Vorhersagen $Z = 120$ und $N = 172$, die auch die Existenz eines doppelt-magischen Kerns beinhalten, finden sich gerade bei den Kräften, bei denen die Spin-Bahn-Aufspaltungen mit guter Genauigkeit (ca. 20%) beschrieben werden. Die Kraft PC-LA, die diese Aufspaltungen in bekannten Kernen stark überschätzt, zeigt neben $Z = 120$ auch $Z = 114$ als Schalenabschluss an, beides jedoch sehr schwach ausgeprägt. Die Vorhersage $Z = 114$ trifft noch auf die Skryme-Kraft SkI4 zu [?], eine Kraft, die ebenfalls zu einer deutlichen Überschätzung der Spin-Bahn-Aufspaltungen führt. Daraus konnte schon in einer Veröffentlichung [Ben99] gefolgert werden, dass diese Vorhersage mit (zu) großen Energiedifferenzen in den Aufspaltungen der Einteilchenniveaus einhergeht.

So können wir schließen, dass die Vorhersage der magischen Zahlen $Z = 120$ und $N = 172$ die zuverlässigste ist. RMF-PC+PC-F1 bestätigt die vorausgegangenen Rechnungen mit den RMF-

FR-Modellen. Die endliche Reichweite scheint keine oder nur eine untergeordnete Rolle zu spielen. Für die Entwicklung der Skyrme-Kräfte bedeutet dies, dass Modifikationen an der Spin-Bahn-Kraft und/oder der Dichteabhängigkeit notwendig sind. Der doppelt-magische Kern $^{292}_{120}172$ zeigt ein

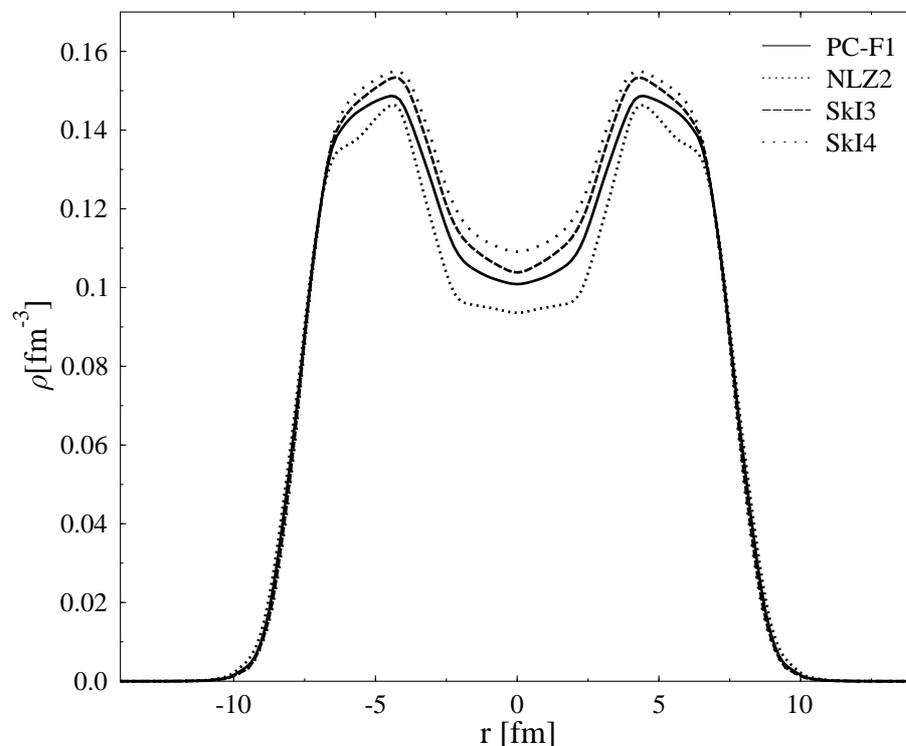


Abbildung 9.2: Dichte Profil der Baryondichte des Kerns $^{292}_{120}$ für die RMF Kräfte PC-F1 und NL-Z2 sowie die Skyrme-Kräfte SkI3 und SkI4.

interessantes Verhalten der Baryondichte als Funktion des Radius [Bue97, Ben99]. Abb. 9.2 zeigt dies für vier Mean-Field-Kräfte. Man erkennt, dass auch das Punktkopplungsmodell diesen Abfall der Dichte im Inneren des Kerns vorhersagt. Der Dichteverlauf der RMF-PC Kraft ist weicher als der der RMF-FR-Parametrisierung. Dieser Effekt der fehlenden Faltung ist auch bei leichteren Kernen sichtbar (siehe das Kapitel 8). Auch die Skyrme-Kräfte sagen eine Struktur voraus, die man als "Semi-Blasen-Struktur" bezeichnen kann. Dies ist ein Effekt, der nur in selbstkonsistenten Modellen auftreten kann, in die keine Annahmen über Potenzial bzw. die Dichteverteilung des Kerns einfließen.

Diese untypische Dichteverteilung hängt unmittelbar mit dem Einteilchenspektrum der Neutronen zusammen: viele der Zustände in der Nähe der Fermienergie besitzen hohe Bahndrehimpulse und liefern deshalb den größten Beitrag zur Gesamtdichte bei endlichem Radius [Ben99]. Bei Isotopen mit mehr Neutronen wird dieser Dichte-Effekt geringer, verursacht durch den Beitrag von Neutronenzuständen mit kleineren Bahndrehimpulsen, die ihren größten Beitrag zur Kerndichte in der Nähe des Kerninnern liefern. Abbildung 9.3 zeigt für Protonen und Neutronen das Einteilchenspektrum im Bereich der Fermienergie. Der Schalenabschluß bei der Protonenzahl $Z = 120$ ist bei allen Kräften deutlich erkennbar. Die Spin-Bahn Aufspaltung der beiden $2f$ -Zustände der Protonen ist bei PC-LA größer als bei den übrigen RMF-Kräften: dies ist ein Effekt, den wir schon von der Untersuchung der Spin-Bahn-Aufspaltungen bei bekannten Kernen kennen. Die $3p$ -Zustände sind außer bei PC-LA fast entartet. Es lässt sich keine signifikante Aufspaltung der Zustände erkennen. Ursache dafür ist der funktionale Verlauf des Spin-Bahn-Potenzials, das aufgrund der Dichteverteilung für kleine Radien positives Vorzeichen besitzt, so dass Zustände, die hauptsächlich bei kleinem Radius lokali-

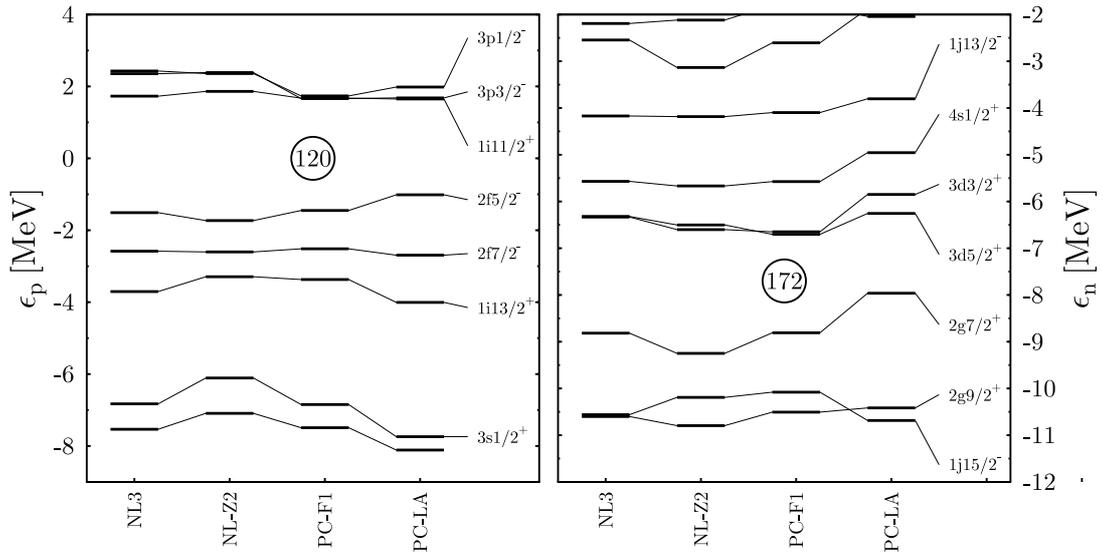


Abbildung 9.3: Ausschnitte des Einteilchenspektrums der Protonen (links) und Neutronen (rechts) des Kerns $^{292}_{120}$ aus Rechnungen in sphärischer Symmetrie.

siert sind, keine Aufspaltung erfahren können. Die Reihenfolge und weitestgehend die Energie der Einteilchenniveaus der Protonen stimmen für alle Kräfte überein.

Bei den Neutronen ergeben sich etwas größere Unterschiede: in einigen Fällen ergibt sich eine unterschiedliche Reihenfolge der Niveaus (z.B. die der $2g9/2^+$ - und $1j15/2^-$ -Zustände bei PC-LA oder die $3d$ -Zustände bei den RMF-FR-Kräften). Der Grund für die geringe Aufspaltung der beiden Zustände liegt wieder in der Dichteverteilung des Kerns. Bei PC-LA liegt der $2g7/2^+$ -Zustand deutlich höher als bei den übrigen RMF-Kräften, so dass der zu dem $N = 172$ gehörende Gap kleiner ausfällt.

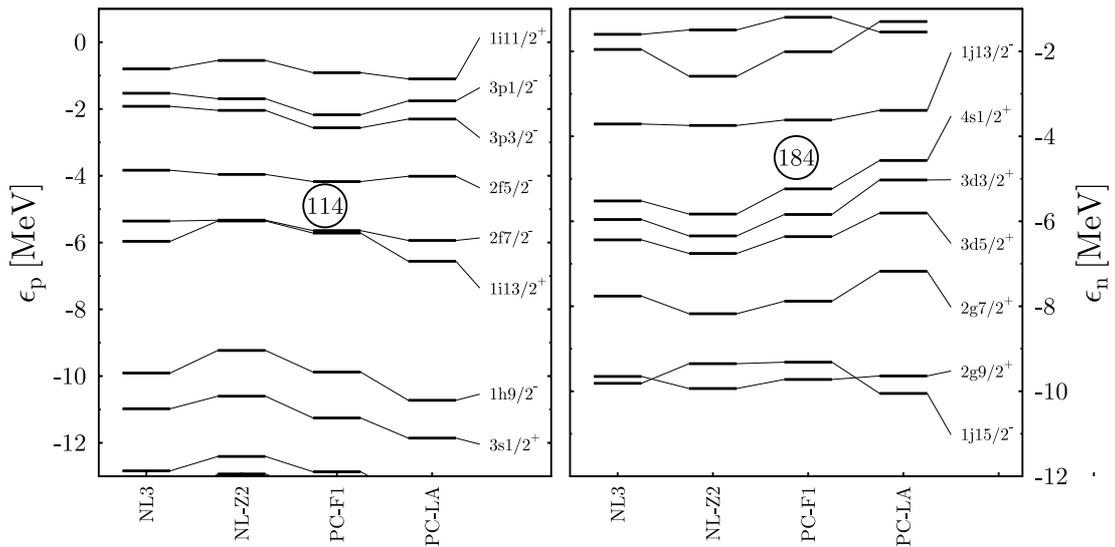


Abbildung 9.4: Ausschnitte des Einteilchenspektrums der Protonen (links) und Neutronen (rechts) des Kerns $^{298}_{114}$ aus Rechnungen in sphärischer Symmetrie.

Wir wollen uns die Spektren des Kerns $^{298}_{114}_{184}$ betrachten (siehe Abbildung 9.4). Dieser Kern

wird von einer Vielzahl an makroskopisch-mikroskopischen Modelle sowie dem SHF-Modell mit der Skyrme-Kraft SkI4 als doppelt-magisch vorhergesagt. Die Größe des Gaps, der zu der Protonenzahl 114 korrespondiert, hängt sensitiv von der Größe der Aufspaltung der $2f$ -Niveaus durch die Spin-Bahn-Kraft ab. Diese ist in allen Fällen nicht besonders groß, bei PC-LA ist sie am stärksten, was sich bereits bei der Untersuchung der 2-Protonen-Gaps erkennen ließ. Der große Gap zwischen dem $1h9/2^-$ - und dem $1i13/2^+$ -Zustand korrespondiert zur Protonenzahl $Z = 92$.

Bei den Neutronen ergeben sich Unterschiede in der Niveaureihenfolge bei den $1j15/2^-$ - und $2g9/2^+$ -Zuständen. Die zu der magischen Neutronenzahl $N = 184$ gehörende Lücke im Spektrum ist bei den Punktkopplungskräften kleiner als bei den RMF-FR-Kräften, der Schalenabschluß tritt hier nicht so betont auf. Dies liegt an den angehobenen $3d$ - und $4s$ -Zuständen.

Insgesamt zeigt sich bei den überschweren Kernen im Vergleich mit dem RMF-FR-Modell eine schwächere Schalenstruktur im Neutronenspektrum der RMF-PC-Kräfte. Die spektralen Unterschiede der Modelle, die bei bekannten Kernen kaum auftreten, verstärken sich hier im Bereich großer Niveaudichten. Es muss noch genau verstanden werden, aus welchen Eigenschaften der Modelle diese Differenzen herrühren.

Deformierte Rechnungen

Kerne mit Protonenzahlen von $Z \geq 98$ haben wohldefinierte prolate Kernformen. Experimentell ist die Existenz der magischen Neutronenzahl $N = 162$ bestätigt, und für die magische Protonenzahl $Z = 108$ gibt es Hinweise [Laz96]. Dies entspräche der Existenz eines doppelt-magischen deformierten Kerns. Diesen Bereich der Nuklidkarte wollen wir mit Hilfe der Kraft PC-F1 betrachten. Untersuchungen mit NL-Z2 und NL3 finden sich in [Bue98a, Rut99]. Vorangegangene Studien zeigen, dass auch die Vorhersage deformierter Schalenabschlüsse von der jeweiligen Parametrisierung abhängt. NL3 sagt $Z = 106$ als magische Protonenzahl vorher, während diese für NL-Z2 $Z = 104$ ist. Beide Kräfte zeigen einen Abschluss bei $N = 162$. Skyrme-Kräfte favorisieren die Protonenzahl $Z = 108$. Auch sie bestätigen die $N = 162$ Neutronenschale.

Abb. 9.5 zeigt das Ergebnis der Rechnungen mit PC-F1. Man erkennt auch hier die deformierten Schalenabschlüsse bei $Z = 104$ und $N = 162$ in Übereinstimmung mit NL-Z2. Dies zeigt wieder deutlich den Einfluss der Fitstrategie auf die Vorhersagen der Modelle. Es ist noch nicht ganz klar, warum die relativistischen Modelle für die deformierten Kerne von den experimentellen Daten abweichende Vorhersagen machen, während die Vorhersagen der magischen Zahlen mit Hilfe von Skyrme-Kräften in Einklang mit den Messungen sind².

Abbildung 9.6 zeigt für die gerechneten Kerne die β_2 - und β_4 -Deformationen. Der globale Trend der Deformationen entspricht dem Trend, den alle in [Bue98a] untersuchten RMF-FR- und SHF-Kräfte zeigen: Kerne am unteren linken Rand des untersuchten Gebietes weisen die größten prolaten Grundzustandsdeformationen von $\beta_2 \approx 0.25 - 0.3$ auf, während die Deformationen mit steigendem Z und N abnehmen. Im oberen Gebiet (Protonenzahlen ≈ 120) treten sphärische Kernformen auf, die durch den Einfluss der sphärischen Schalenabschlüsse zustande kommen. Im Gegensatz zu Vorhersagen der RMF-FR-Modelle ist hier aber die sphärische Form sehr stark auf die Kerne mit $Z = 120$ konzentriert, ein großer Bereich sphärischer Kerne existiert für Elemente im Bereich der magischen Neutronenzahl $N = 184$.

In den Hexadekupoldeformationen erkennt man einen Vorzeichenwechsel: während die Kerne mit den größten Quadrupoldeformationen positive β_4 -Werte haben (diamantenförmige Dichteverteilung), haben die Kerne im Bereich $Z \approx 114$ negative Hexadekupoldeformationen, was ihnen eine fassähnliche Form gibt. Auch in dieser Hinsicht stimmen die Ergebnisse von RMF-PC+PC-F1 mit denen anderer Mean-Field-Parametrisierungen überein.

²Einige von ihnen sagen jedoch einen schwachen Schalenabschluss bei $N = 150$ vorher, während das Experiment auf $N = 152$ hindeutet.

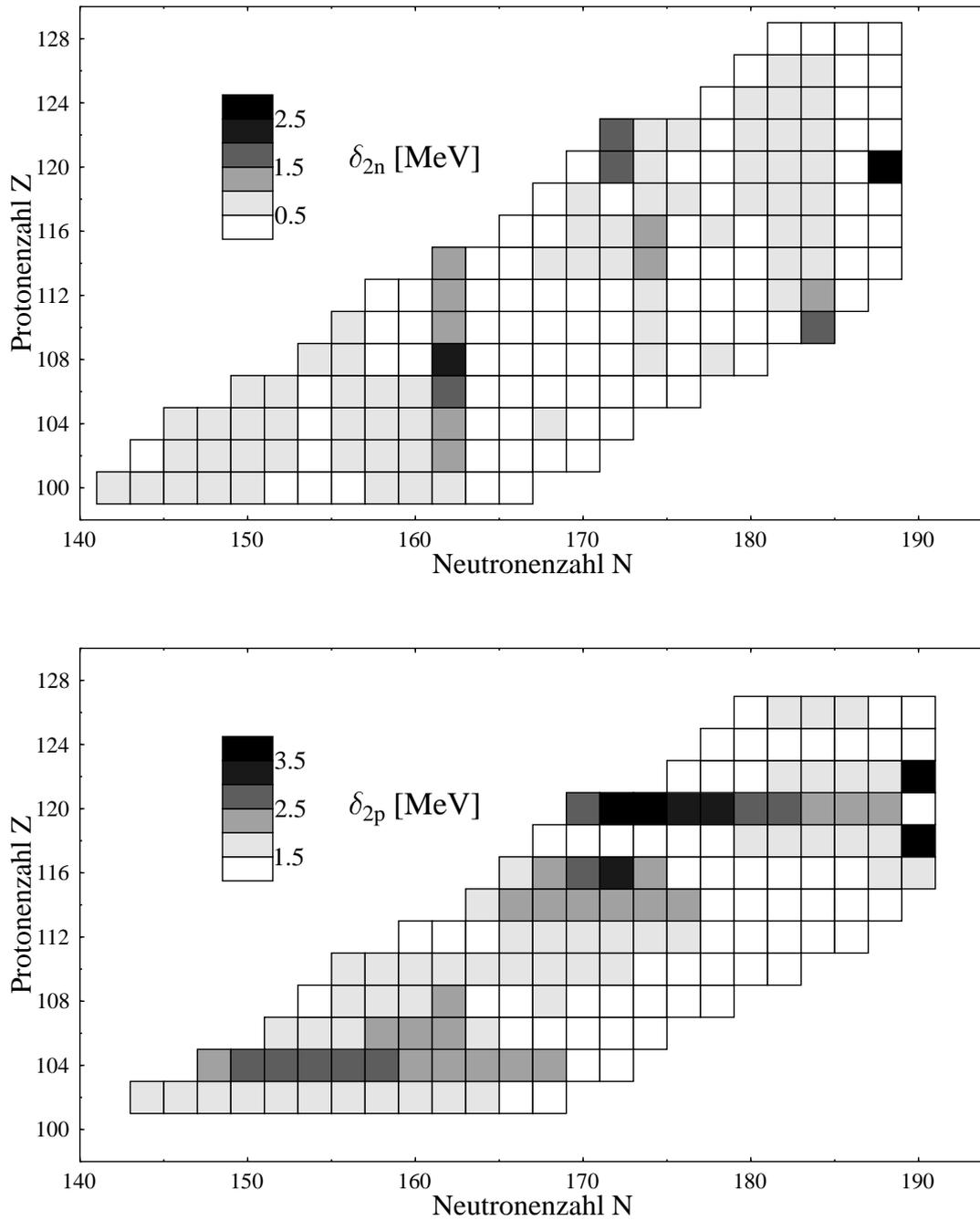


Abbildung 9.5: 2-Protonen-Gaps (unten) und 2-Neutronen-Gaps (oben) in axialsymmetrischen und reflektions-symmetrischen Rechnungen für die Kraft PC-F1.

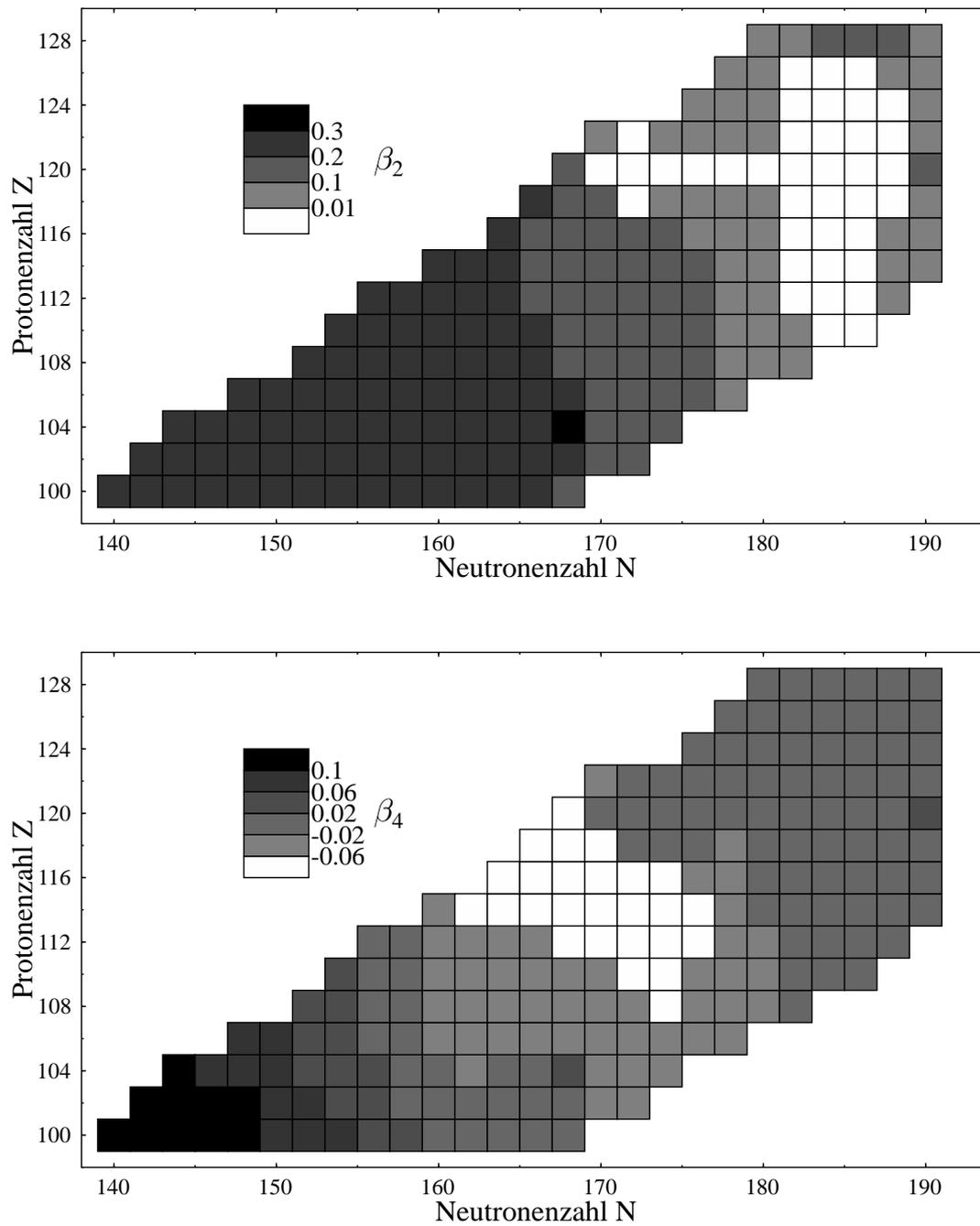


Abbildung 9.6: β_2 - (oben) und β_4 -Deformationen (unten) in axialsymmetrischen und reflektionsymmetrischen Rechnungen für die Kraft PC-F1.

9.2.3 Spaltbarrieren

Im Folgenden wollen wir die Vorhersagen des Punktkopplungsmodells zu Spaltbarrieren der Überschweren Kerne untersuchen. Dazu betrachten wir die Potenzialenergieflächen des in RMF-Modellen doppelt-magischen Kerns $^{292}_{120}172$ und des klassischen überschweren Kerns mit 114 Protonen und 184 Neutronen.

Der doppelt-magische Kern $^{292}_{120}172$

Dieser Kern sollte durch seine zwei Schalenabschlüsse eine hohe Schalenkorrektur besitzen, und damit gegenüber seinen Nachbarkernen stark stabilisiert werden. Da alle der hier untersuchten RMF-Modelle in Bezug auf seine doppelte Magizität (wobei die Ausprägung der Neutronenschale für PC-F1 und für PC-LA die Ausprägung beider Schalen sehr schwach ist) übereinstimmen, ist es interessant, die verschiedenen Modelle in Hinblick auf ihre Vorhersagen zur Stabilität des Kerns gegenüber spontaner Spaltung zu testen. Dazu untersuchen wir seine Spaltbarriere, die in axialer Symmetrie bei Brechung der Reflektionssymmetrie des Kerns gerechnet wurde. Abbildung 9.7 zeigt die Ergebnisse der Rechnungen. Es ist auch der symmetrische Pfad dargestellt, er korrespondiert zu der höheren zweiten Barriere. Bis auf die Kraft PC-LA sagen alle Kräfte ein ausgeprägtes sphärisches Minimum im kollektiven Potenzial vorher. Die Vorhersagen zur Barrierenhöhe enthalten eine Unsicherheit von ca. 2 MeV. Das RMF-PC-Modell tendiert dabei mit beiden Parametersätzen zu kleineren Barrieren als die RMF-FR-Kräfte. PC-F1 zeigt hier zusätzlich deutlichere Strukturen in der Barriere. Es existiert im reflektionsasymmetrischen Fall keine zweite Barriere. Eine ca. 2 MeV hohe Barriere erscheint nur in den Rechnungen mit Reflektionssymmetrie. Hier hat das zweite Minimum geringere Energie als der Grundzustand des Kerns. Besonders ausgeprägt ist dies für die Kräfte des Punktkopplungsmodells. Da in allen Modellen die Coulomb-Kraft gleich behandelt wird, deutet dies auf eine im Verhältnis zum RMF-FR-Modell geringere Oberflächenenergie des RMF-PC-Modells hin.

Trotz der Unterschiede in der konkreten Barrierenstruktur verläuft der symmetrische Spaltpfad für alle Kräfte sehr ähnlich in der $\beta_2 - \beta_4$ -Ebene. Die Oktupoldeformationen der asymmetrischen Rechnungen unterscheiden sich deutlich im Bereich, in dem asymmetrische Deformationen relevant werden, bei höheren Quadrupoldeformationen verlaufen die Pfade wieder sehr ähnlich.

Interessanterweise sagen Skyrme-Kräfte für diesen Kern und auch für benachbarte Kerne dieses Bereichs der Nuklidkarte systematisch höhere Barrieren voraus [Ben97, Rut99, Bue01b], unabhängig davon, welche magischen Zahlen diese Kräfte vorhersagen. Generell sind die Schalenkorrekturen [Ben01, Kru00] bei Skyrme-Kräften höher als bei RMF-Parametrisierungen. Diese systematischen Unterschiede müssen noch genau verstanden werden.

Der klassische überschwere Kern $^{298}_{114}184$

Vorhersagen phänomenologischer Schalenmodelle und mikroskopisch-makroskopischer Modelle sagen das Zentrum der Stabilität überschwerer Kerne für das Element $^{298}_{114}184$ vorher. Dieser Kern wird von den RMF-Kräften nur als einfach magisch vorhergesagt (die Neutronenzahl $N = 184$ ist für Protonenzahlen kleiner als $Z = 120$ in diesem Modell magisch, wenn auch nicht in so deutlicher Ausprägung wie die Neutronenzahl $N = 172$). Seine Spaltbarriere ist aber interessant in Hinblick auf frühere Vorhersagen sowie auf die Unterschiede in den einzelnen Kräften. Abb. 9.8 zeigt die Vorhersagen für seine Barriere in axialer Symmetrie und unter Brechung der Reflektionssymmetrie (der symmetrische Pfad ist auch gezeigt und korrespondiert zu den jeweils höheren zweiten Barrieren).

Ähnlich wie bereits beim Kern $^{292}_{120}172$ erhalten wir bei Berücksichtigung asymmetrischer Kernformen nur eine Barriere. Alle Kräfte bis auf PC-LA sagen ein deutliches sphärisches Minimum vorher. Die Spaltbarriere ist etwas niedriger als bei dem doppelt-magischen Kandidaten. Die Vorhersagen wirken hier aber recht einheitlich: die Differenzen zwischen den Vorhersagen der Kräfte

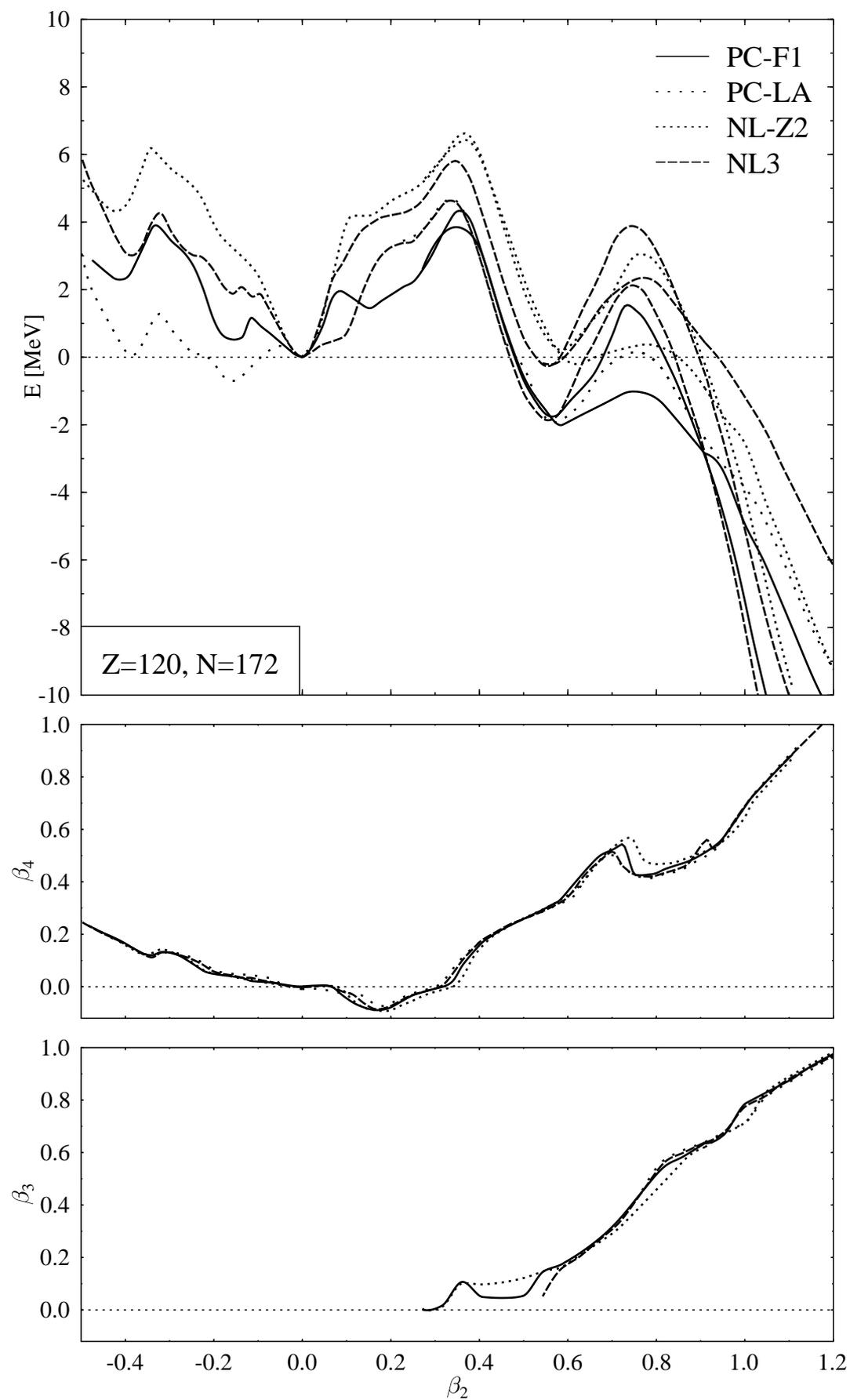


Abbildung 9.7: Symmetrische und asymmetrische Spaltbarrieren (oben), β_4 -Deformation für den symmetrischen Spaltpfad (mitte) und β_3 -Deformation für den asymmetrischen Spaltpfad (unten).

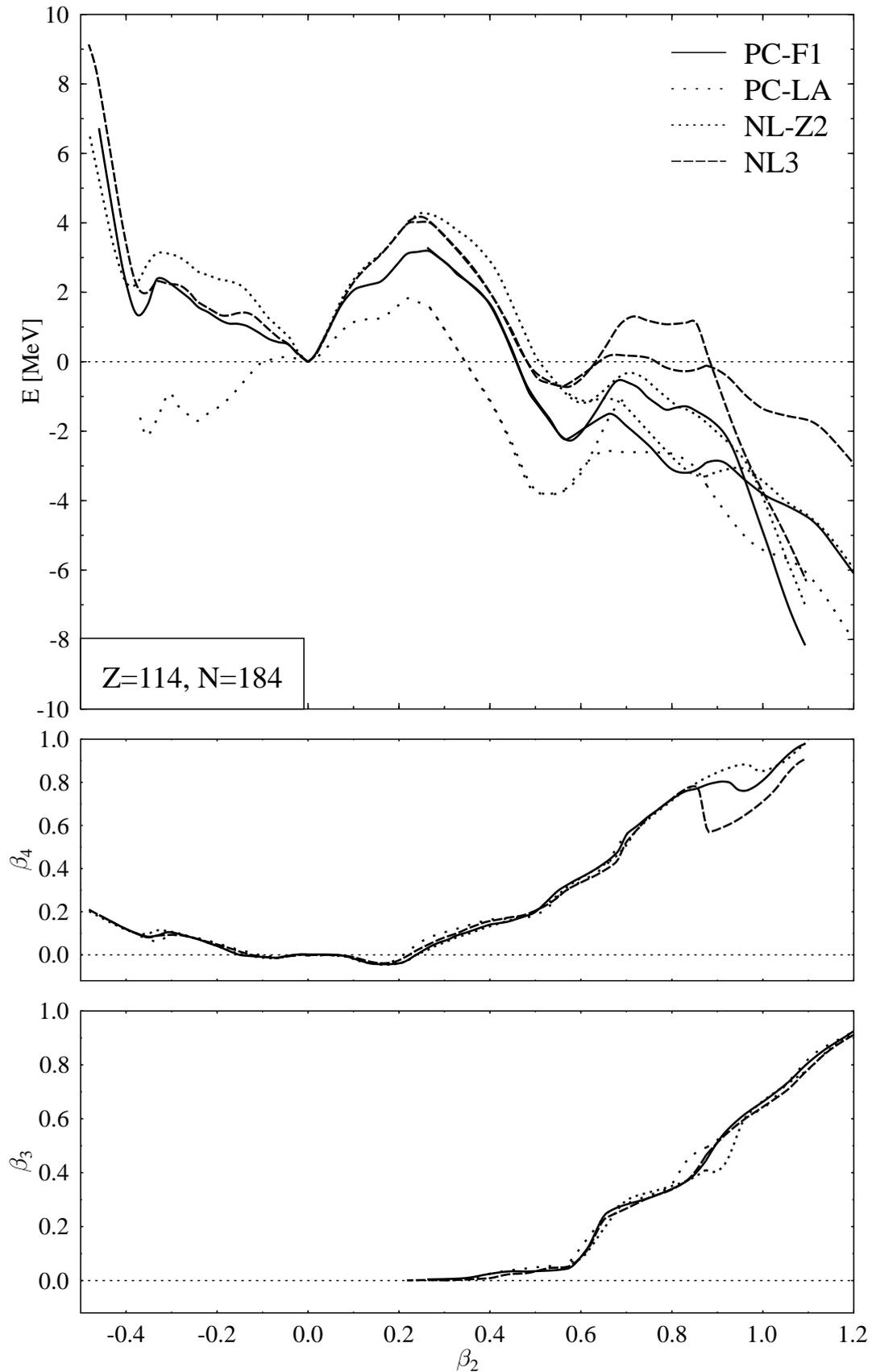


Abbildung 9.8: Symmetrische und asymmetrische Spaltbarrieren (oben), β_4 -Deformation für den symmetrischen Spaltpfad (mitte) und β_3 -Deformation für den asymmetrischen Spaltpfad (unten).

für die Barrierenhöhe bewegen sich im Bereich von knapp einem MeV bei NL3, NL-Z2, PC-F1. Das Resultat von PC-LA weicht deutlich davon ab. PC-LA sagt für diesen Kern eine oblate Gestalt vorher und die axiale Barriere ist weniger als 2 MeV hoch. Auf der prolaten Seite beobachten wir, dass der reflektionssymmetrische, isomere Zustand eine Energie unterhalb der des Grundzustandes besitzt. Diese Energie liegt bei den Punktkopplungskräften noch niedriger als bei den Kräften des RMF-FR-Modells. Bis auf kleine Unterschiede bei $\beta_2 \approx 0.9$ verlaufen die Pfade in den $\beta_2 - \beta_3$ - und $\beta_2 - \beta_4$ -Ebenen wieder sehr ähnlich.

Das Punktkopplungsmodell (mit der Kraft PC-F1) verhält sich bei den überschweren Elementen ähnlich wie das RMF-FR-Modell: Die Vorhersagen der magischen Zahlen stimmen überein, und die Spaltbarrieren der überschweren Kerne sind im Vergleich zu Skyrme-Kräften sehr niedrig, sogar noch etwas niedriger als die des RMF-FR-Modells. Die sehr niedrige Lage des reflektionssymmetrischen Isomers deutet auf eine geringe Oberflächenenergie hin.

Die systematischen Unterschiede bezüglich der axialen Barrierenhöhen zwischen den RMF- und SHF-Modellen deuten auf einen signifikanten Unterschied in den Modellen hin, der bisher bei bekannten Kernen nicht so stark in Erscheinung getreten ist. Hier sind in Zukunft Untersuchungen notwendig. Punkte, die untersucht werden müssen, sind z.B. die Behandlung der Coulomb-Kraft, offene Fragen zu den *bulk properties* von Kernmaterie sowie die Schalenstruktur der Kerne betreffende Eigenschaften.

Kapitel 10

QCD Scaling

10.1 Der Zusammenhang von effektiven Modellen mit der Quantenchromodynamik

Effektive Modelle, wie das in dieser Arbeit diskutierte Punktkopplungsmodell, versuchen im Niederenergielimes die starke Wechselwirkung sowie Vielkörpereffekte zu simulieren. Ein Zusammenhang zwischen der fundamentalen Theorie der starken Wechselwirkung – der Quantenchromodynamik (QCD)¹ – und den effektiven Theorien in der Kernstruktur lässt sich über die der QCD zugrunde liegenden Symmetrien herstellen. Die Chirale Symmetrie, welche beschrieben wird durch die $SU(2) \otimes SU(2)$ Symmetriegruppe, ist hierbei wesentlich. Sie sorgt für die Erhaltung der axialen Ströme und ist exakt gegeben im Falle von masselosen Quarks (Terme mit Massen erhalten nicht die chirale Symmetrie).

Stephen Weinberg führte die *Chirale Störungstheorie* (engl. *Chiral Perturbation Theorie (CPT)*) in die Kernphysik ein [Wei79, Wei90]. Unter Anwendung der chiralen Symmetrie entwickelte er die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung nach Ordnungen von typischem Impuls/Energieskala. Dies führte zu einer systematischen Unterdrückung der Wechselwirkung mehrerer Nukleonen. Mit anderen Worten, die formal unendliche Reihe ist physikalisch begrenzt.

10.2 Naive Dimensionale Analyse

Unter Benutzung zweier Skalen wird die Lagrangedichte umgeschrieben:

- $f_\pi = 92.5 \text{ MeV}$ (Pion Zerfallskonstante)
- $\Lambda \approx 1 \text{ GeV}$ (QCD Massenskala)

Der Wert für die Massenskala kann auch anders gewählt werden, in [Wei90] wird dazu z.B. die Masse des ρ -Mesons verwendet. Sie entspricht einer Impuls-Cutoff Skala und charakterisiert die Massenskala der Physik jenseits von Goldstone-Bosonen. Durch den Impuls-Cutoff wird damit Physik, die auf kurzreichweitigen Skalen relevant ist, vernachlässigt. Sie wird letztendlich im Ansatz bzw. den Kopplungskonstanten absorbiert.

Die Regeln, die zu der skalierten Lagrangedichte führen, können nach [Ser97] folgendermassen formuliert werden:

1. Berücksichtige für jedes stark wechselwirkende Feld einen Faktor $1/f_\pi$.

¹Die QCD ist noch Gegenstand intensiver experimenteller Tests.

2. Multipliziere alles mit dem Faktor $f_\pi^2 \Lambda^2$.
3. Multipliziere mit Faktoren $1/\Lambda$ um die Dimension $[\text{Masse}]^4$ zu erhalten.
4. Berücksichtige angemessene Abzählfaktoren (wie z.B. $1/n!$ für Φ^n , Φ bezeichnet dabei generisch ein Feld.).

Diese Regeln lassen sich nach [Man84] wie folgt interpretieren:

Regel 1 besagt, dass die Amplitude zur Produktion eines stark wechselwirkendes Elementarsystems proportional ist zur Amplitude, ein Goldstone Boson zu emittieren. Die Regel 2 resultiert aus der Form von Massetermen für nicht-Goldstone Bosonen. Für ein isoskalares-skalares Feld lässt sich der Masseterm schreiben als

$$\frac{1}{2} m_s^2 \phi^2 = \frac{1}{2} f_\pi^2 \Lambda^2 \frac{m_s^2}{\Lambda^2} \frac{\phi^2}{f_\pi^2}. \quad (10.1)$$

Dabei wird m_s von der gleichen Größenordnung angenommen wie Λ . Diesen Faktor erhalten alle Terme der skalierten Lagrangedichte. Daraus folgt, dass Terme höherer Ordnung und Terme mit Ableitungen der Felder gegenüber den führenden Masse-Termen um Potenzen von $1/\Lambda$ unterdrückt werden. Dies ist ein Effekt, dessen Ursache das *Ausintegrieren* der Physik jenseits der Skala Λ ist. Aus diesem Grunde benötigt man noch die Regel 3. Regel 4 wird in [Fur96] diskutiert.

10.3 Die skalierte Lagrange-Dichte

Wie oben geschildert, können wir nach Manohar und Georgi [Man84] die Komponenten einer generischen Lagrangedichte wie folgt skalieren:

$$\mathcal{L} \propto -c_{lmn} \left[\frac{\bar{\psi}\psi}{f_\pi^2 \Lambda} \right]^l \left[\frac{\vec{\pi}}{f_\pi} \right]^m \left[\frac{\partial_\mu, m_\pi}{\Lambda} \right]^n f_\pi^2 \Lambda^2. \quad (10.2)$$

In diesem Ausdruck sind keine Dirac-Matrizen und Isospin Matrizen berücksichtigt. Der Zähler im dritten Bruch ist so zu lesen, dass an dieser Stelle entweder die Masse oder Ableitungen stehen können.

Die Gültigkeit der chiralen Symmetrie fordert nun

$$\Delta = l + n - 2 \geq 0. \quad (10.3)$$

Dies bedeutet, dass wir eine Reihenentwicklung in $1/\Lambda$ durchführen (es tauchen nur negative Potenzen von Λ auf) und somit einen geeigneten Entwicklungsparameter haben.

10.4 Die skalierten Parameter

Aus oben notierter Form ergeben sich unmittelbar die Umrechnungsformeln für die ursprünglichen Parameter. Die Annahme der *Natürlichkeit* dieser Parameter ist, dass die skalierten Parameter von der Ordnung 1 sind. Um ein quantitativ strenger gefasstes Kriterium zu haben, wollen wir einen Satz von Kopplungskonstanten als natürlich bezeichnen, wenn

- die Absolutbeträge der einzelnen skalierten Parameter ≈ 1 sind und
- das Verhältnis von größtem zu kleinstem Wert kleiner oder gleich 10 ist.

Bei der Kraft PC-LA [Nik92] sind alle Parameter natürlich bis auf den sehr geringen Wert von α_{TS} und den zu großen Werten von γ_{TS} und γ_{TV} . Die Summe der beiden letzten Parameter wiederum ist natürlich. In der Originalarbeit [Nik92] wurde daraus geschlossen, dass ihre Differenz in der Anpassung der Parameter nicht richtig angepasst werden konnte.

Auf der anderen Seite haben wir oben gesehen, dass die nichtlinearen Parameter bei PC-LA in einem etwas seltsamen Minimum der χ^2 -Landschaft liegen. Insofern ist nicht klar, inwieweit die Werte dieser Parameter in der χ^2 -Minimierung eine signifikante Änderung erhalten hätten können.

In Tabelle 10.1 sehen wir die ursprünglichen Parameter der neuen Kräfte PC-F1 bis PC-F4 mit ihren Dimensionen und die skalierten Werte. Die Werte (die absoluten Werte und nicht das Vorzeichen sind entscheidend) von PC-F1 streuen um den Wert 1, die größte Abweichung findet sich bei γ_S . Das Verhältnis des größten Wertes zum kleinsten Wert beträgt 8.92 und erfüllt damit unsere Definition von Natürlichkeit. Das χ^2 pro Freiheitsgrad ist für diesen Satz an Kopplungskonstanten am geringsten und zeigt, dass diese Kraft die Kraft mit der größten physikalischen Relevanz ist.

Die Kraft PC-F2, die einen zusätzlichen isovektoriellen skalaren Term mit dem Parameter α_{TS} enthält, besitzt ein Verhältnis von 67.5 zwischen größtem und kleinstem Wert. Der Grund dafür ist der sehr kleine Wert dieses neuen Parameters. Dieses Ergebnis unterstützt gewissermaßen die geringe Rolle des δ -Mesons in Ein-Boson-Austausch-Potenzialen (es hat nach [Mac86] die Masse 983 MeV und eine Kopplungskonstante im Bereich von 2). Damit ist PC-F2 nicht natürlich.

Die Kraft PC-F3 wurde gegenüber der Kraft PC-F1 mit einem nichtlinearen Term in der isovektoriell-vektoriellen Dichte erweitert. Der dazu korrespondierende Parameter γ_{TV} ist sehr groß und unnatürlich, was zu dem großen Verhältnis von 264.7 führt.

Die Kraft PC-F4, die vier lineare 4-Fermionen-Terme und 4 Ableitungsterme enthält, besitzt ein Verhältnis von 103.8 und erfüllt damit nicht unsere Anforderungen an Natürlichkeit eines Parametersatzes. Diese Wechselwirkung sollte allerdings in zukünftigen Untersuchungen weiterentwickelt werden, da ihr Isektorkanal eine große Flexibilität besitzt. Um die zusätzlichen Freiheitsgrade zu fixieren, muss dazu allerdings, wie wir in Kapitel 6 gesehen hatten, die Auswahl der Observablen erweitert bzw. verändert werden.

Wir haben mit dem Parametersatz PC-F1 das Ziel, ausschließlich natürliche Kopplungskonstanten zu haben, erreicht.

10.5 Schlußfolgerungen

Die Werte der skalierten Parameter für die neue Kraft PC-F1 demonstrieren, dass QCD Scaling für das Punktkopplungsmodell gilt. Dies bildet eine Brücke zwischen der Theorie der starken Wechselwirkung, der Quantenchromodynamik, und effektiven Modellen für Kernstruktur, deren Aufgabe es ist, den Niederenergielimes der QCD zu modellieren bzw. zu beschreiben. Die Entwicklung der NN-Wechselwirkung in eine Potenzreihe erscheint geeignet zur Parametrisierung der effektiven Nukleon-Nukleon Kraft.

Auf der anderen Seite sollten in dieser Entwicklung alle bis zu einer gewissen Ordnung vorkommenden Terme natürliche Parameter haben. Parameter, die nahe Null sind, deuten auf eine Symmetrie hin. Falls keine solche Symmetrie existiert (d.h. nicht, dass sie nur nicht bekannt ist), bedeutet das, dass noch keine Strategie gefunden ist, die den Wert dieser Kopplungskonstanten angemessen festlegt. Weiterhin sollte der Einfluss von Termen höherer Ordnung in der Entwicklung unterdrückt sein. Untersuchungen von Furnstahl et al. deuten auch genau darauf hin.

Noch eine weitere interessante Konsequenz ergibt sich aus obiger Analyse. Die Parameter der effektiven Mean-Field-Modelle absorbieren neben den kurzreichweitigen Korrelationen und den inneren Freiheitsgraden der Nukleonen vernachlässigte Vielkörpereffekte sowie die vernachlässigte Vakuum polarisation. Aus diesem Grund ist von vorne herein nicht zu erwarten, dass die Kopplungs-

Parameter	$c_{ln}(\text{PC} - \text{F1})$	$c_{ln}(\text{PC} - \text{F2})$	$c_{ln}(\text{PC} - \text{F3})$	$c_{ln}(\text{PC} - \text{F4})$	Ordnung in Λ
α_S	-1.641	-1.641	-1.641	-1.641	Λ^0
β_S	1.443	1.443	1.443	1.442	Λ^{-1}
γ_S	-2.695	-2.701	-2.696	-2.700	Λ^{-2}
δ_S	-1.061	-1.054	-1.060	-1.055	Λ^{-2}
α_{TS}	–	0.040	–	-0.101	Λ^0
γ_{TS}	–	–	–	–	Λ^{-2}
δ_{TS}	–	–	–	-1.134	Λ^{-2}
α_V	1.109	1.109	1.109	1.109	Λ^0
γ_V	-0.360	-0.355	-0.359	-0.357	Λ^{-2}
δ_V	-0.302	-0.309	-0.304	-0.308	Λ^{-2}
α_{TV}	0.593	0.555	0.607	0.674	Λ^0
γ_{TV}	–	–	-80.470	–	Λ^{-2}
δ_{TV}	-0.422	-0.612	-0.404	0.026	Λ^{-2}
# c_{ln}	9	10	10	11	
# natürlich	9	9	9	9	
max / min	8.92	67.5	264.7	103.8	
χ_{df}^2	2.75	2.80	2.82	2.89	

Tabelle 10.1: Skalierte Kopplungskonstanten für die vier Parametersätze PC-F1 bis PC-F4 des Punktkopplungsmodells.

konstanten in der naiven dimensional Analysis natürliche Werte annehmen. Die Natürlichkeitsforderung ist aber, wie wir gesehen haben, bei PC-F1 erfüllt. Dies ist ein interessantes Ergebnis, das auf einen möglichen Zusammenhang zwischen den Modellen für Kernstruktur und denen für NN-Streuung im Vakuum hindeutet.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein relativistisches Punktkopplungsmodell und seine Anwendbarkeit auf Probleme in der Kernstrukturphysik untersucht. Der Ansatz ist in der Kernstrukturphysik recht neu. Aus diesem Grund war es ein wichtiges Ziel festzustellen, wie gut sich das Modell zur Beschreibung von Grundzuständen von Kernen eignet. Während sich Modelle wie das Relativistic-Mean-Field-Modell mit Mesonenaustausch und Hartree-Fock-Rechnungen mit Skyrme-Kräften in vielen detaillierten Untersuchungen bewährt haben, musste dies für das relativistische Punktkopplungsmodell erst gezeigt werden.

Als erster Schritt war eine sorgfältige Anpassung der Kopplungskonstanten des Modells erforderlich. Um möglichst einen optimalen Satz an Parametern zu erhalten, wurden verschiedene Optimierungsverfahren getestet und angewandt. Die Parameter der effektiven Mean-Field-Modelle sind untereinander stark korreliert. Zusammen mit der Nichtlinearität der Modelle führt diese Tatsache auf die Existenz vieler lokaler Minima der zu minimierenden χ^2 -Funktion, was eine flexible Anpassungsmethode erfordert. Als besonders fruchtbar erwies sich eine Kombination aus der Methode *Bevington-Curved-Step* mit dem Monte-Carlo-Algorithmus *simulated annealing*.

Durch die Anpassung der Kraft PC-F1 an experimentelle Daten in einem χ^2 -Fit ist es gelungen, mit dem Punktkopplungsmodell eine Vorhersagekraft zu erreichen, die der etablierter RMF-FR- und SHF-Modelle gleicht. Dies ist nicht selbstverständlich, da die Modelle eine deutlich unterschiedliche Dichteabhängigkeit der Potentiale besitzen. Weiterhin haben wir gesehen, dass die Anpassungsprozedur der Parameter eine komplizierte Aufgabe darstellt und noch in mancher Hinsicht ausgearbeitet und verbessert werden kann.

Das Punktkopplungsmodell mit der Kraft PC-F1 verhält sich für viele Observablen sehr ähnlich wie das RMF-FR-Modell. Dies betrifft die Beschreibung der *bulk properties* von symmetrischer Kernmaterie, Neutronenmaterie, Bindungsenergien, Spin-Bahn-Aufspaltungen, Observablen des nuklearen Formfaktors, Deformationseigenschaften von Magnesium-Isotopen, die Spaltbarriere von ^{240}Pu sowie die Vorhersage der Schalenstruktur von überschweren Elementen. Dabei werden aber insbesondere Radien besser beschrieben als mit den RMF-FR-Kräften. Oberflächendicken werden, im Einklang mit dem RMF-FR-Modell, als zu klein vorhergesagt.

Deutliche Unterschiede treten bei Deformationsenergien einiger Kerne auf (sie sind größer als beim RMF-FR-Modell und oft kleiner als die von dem SHF-Modell vorhergesagten) sowie bei Dichtefluktuationen in Kernen. Die vektoriellen Dichten der Nukleonen oszillieren nicht so stark wie die des RMF-Modells mit Mesonenaustausch, was auf die fehlende Faltung der nukleonischen Dichten zurückgeführt werden kann.

Im Vergleich zum Skyrme-Hartree-Fock-Modell ergeben sich deutliche Unterschiede in der Beschreibung von symmetrischer Kernmaterie und Neutronenmaterie. Relativistische Modelle sagen eine höhere Sättigungsdichte und Bindungsenergie vorher. Die vorhergesagte Asymmetrienergie ist deutlich größer als die Werte des SHF- bzw. Liquid-Drop-Modells. Die Beschreibung von Neutronenmaterie weicht stark von modernen Rechnungen [Fri81] und den Vorhersagen von Hartree-Fock-Rechnungen mit der Skyrme-Kraft SLy6 ab.

Die Vorhersagen zu überschweren Kernen stimmen in Bezug auf magische Zahlen mit anderen

relativistischen Modelle überein: Der doppelt-magische, überschwere Kern besitzt $Z = 120$ Protonen und $N = 172$ Neutronen. Im Einklang mit anderen selbstkonsistenten Vorhersagen zeigt seine Baryondichte eine Semi-Blasenstruktur. Die Spaltbarrieren der Kerne $^{292}120$ und $^{298}114$ sind von ähnlicher Größenordnung wie die von anderen untersuchten RMF-Kräften. Die Lage des isomeren Zustandes im symmetrischen Spaltpfad liegt beim RMF-PC-Modell sehr tief, was auf eine geringe Oberflächenenergie schließen lässt. Die deutlichen Unterschiede zu den Vorhersagen von Hartree-Fock-Rechnungen mit Skyrme-Kräften zeigen, dass sich gewisse Eigenschaften der Modelle besonders stark bei überschweren Elementen auswirken. Überschwere Elemente sind ein sensibles Testfeld für die Modelle. Hier bedarf es dringender Untersuchungen, um längerfristig zuverlässige Vorhersagen machen zu können.

Besonders in den Rechnungen von Bindungsenergien in Isotopen- und Isotonenkettens sowie für Neutronenmaterie zeigt das Punktkopplungsmodell Schwächen im isovektoriellen Kanal der effektiven Wechselwirkung, die denen des RMF-FR-Modells ähneln. Dies bestätigt den Verdacht, dass dieser Kanal modifiziert werden muss. Deshalb wurden mehrere Varianten des RMF-PC-Modells mit Erweiterungen im isovektoriellen Kanal getestet. Ein interessantes Ergebnis der Untersuchungen zu den erweiterten Parametersätzen des Punktkopplungsmodells ist, dass sich eine Anpassung zusätzlicher Terme im isovektoriellen Kanal der Wechselwirkung mit den in dieser Arbeit verwendeten Fitstrategien nicht bewerkstelligen lässt. Andererseits zeigen die Modelle gerade in dieser Hinsicht noch unverstandene Schwächen. Dies zeigt, dass in der Zukunft eine Erweiterung der Fitstrategie wichtig wird. Kerne mit großem Isospin und z.B. Neutronenmaterie könnten hier Verwendung finden. Neue experimentelle Daten zu exotischen Kernen werden hierbei von großem Nutzen sein.

Untersuchungen zur Natürlichkeit der angepassten Kopplungskonstanten mit Hilfe der naiven dimensional Analysis haben gezeigt, dass die Kraft PC-F1 dieses Kriterium erfüllt. Dies ist besonders interessant, da bei dieser Kraft alle Kopplungskonstanten frei im Fit variierbar waren. Die Kopplungskonstanten des Modells bzw. die korrespondierenden Terme absorbieren auch Vielkörpereffekte, weshalb es interessant ist, dass dieses Kriterium anwendbar ist. Parametersätze für erweiterte Punktkopplungsmodelle erfüllen bisher nicht das Kriterium der Natürlichkeit, was noch einmal ihre ungenügende Fixierungsmöglichkeit in den verwendeten Fitstrategien unterstreicht.

Die Struktur des relativistischen Punktkopplungsmodells ermöglicht es, die Austauschsterme der 4-, 6- und 8-Fermionen-Terme als direkte Terme umzuschreiben. Diese Möglichkeit ebnet den Weg für relativistische Hartree-Fock-Rechnungen für endliche Kerne, die numerisch kaum aufwendiger sind als die Rechnungen mit der Hartree-Version des Modells. Dabei bedürfen die Ableitungsterme gesonderter Behandlung. Allerdings muss dazu auch der Modellansatz erneut überdacht werden: das Pion bzw. die dazu korrespondierenden Terme sollten Bestandteil dieser Formulierung sein und durch die Austauschsterme Beiträge zu den mittleren Potenzialen liefern.

Relativistische Hartree-Fock-Rechnungen mit dem Punktkopplungsmodell werden es ermöglichen, den Zusammenhang zwischen relativistischen und nichtrelativistischen Hartree-Fock-Modellen systematisch und im Detail zu studieren. Längerfristig können diese Studien zu einer quantitativen Verbesserung der Modelle und damit einhergehend zu ihrem klaren Verständnis führen.

Die mikroskopische und selbstkonsistente Beschreibung von Atomkernen ist eine faszinierende und spannende Herausforderung, sie anzunehmen war Ziel und Aufgabe dieser Arbeit.

Anhang A

Die Bewegungsgleichungen in verschiedenen Symmetrien

In den folgenden beiden Abschnitten wollen wir die Bewegungsgleichungen des Punktkopplungsmodells in sphärischer und axialer Symmetrie darstellen. Bewegungsgleichungen für den triaxalen Fall und ohne Symmetriebeschränkung finden sich z.B in [Rut99]. Da das RMF-PC-Modell keine expliziten mesonischen Freiheitsgrade enthält, ist es ausreichend, die Gleichungen für die nukleonischen Wellenfunktionen zu betrachten. Weiterhin diskutieren wir ausschließlich zeitumkehrinvariante Systeme.

A.1 Sphärische Symmetrie

Die Dirac-Spinoren

$$\psi_i = (\psi_i^\eta) = \begin{pmatrix} \psi_i^+ \\ \psi_i^- \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

lassen sich, ausgedrückt durch Kugelkoordinaten (r, θ, ϕ) in einen Radial- und einen Winkelanteil aufspalten:

$$\psi_i(r, \psi, \theta) = \sqrt{4\pi} \begin{pmatrix} \phi_{\eta_i \kappa_i}^+(r) \chi_{\kappa_i m_i}(\phi, \theta) \\ i \phi_{\eta_i \kappa_i}^-(r) \chi_{\kappa_i m_i}(\phi, \theta) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Wie wir gleich sehen werden, sind alle Potentiale, die auf die Radialteile der Wellenfunktionen wirken, reell, so dass sie reell gewählt werden können. Der vollständige Satz von Quantenzahlen, der durch i charakterisiert wird, ist $[n_i, \kappa_i, m_i]$. Während n_i als Anzahl der radialen Knoten interpretiert werden kann, ergeben sich die beiden anderen Quantenzahlen durch die Eigenwertgleichungen

$$\hat{K} \psi_i = -\kappa_i \psi_i \quad (\text{A.3})$$

$$\hat{J}_z \psi_i = m_i \psi_i. \quad (\text{A.4})$$

Dabei ist $\hat{K} = \gamma_0 (2\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} + 1)$ der Spin-Bahn Operator, $\hat{\vec{S}}$ der Spin-Operator und \hat{J}_z die z -Komponente des Gesamtdrehimpulsoperators $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}/2$, welcher sich aus dem Spin-Operator und dem Operator des Bahndrehimpulses $\hat{\vec{L}}$ zusammensetzt.

Die orthonormalen Kugelspinoren $\chi_{\kappa m}$ sind definiert als

$$\chi_{\kappa m} = \sum_{m_s = \pm \frac{1}{2}} (l \frac{1}{2} j | m - m_s m_s s) Y_{l, m - m_s}(\phi, \theta) \chi_{m_s}. \quad (\text{A.5})$$

Dabei wurden die Einheitsspinoren $\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ definiert. Der Zusammenhang zwischen der Quantenzahl κ und denen des Bahndrehimpulses und des Gesamtdrehimpulses, l und j , ist

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2}, \quad l = j + \frac{1}{2} \frac{\kappa}{|\kappa|}. \quad (\text{A.6})$$

Aus dem Überlappintegral für zwei Dirac-Spinoren

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{\kappa_i \kappa_j} \delta_{m_i m_j} \delta_{\tau_i \tau_j} 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \sum_{\eta} \phi_{n_i \kappa_i \tau_i}^{\eta} \phi_{n_j \kappa_j \tau_j}^{\eta} \quad (\text{A.7})$$

(τ_k bezeichnet Protonen- bzw. Neutronenzustände) ergibt sich die Normierung für die radialen Anteile der Wellenfunktionen zu gleichem κ und τ :

$$4\pi \int_0^\infty r^2 dr \sum_{\eta} \phi_{n_i \kappa \tau}^{\eta} \phi_{n_j \kappa \tau}^{\eta} = \delta_{n_i n_j}. \quad (\text{A.8})$$

Die radialen nukleonischen Dichten (vektorielle und skalare Dichte) ergeben sich zu¹

$$\begin{aligned} \rho_V(r) &= \sum_i (2j_i + 1) \sum_{\eta} \phi_i^{\eta}(r) \phi_i^{\eta}(r), \\ \rho_S(r) &= \sum_i (2j_i + 1) \sum_{\eta} \eta \phi_i^{\eta}(r) \phi_i^{\eta}(r). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Das skalare Potenzial V_S und das vektorielle Potenzial V_V^2 hängen nur von der Radialkoordinate r ab. Sie bestehen im RMF-PC-Modell aus Potenzen und Ableitungen von (A.9). Nach Transformation des kinetischen Terms auf Kugelkoordinaten [Rut99] erhält man schließlich die Gleichungen für die zwei Radialteile der Dirac-Spinoren ($\eta = +/ -$)

$$\left(-\eta \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right) + \frac{1}{r} \kappa_i \right) \phi_i^{-\eta}(r) + \left(\eta m + \eta V_S(r) + V_V(r) \right) \phi_i^{\eta}(r) = \epsilon_i \phi_i^{\eta}. \quad (\text{A.10})$$

A.2 Axiale Symmetrie

Bei Rechnungen in axialer Symmetrie ist es von Vorteil, Zylinderkoordinaten (z, ρ, ϕ) einzuführen. Der Gesamtdrehimpuls ist hier keine gute Quantenzahl mehr, aber die z -Komponente \hat{J}_z des Gesamtdrehimpulsoperators vertauscht mit dem Hamiltonoperator:

$$\hat{J}_z \psi_i = m_i \psi_i. \quad (\text{A.11})$$

Eine weitere Quantenzahl entsteht durch den Paritätsoperator \hat{P} :

$$\hat{P} \psi_i = \pi_i \psi_i. \quad (\text{A.12})$$

Von den Wellenfunktionen lässt sich ein nur vom Winkel ϕ abhängiger Teil abspalten:

$$\psi_i(z, \rho, \phi) = (\psi_i^{\eta\sigma}(z, \rho, \phi)) = \begin{pmatrix} \phi_{\eta_i m_i \pi_i}^{++}(z, \rho) \exp\left(i\left(m_i - \frac{1}{2}\right)\phi\right) \\ \phi_{\eta_i m_i \pi_i}^{+-}(z, \rho) \exp\left(i\left(m_i + \frac{1}{2}\right)\phi\right) \\ \phi_{\eta_i m_i \pi_i}^{-+}(z, \rho) \exp\left(i\left(m_i - \frac{1}{2}\right)\phi\right) \\ \phi_{\eta_i m_i \pi_i}^{--}(z, \rho) \exp\left(i\left(m_i + \frac{1}{2}\right)\phi\right) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

¹Pairing wird hierbei vernachlässigt, die Summen laufen über alle besetzten Zustände.

²Dies gilt natürlich für die isoskalaren und isovektoriellen Potenziale.

Für die einzelnen Spinorkomponenten erhalten wir die Eigenwertgleichungen

$$\hat{L}_z \psi_i^{\eta\sigma} = (m_i - \frac{\sigma}{2}) \psi_i^{\eta\sigma}. \quad (\text{A.14})$$

Die z -Projektion der ersten und dritten Komponente weicht von der der anderen beiden Komponenten um 1 ab. Aus dem Überlappintegral von zwei Dirac-Spinoren in axialer Symmetrie,

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{m_i m_j} \delta_{\pi_i \pi_j} \delta_{\tau_i \tau_j} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} \rho d\rho \sum_{\eta, \sigma} \phi_{\eta_i m_i \pi_i \tau_i}^{\eta\sigma}(\rho, z) \phi_{\eta_j m_j \pi_j \tau_j}^{\eta\sigma}(\rho, z), \quad (\text{A.15})$$

ergibt sich die Normierungsbedingung für den nur von z und ρ abhängigen Teil der Wellenfunktion mit gleichen Quantenzahlen m, π, τ :

$$2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} \rho d\rho \sum_{\eta, \sigma} \phi_{n_i m \pi \tau}^{\eta\sigma}(\rho, z) \phi_{n_j m \pi \tau}^{\eta\sigma}(\rho, z) = \delta_{n_i n_j}. \quad (\text{A.16})$$

Wie schon in Kapitel 2 erwähnt, muß im Falle von zeitungkehrinvarianten Systemen jeweils nur einer der Partner³ berechnet werden. Der dazu konjugierte Zustand kann daraus durch Anwendung des Zeitumkehroperators berechnet werden.

Die skalare und vektorielle Dichte schreiben sich in axialer Symmetrie als

$$\begin{aligned} \rho_S &= \sum_i \sum_{\eta\sigma} \eta \phi_i^{\eta\sigma*} \phi_i^{\eta\sigma}, \\ \rho_V &= \sum_i \sum_{\eta\sigma} \phi_i^{\eta\sigma*} \phi_i^{\eta\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Die Diracgleichung für die reellen $\phi_i^{\eta\sigma}$ lautet

$$\begin{aligned} \eta \left[\partial_\rho + \sigma \left(m_i + \frac{\sigma}{2} \right) \frac{1}{\rho} \right] \phi_i^{-\eta - \sigma} + \eta \sigma \partial_z \phi_i^{-\eta \sigma} + \\ + \left[\eta m + \eta V_S + V_V \right] \phi_i^{\eta\sigma} - \eta \sigma V_{\phi, i} \phi_i^{-\eta - \sigma} = \epsilon_i \phi_i^{\eta\sigma} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

³Dazu kann man z.B. den Zustand mit positiver Gesamtdrehimpulsprojektion wählen.

Anhang B

Fierz-Transformationen

B.1 Fierz-Transformationen für Isospinoren

Die Fierz-Transformationen dieses Abschnittes gelten für in allen Indices total symmetrisierte Ausdrücke. Für nicht symmetrisierte Ausdrücke können Zusatzterme auftreten, die bei der totalen Symmetrisierung verschwinden¹.

B.1.1 4-Fermionen-Terme

Im Isospinraum gibt es für 4 Fermionen genau zwei Kombinationen, die einen Skalar im Isoraum bilden, nämlich (1,1) und $(\vec{\tau}, \vec{\tau})$. Die Fierz-Transformationen sind

$$\sum_{\alpha,\beta} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\beta)(\bar{\psi}_\beta \psi_\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \psi_\beta) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} (\bar{\psi}_\alpha \vec{\tau} \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \vec{\tau} \psi_\beta) \quad (\text{B.1})$$

und

$$\sum_{\alpha,\beta} (\bar{\psi}_\alpha \vec{\tau} \psi_\beta)(\bar{\psi}_\beta \vec{\tau} \psi_\alpha) = \frac{3}{2} \sum_{\alpha,\beta} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \psi_\beta) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} (\bar{\psi}_\alpha \vec{\tau} \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \vec{\tau} \psi_\beta). \quad (\text{B.2})$$

B.1.2 6-Fermionen-Terme

Wir betrachten hier und im nächsten Abschnitt nur die Transformationen der isoskalar-skalaren 6- bzw. 8-Fermionen-Terme.

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\beta)(\bar{\psi}_\beta \psi_\gamma)(\bar{\psi}_\gamma \psi_\alpha) &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \psi_\beta)(\bar{\psi}_\gamma \psi_\gamma) \\ &+ \frac{3}{4} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} (\bar{\psi}_\alpha \vec{\tau} \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \vec{\tau} \psi_\beta)(\bar{\psi}_\gamma \psi_\gamma). \end{aligned}$$

B.1.3 8-Fermionen-Terme

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\beta)(\bar{\psi}_\beta \psi_\gamma)(\bar{\psi}_\gamma \psi_\delta)(\bar{\psi}_\delta \psi_\alpha) &= \frac{1}{8} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\beta)(\bar{\psi}_\beta \psi_\gamma)(\bar{\psi}_\gamma \psi_\delta)(\bar{\psi}_\delta \psi_\alpha) \\ &+ \frac{3}{4} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} (\bar{\psi}_\alpha \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \psi_\beta)(\bar{\psi}_\gamma \vec{\tau} \psi_\gamma)(\bar{\psi}_\delta \vec{\tau} \psi_\delta) \\ &+ \frac{1}{8} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} [(\bar{\psi}_\alpha \vec{\tau} \psi_\alpha)(\bar{\psi}_\beta \vec{\tau} \psi_\beta)][(\bar{\psi}_\gamma \vec{\tau} \psi_\gamma)(\bar{\psi}_\delta \vec{\tau} \psi_\delta)]. \end{aligned}$$

¹Dies wurde im Verlauf dieser Arbeit nicht explizit untersucht.

B.2 Fierz-Transformationen für Dirac-Spinoren

B.2.1 4-Fermionen-Terme

Die Transformationen sind aus [Nac86] entnommen. Als Basiselemente kommen die folgenden Bilinearformen in Frage:

- S: $(\bar{\psi}_1\psi_2)(\bar{\psi}_3\psi_4)$
- V: $(\bar{\psi}_1\gamma_\mu\psi_2)(\bar{\psi}_3\gamma^\mu\psi_4)$
- T: $(\bar{\psi}_1\sigma_{\mu\nu}\psi_2)(\bar{\psi}_3\sigma^{\mu\nu}\psi_4)$
- A: $(\bar{\psi}_1\gamma_\mu\gamma^5\psi_2)(\bar{\psi}_3\gamma^\mu\gamma^5\psi_4)$
- P: $(\bar{\psi}_1\gamma^5\psi_2)(\bar{\psi}_3\gamma^5\psi_4)$

Die Koeffizienten c_{ij} der Transformation

$$\mathcal{L}_i(\bar{\psi}_1, \psi_4, \bar{\psi}_3, \psi_2) = \sum_j c_{ij} \mathcal{L}_j(\bar{\psi}_1, \psi_2, \bar{\psi}_3, \psi_4), \quad (\text{B.3})$$

wobei $i, j = \text{S, V, T, A, P}$ gilt, sind in Tabelle B.1 notiert.

i/j	S	V	T	A	P
S	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$
V	-1	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	1
T	-3	0	$\frac{1}{2}$	0	-3
A	1	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	-1
P	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$

Tabelle B.1: Koeffizienten c_{ij} der Fierz-Transformationen für 4-Fermionen-Terme.

B.2.2 6-Fermionen-Terme

Die Koeffizienten und Basiselemente für die Transformation der 6-Fermionen-Terme sind in tabellarischer Form für den skalaren Fall angegeben [Mar01]. Die Dirac-Strukturen, die sich in den einzelnen Summanden zwischen den Wellenfunktionen befinden, sind jeweils durch ein \otimes voneinander getrennt. Hier sowie im Fall von 8 Fermionen beziehen sich die Transformationen auf total symmetrisierte Ausdrücke.

B.2.3 8-Fermionen-Terme

Die Basiselemente und Koeffizienten sind für den skalaren 4-Fermionen-Term in tabellarischer Form angegeben [Mar01].

Term	Koeffizient
$\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$	$\frac{1}{16}$
$\mathbf{1} \otimes \gamma_5 \otimes \gamma_5$	$\frac{3}{16}$
$\mathbf{1} \otimes \gamma_\mu \otimes \gamma^\mu$	$\frac{3}{16}$
$\mathbf{1} \otimes \gamma_5 \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma^\mu$	$-\frac{3}{16}$
$\mathbf{1} \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\mu\nu}$	$\frac{3}{32}$
$\gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma_\nu \otimes \gamma_5 \sigma^{\mu\nu}$	$-\frac{3i}{8}$
$\gamma_5 \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \gamma_5 \sigma^{\mu\nu}$	$\frac{3}{32}$

Tabelle B.2: Koeffizienten für die Fierz-Transformation des skalaren total symmetrisierten 6-Fermionen-Terms.

Term	Koeffizient
$\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$	$\frac{1}{64}$
$\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \gamma_5 \otimes \gamma_5$	$\frac{3}{32}$
$\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \gamma_\mu \otimes \gamma^\mu$	$\frac{3}{32}$
$\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \gamma_5 \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma^\mu$	$-\frac{3}{32}$
$\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\mu\nu}$	$\frac{3}{64}$
$\mathbf{1} \otimes \gamma_5 \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \gamma_5 \sigma^{\mu\nu}$	$\frac{3}{32}$
$\mathbf{1} \otimes \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma_\nu \otimes \gamma_5 \sigma^{\mu\nu}$	$-\frac{3i}{8}$
$\gamma_5 \otimes \gamma_5 \otimes \gamma_5 \otimes \gamma_5$	$\frac{1}{64}$
$\gamma_5 \otimes \gamma_5 \otimes \gamma_\mu \otimes \gamma^\mu$	$\frac{1}{32}$
$\gamma_5 \otimes \gamma_5 \otimes \gamma_5 \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma^\mu$	$-\frac{1}{32}$
$\gamma_5 \otimes \gamma_5 \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\mu\nu}$	$\frac{3}{64}$
$\gamma_5 \otimes \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma_\nu \otimes \sigma^{\mu\nu}$	$-\frac{1i}{8}$
$\gamma_\mu \otimes \gamma^\mu \otimes \gamma_\nu \otimes \gamma^\nu$	$\frac{1}{64}$
$\gamma_\mu \otimes \gamma^\mu \otimes \gamma_5 \gamma_\nu \otimes \gamma_5 \gamma^\nu$	$-\frac{3}{32}$
$\gamma_\mu \otimes \gamma^\nu \otimes \gamma_5 \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma^\nu$	$\frac{1}{16}$
$\gamma_\lambda \otimes \gamma^\lambda \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\mu\nu}$	$\frac{3}{64}$
$\gamma_\lambda \otimes \gamma^\mu \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\lambda\nu}$	$-\frac{1}{16}$
$\gamma_5 \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma^\mu \otimes \gamma_5 \gamma_\nu \otimes \gamma_5 \gamma^\nu$	$\frac{1}{64}$
$\gamma_5 \gamma_\lambda \otimes \gamma_5 \gamma^\lambda \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\mu\nu}$	$-\frac{3}{64}$
$\gamma_5 \gamma_\lambda \otimes \gamma_5 \gamma^\mu \otimes \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\lambda\nu}$	$\frac{1}{16}$
$\sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\mu\nu} \otimes \sigma_{\kappa\lambda} \otimes \sigma^{\kappa\lambda}$	$\frac{3}{256}$
$\sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\lambda\nu} \otimes \sigma_{\lambda\kappa} \otimes \sigma^{\mu\kappa}$	$-\frac{1}{64}$

Tabelle B.3: Koeffizienten für die Fierz-Transformation des skalaren total symmetrisierten 8-Fermionen-Terms.

Anhang C

Parametersätze mit Coulomb-Austauschterm in Slater-Näherung

Die Tabelle C.1 zeigt einen Satz mit Coulomb-Austauschterm, der ausgehend von der Kraft NL-Z2 angepaßt wurde. Das totale χ^2 dieses Parametersatzes, der hier NL-ZWCEX¹ genannt wird, ist 128.6. Die korrespondierenden Paarkraftstärken sind $V_p = -332 \text{ MeV fm}^3$, $V_n = -321 \text{ MeV fm}^3$. In Tabelle C.2 sind vier Kräfte für das Punktkopplungsmodell, PC-F1WCEX bis PC-F4WCEX aufgelistet. Ausgangsbasis für diese Parameter-Anpassungen waren die Kräfte PC-F1 bis PC-F4. Die totalen χ^2 dieser Parametersätze sind 102.8, 102.5, 102.9 und 102.5.

¹WCEX: With Coloumb EXchange

	NL-ZWCEX
M [MeV]	938.9
m_σ [MeV]	493.184
m_ω [MeV]	780.0
m_ρ [MeV]	763.0
g_σ	10.1369
g_ω	12.9094
g_ρ	4.46933
b_2 [fm ⁻¹]	-13.7561
b_3	-41.2837
c_3	0.000

Tabelle C.1: Der Satz NL-ZWCEX. Die Massen der ω - und ρ -Mesonen wurde bei diesem Satz nicht gefittet sondern auf den angegebenen Wert fixiert. Die Paarkraftstärken sind $V_p = -332 \text{ MeV fm}^3$, $V_n = -321 \text{ MeV fm}^3$.

Parameter	PC-F1WCEX	PC-F2WCEX	PC-F3WCEX	PC-F4WCEX	Dimension
α_S	-14.9343	-14.9340	-14.9345	-14.9341	fm ²
β_S	23.0033	23.0029	23.0040	23.0036	fm ⁵
γ_S	-66.768	-66.815	-66.7336	-66.7803	fm ⁸
δ_S	-0.6382	-0.6359	-0.6375	-0.6333	fm ⁴
α_V	10.0995	10.0998	10.0992	10.0995	fm ²
γ_V	-8.836	-8.847	-8.854	-8.849	fm ⁸
δ_V	-0.1811	-0.1829	-0.1823	-0.1856	fm ⁴
α_{TS}	0.0	-0.121	0.0	-0.118	fm ²
δ_{TS}	0.0	0.0	0.0	-0.0984	fm ⁴
α_{TV}	1.330	1.432	1.369	1.4313	fm ²
γ_{TV}	0.0	0.0	-131.9	0.0	fm ⁸
δ_{TV}	-0.081	-0.088	-0.058	0.016	fm ⁴
V_P	-321	-321	-322	-321	MeV fm ³
V_N	-309	-309	-309	-309	MeV fm ³

Tabelle C.2: Die Kopplungskonstanten von PC-F1WCEX bis PC-F4WCEX. Die totalen χ^2 sind 102.8, 102.5, 102.9, 102.5.

Literaturverzeichnis

- [Asp] A. Aspect, J. Dalibard und G. Roger, Phys. Rev. Lett. **47** (1982) 1804, A. Aspect, P. Grangier und G. Roger, Phys. Rev. Lett. **47** (1981) 460, **49** (1982) 91, A. Aspect, J. Dalibard und G. Roger, *ibid.* **49** (1982) 1804
- [Arm00] P. Armbruster, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 2000.50 (2000) 411
- [Aud95] G. Audi, A. H. Wapstra, Nucl. Phys. A **595** (1995) 409
- [Aue86] N. Auerbach, Alfred S. Goldhaber, Mikkel B. Johnson, L. Dudley Miller und A. Picklesimer, Phys. Lett. B **182** (1986) 221
- [Bae94] John Baez und Javier P. Muniain, *Gauge Fields, Knots and Gravity*, World Scientific, 1994
- [Bai87] J. J. Bai, R. Y. Cusson, J. Wu, P.-G. Reinhard, H. Stoecker, W. Greiner, M. R. Strayer, Z. Phys. A **326** (1987) 269
- [Bar57] J. Bardeen, L. Cooper und L. Schrieffer, Phys. Rev **108** (1975) 1175
- [Bec01] Ch. Beckmann, P. Papazoglou, D. Zschiesche, S. Schramm, H. Stoecker, W. Greiner, nucl-th/0106014
- [Bei74] M. Beiner, H. Flocard, M. Veneroni und P. Quentin, Physica Scripta **10A** (1974) 84
- [Ben96] E. Bender, K. W. Schmid, A. Faessler, Nucl. Phys. A **596** (1996) 1
- [Ben97] M. Bender, *Exotische Atomkerne im Skyrme-Hartree-Fock Modell*, Dissertation, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 1997
- [Ben98] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, W. Greiner, Phys. Rev. C **58** (1998) 2126-2132
- [Ben99] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, and W. Greiner Phys.Rev. C **60**, 34304 (1999)
- [Ben01] M. Bender, W. Nazarewicz, P.-G. Reinhard, Phys. Lett. B **515** (2001) 42-48
- [Ber96] J.-F. Berger, L. Bitaud, J. Dechargé, M. Girod, and S. Peru-Dessenfants, Proceedings of the International Workshop XXXIV on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations, Hirschegg, Austria, January 1996. GSI, Darmstadt, 1996.
- [Ber01] J.-F. Berger, L. Bitaud, J. Dechargé, M. Girod, and K. Dietrich Nucl. Phys. **A685** (2001) 1c.
- [Bet36] H. A. Bethe und R. F. Bacher, Rev. Mod. Phys. **8** (1936) 82

- [Bev92] Philip R. Bevington, D. Keith Robinson, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*, WCB McGraw-Hill, second edition
- [Bjo64] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, Mc-Graw-Hill, New-York 1964
- [Bjo65] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistic Quantum Field Theory*, Mc-Graw-Hill, New-York 1965
- [Blu92] V. Blum, G. Lauritsch, J. A. Maruhn und P.-G. Reinhard, *Journal of Comp. Phys.* **100** (1992) 376
- [Blu93] V. Blum, *Schwere und Superschwere Kerne in der Relativistischen Mesonenfeldtheorie*, Dissertation, Joahnn Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 1993
- [Boe94a] H.-F. Boersma and R. Malfliet, *Phys. Rev. C* **49** (1994) 233
- [Boe94b] H.-F. Boersma and R. Malfliet, *Phys. Rev. C* **49** (1994) 1495
- [Bog83] J. Boguta und H. Stöcker, *Phys. Lett. B* **120** (1983) 289-293
- [Bol72] M. Bolsterli, E. O. Fiset, J. R. Nix and J. L. Norton, *Phys. Rev. C* **5** (1972) 5
- [Bou83] A. Bouyssy und S. Marcos, *Phys. Lett. B* **127** (1983) 157
- [Bou87] A. Bouyssy, J.-F. Mathiod, Nauyen Van Giai, und S. Marcos, *Phys. Rev. C* **36** (1987) 380
- [Bou00] Dirk Bouwmeester, Artur Ekert, Anton Zeilinger (Eds.), *The Physics of Quantum Information*, Springer 2000
- [Bro78] P. Brockmann, *Phys. Rev. C* **18** (1978) 1510
- [Brow88] Harvey R. Brown und Rom Harré (Herausgeber), *Philosophical Foundations of Quantum Field Theory*, Clarendon Paperbacks, 1988
- [Bue97] T. Bürvenich, *Superschwere Kerne in selbstkonsistenten Mean-Field Modellen*, Diplomarbeit, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 1997
- [Bue98a] T. Bürvenich, K. Rutz, M. Bender, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, W. Greiner, *Eur. Phys. J. A* **3** (1998) 139-147
- [Bue98b] T. Bürvenich, unveröffentlichte Resultate
- [Bue01] T. Bürvenich, J. A. Maruhn, D. G. Madland, P.-G. Reinhard, in Vorbereitung
- [Bue01b] T. Bürvenich, M. Bender, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, in Vorbereitung
- [Ces98] M. L. Cescato, P. Ring, *Phys. Rev. C* **57** (1998) 134
- [Cha95] E. Chabanat, *Interactions effectives pour des conditions extrêmes d'isospin*, Dissertation, Université Claude Bernard Lyon-1, 1995
- [Chi74] S. A. Chin, J. D. Walecka, *Phys. Lett. B* **52** (1974) 24
- [Chi76] S. A. Chin, *Phys. Lett. B* **62** (1976) 263
- [Chi77] S. A. Chin, *Annals of physics* **108** (1977) 301

- [Cor00] T. Cornelius, *Signaturen sphärischer Schalenabschlüsse in Mean-Field Modellen*, Diplomarbeit, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 2000
- [Cus85] R. Y. Cusson, P.-G. Reinhard, M. R. Strayer, J. A. Maruhn, and W. Greiner, *Z. Phys. A* **320** (1985) 475
- [Cwi96] S. Cwiok, J. Dobaczewski, P.-H. Heenen, P. Magierski und W. Nazarewicz, *Nucl. Phys. A* **611** (1996) 211
- [Dob84] J. Dobaczewski, H. Flocard und J. Treiner, *Nucl. Phys. A* **422** (1984) 103.
- [Dob95] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, und T. R. Werner, *Physica Scripta T* **56** (1995) 15
- [Dob97] A. Dobado, A. Gómez-Nicola, A. L. Maroto, J. R. Pláez, *Effective Lagrangians for the Standard Model*, Springer Verlag, 1997
- [Due56] H.-P. Duerr, *Phys. Rev.* **103** (1956) 469
- [Dre90] R. M. Dreizler und E. U. K. Gross, *Density functional theory: an approach to the quantum many-body problem*, Springer Verlag, 1990
- [Ein35] A. Einstein, B. Podolski und N. Rosen, *Phys. Rev.* **47** (1935) 777
- [Eri88] T. Ericson und W. Weise, *Pions and Nuclei*, Clarendon press, Oxford, 1988
- [Fae62] A. Faessler und W. Greiner, *Z. Phys.* **168** (1962) 425, *Z. Phys.* **170** (1962) 105
- [Fae64] A. Faessler und W. Greiner, *Z. Phys.* **177** (1964) 190, *Nucl. Phys.* **59** (1964) 177
- [Fae65] A. Faessler, W. Greiner und R. K. Sheline, *Nucl. Phys.* **62** (1965) 241, *Nucl. Phys.* **70** (1965) 33, *Nucl. Phys.* **80** (1965) 417
- [Fay94] S. A. Fayens, S. V. Tolokonnikov, E. L. Trybov, und D. Zawischa, *Phys. Lett B* **338** (1994) 1
- [Fey65] R. P. Feynman und A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill (1965)
- [Fis72] E. O. Fiset, J. R. Nix, *Nucl. Phys. A* **193** (1972) 647
- [Fle01] P. Fleischer, private Mitteilungen
- [Flo73] H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman, and D. Vautherin, *Nucl. Phys. A* **203** (1973) 433
- [Fri81] B. Friedmann und V. Pandharipande, *Nucl. Phys. A* **361** (1981) 502
- [Fri96] J. L. Friar, D. G. Madland, and B. W. Lynn, *Phys. Rev. C* **53** (1996) 3085
- [Fur96] R. J. Furnstahl, B. D. Serot und H. B. Tang, *nucl-th/9608035*
- [Fur97] R. J. Furnstahl, B. D. Serot, H.-B. Tang, *Nucl. Phys. A* **615** (1997) 441
- [Fur98] R. J. Furnstahl und J. J. Rusnak, *Nucl. Phys. A* **632** (1998) 607
- [Fur00] R. J. Furnstahl, B. D. Serot, *nucl-th/0005072 v2*
- [Ghi95] A. Ghiorso et al., *Nucl. Phys. A* **583** (1995) 861c, *Phys. Rev. C* **51** (1995) R2293

- [Gin98] J. N. Ginocchio, D. G. Madland, Phys. Rev. C **57** (1998) 1167
- [Gog75] D. Gogny, Proceedings of the International Conference on Nuclear Selfconsistent Fields, Trieste, 1975. G. Ripka und M. Porneuf, Herausgeber. North holland, Amsterdam (1975) 176, 209, 265, 266
- [Goe99] Thomas Görnitz, *Quanten sind anders*, Spektrum Akademischer Verlag GmbH Heidelberg Berlin, 1999
- [Gre89] Walter Greiner, Bernd Müller, *Gauge Theory of Weak Interaction*, Springer Verlag, Heidelberg, 1989
- [Gre95] Walter Greiner, Joachim Maruhn, *Kernmodelle*, Harri Deutsch, 1995
- [Gre96] Walter Greiner, Joachim Reinhardt, *Field Quantization*, Springer Verlag, 1996
- [Gre97] Walter Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics*, zweite Auflage, Springer Verlag, 1997
- [Gre98] Walter Greiner, *Quantum Mechanics - Special Chapters*, Springer Verlag, 1998
- [Gre00] V. Greco, F. Matera, M. Colonna, M. Di Toro, and G. Fabbri, nucl-th/0010092
- [Gru69] J. Grumann, U. Mosel, B. Fink und W. Greiner, Z. f. Physik **228** (1969) 371
- [Gru71] J. Grumann, Th. Morovic, W. Greiner, Z. f. Naturforschung **26a** (1971) 643
- [Hoc94] T. Hoch, D. Madland, P. Manakos, T. Mannel, B. A. Nikolaus, D. Strottman, Physics Reports **242** (1994) 253
- [Hof95] S. Hofmann et al., Z. Phys. A **350** (1995) 277, **350** (1995) 281
- [Hof96] S. Hofmann et al., Z. Phys. A **354** (1996) 229
- [Hof98] S. Hofmann, Rep. Prog. Phys. **61** (1998) 639
- [Hoh64] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B **136** (1964) 864
- [Hor81] C. J. Horowitz und B. D. Serot, Nucl. Phys. A **368** (1981) 503
- [Hor83] C. J. Horowitz und B. D. Serot, Nucl. Phys. A **399** (1983) 529
- [Hor84] C. J. Horowitz, Brian D. Serot, Phys.Lett. B **140** (1984) 181
- [Hor01a] C. J. Horowitz, J. Piekarewicz, nucl-th/0108036
- [Hor01b] C. J. Horowitz, J. Piekarewicz, Phys.Rev.Lett. **86** (2001) 5647
- [Itk01] M. Itkis, Vortrag auf der *Sandanski-2* Konferenz in Sandanski, Bulgarien, 5-9. Mai 2001
- [Jel93] Rainer J. Jelitto, *Theoretische Physik IV: Quantenmechanik I*, 3. korr. Auflage, AULA-Verlag Wiesbaden, 1993
- [Joh55] M. H. Johnson und E. Teller, Phys. Rev. **98** (1955) 783
- [Kle92] S. P. Klevansky, Rev. Mod. Phys. **64** (1992)
- [Kle92b] H. Klein, Diplomarbeit, J.W. Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 1992

- [Koh65] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A **140** (1965) 1133
- [Kru00] A. T. Kruppa, M. Bender, W. Nazarewicz, P.-G. Reinhard, T. Vertse, S. Cwiok, Phys. Rev. C **61** (2000) 034313
- [Kuc91] H. Kucharek und P. Ring, Z. Phys. A **339** (1991) 23
- [Kud00] L. Kudling, *Constraints in selbstkonsistenten Mean-Field Modellen*, Diplomarbeit, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 2000
- [Kwi01] P. Kwiat et al., Nature, Bd. 409, Seite 1014
- [Lal96a] G. A. Lalazissis, M. M. Sharma, P. Ring und Y. K. Gambhir, Nucl. Phys. **A608** (1996) 202
- [Lal96b] G. A. Lalazissis, J. König, P. Ring, Phys. Rev. C **55** (1997) 540
- [Lal97] G. Lalazissis, D. Vretenar, W. Pöschl und P. Ring, nucl-th/9710013
- [Laz96] Yuri A. Lazarev, *Extremes of Nuclear Structure*, Proceedings of the International Workshop XXIV on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations, Hirschegg, Austria, 1996
- [Laz96b] Yu. A. Lazarev et al., Phys. Rev. C **54** (1996) 620
- [Lei99] M. Leino, Eur. Phys. Journ. A **6** (1999) 63
- [Lip60] H. J. Lipkin, Ann. Phys. (NY) **9** (1960) 272
- [Lip61] H. J. Lipkin, Ann. Phys. (NY) **12** (1961) 452
- [Mac85] R. Machleidt und R. Brockmann, Phys. Lett. B **160** (1985) 364
- [Mac86] R. Machleidt, *The Meson Theory of Nuclear Forces and Nuclear Matter in Relativistic Dynamics and Quark-Nuclear Physics*, M. B. Johnson and A. Picklesimer (Herausgeber), Wiley, New York, 1986
- [Mac89] R. Machleidt, Adv. Nucl. Phys. **19** (1989) 1 und 189
- [Mad88] D. G. Madland und J. R. Nix, *New model of the average neutron and proton pairing gaps*, Nucl. Phys. A **476** (1988) 1
- [Mad01] D. G. Madland, private Mitteilung
- [Man84] A. Manohar, H. Georgi, Nuc. Phys. B **234** (1984) 189
- [Man88] P. Manakos, T. Mannel, Z. Phys. A **330** (1988) 223
- [Mar72] J. A. Maruhn und W. Greiner, Z. Physik **251** (1972) 431
- [Mar01] J. A. Maruhn, T. Bürvenich, D. G. Madland, J. of Comp. Phys. **169** (238) 2001
- [Mil74] L. D. Miller, Phys. Rev. C **9** (1974) 537
- [Mil75] L. D. Miller, Phys. Rev. C **12** (1975) 710

- [Moe00] P. Möller, A. Iwamoto, Phys. Rev. C **61** (2000) 047602-1, P. Möller, D. G. Madland, A. J. Sierk, *Five-Dimensional Potential-Energy Surfaces and Coexisting Fission Modes in the Heavy-Element Region*, Tours Symposium on Nuclear Physics IV, Tours, France, September 4-7, 2000
- [Möl92] P. Möller, J. Rayford Nix, Nucl. Phys. **A**
- [MoeD] P. Möller, R. Nix, Diskussionspapier
- [Mos66] U. Mosel, B. Fink und W. Greiner, Beitrag zum "Memorandum Hessischer Kernphysiker" Darmstadt, Frankfurt, Marburg (1966)
- [Mos68] Ulrich Mosel, Walter Greiner, Z. Phys. **217** (1968) 256
- [Mos69] U. Mosel, W. Greiner, Z. Physik **222** (1969) 261
- [Mos71] U. Mosel, J. A. Maruhn, und W. Greiner, Phys. Lett. B **34** (1971) 587
- [Nam61] Y. Nambu, G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122** (1961) 345
- [Nam61b] Y. Nambu, G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **124** (1961) 246
- [Nac86] Otto Nachtmann, *Elementarteilchenphysik - Phänomene und Konzepte*, Vieweg, 1986
- [Nik92] B.A. Nikolaus, T. Hoch, D.G. Madland, Phys. Rev. C **46** (1992) 1757
- [Nil68] S. G. Nilsson et al., Nucl. Phys. A **115** (1968) 545
- [Nil69] S. G. Nilsson, Ch. F. Tsang, A. Sobiczewski, Z. Szymański, S. Wycech, Ch. Gustafson, I.-L. Lamm, P. Möller und B. Nilsson, Nucl.Phys. **A131** (1969) 1
- [Nin99] V. Ninov et al., Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 1104
- [Nog65] Y. Nogami, Phys. Lett. **15** (1965) 97
- [Num88] *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, 1988
- [Oga99] Yu. Ts. Oganessian et al., Eur. Phys. J. A **5** (1999) 68, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 3154, Nature **400** (1999) 209, Phys. Rev. C **62** (2000) 041604(R)
- [Pan96] P.K. Panda, S.K. Patra, J. Reinhard, J. A. Maruhn, H. Stöcker und W. Greiner, to be published
- [Pea94] Pearson und Farine, Phys. Rev. C **50** (1994) 185
- [Pen95] Roger Penrose, *Schatten des Geistes*, Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg Berlin Oxford, 1995
- [Per86] Robert J. Perry, Phys. Lett. B **182** (1986) 269
- [Pol98] Joseph Polchinski, *String Theory* Vol. I and II, Cambridge University Press, 1998
- [Pri00] Hans Primas, öffentlicher Vortrag im Rahmen des physikalischen Kolloquiums des Fachbereich Physik der Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 2000
- [Ram98] A. V. Ramayya et al., Phys. Rev. C **57** (1998) 2370

- [Rei79] P.-G. Reinhard and K. Goeke, *Lecture Notes in Physics* **89** (1979) 440
- [Rei82] P.-G. Reinhard, R. Y. Cusson, *Nucl. Phys. A* **378** (1982) 418
- [Rei89] P.-G. Reinhard, *Rep. Prog. Phys* **52** (1989) 439
- [Rei92] P.-G. Reinhard, *Ann. Physik (Leipzig)* **1** (1992) 632.
- [Rei95] P.-G. Reinhard, H. Flocard, *Nucl. Phys. A* **584** (1995) 467
- [ReiD] P.-G. Reinhard, Diskussionspapier
- [ReiPR] P.-G. Reinhard, private Mitteilungen, 1998-2001
- [Rei99] P. Reiter et al., *Phys. Rev. Lett* **82** (1999) 509
- [Rei00] P.-G. Reinhard, M. Bender, and J. A. Maruhn, nucl-th/0012095
- [Rin80] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem*, Springer-Verlag, New-York 1980
- [Row01] M. A. Rowe et al., *Nature*, Bd. 409, S. 791
- [Ruf88] M. Rufa, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, W. Greiner und R. Strayer, *Phys. Rev. C* **38** (1988) 390
- [Rut94] K. Rutz, *Asymmetrische Deformationen im Relativistischen Mean-Field-Modell*, Diplomarbeit, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt/Main, 1994.
- [Rut97] K. Rutz, M. Bender, T. Bürvenich, T. Schilling, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn und W. Greiner, *Phys. Rev. C* **56** (1997) 238
- [Rut99] K. Rutz, *Struktur von Atomkernen im Relativistic-Mean-Field Modell*, Dissertation, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 1999, ibidem-Verlag, Stuttgart
- [Sch70] D. Scharnweber, U. Mosel, und W. Greiner, *Phys. Rev. Lett.* **24** (1970) 601
- [Sch92] D. Schnabel, Diplomarbeit, Inst. für Theoretische Physik, Johann-Wolfgang-von-Goethe Universität Frankfurt (1992)
- [Sch95a] R. N. Schmid, E. Engel, and R. M. Dreizler, *Phys. Rev. C* **52** (1995) 2804
- [Sch95b] R. N. Schmid, E. Engel, and R. M. Dreizler, *Phys. Rev. C* **52** (1995) 164
- [Ser78] F. E. Serr, J. D. Walecka, *Phys. Lett. B* **79** (1978) 10
- [Ser86] Brian D. Serot, John Dirk Walecka, *Advances in Nuclear Physics Volume 16*, Plenum Press, New York - London
- [Ser97] B. D. Serot, J. D. Walecka, nucl-th/9701058
- [Spe92] C. Speicher, R. M. Dreizler, und E. Engel, *Ann. Phys. (NY)* **213** (1992) 312
- [Str67] V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys. A* **95** (1967) 420
- [Str68] V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys. A* **122** (1968) 1
- [Sug94] Y. Sugahara, H. Toki, *Nucl. Phys. A* **579** (1994) 557

- [Sul01] A. Sulaksono, *Ein relativistisches Punktkopplungsmodell: Formale Untersuchungen und Anwendung auf überschwere Kerne*, Dissertation, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 2001
- [Taj93] N. Tajima, P. Bonche, H. Flocard, P.-H. Heenen, und M. S. Weiss, Nucl. Phys. A **551** (1993) 434
- [Tel95] Paul Teller, *An Interpretive Introduction to Quantum Field Theory*, Princeton University Press, 1995
- [Ter96] J. Terasaki, P.-H. Heenen, H. Flocard, and P. Bonche, Nucl. Phys. A **600** (1996) 371
- [Thi85] M. Thies, Phys. Lett. B **162** (1985) 255
- [Thi86] M. Thies, Phys. Lett. B **166** (1986) 23
- [Thi99] J. Thijssen, *Computational Physics*, Cambridge University Press, 1999
- [Vre01] D. Vretanar, private Mitteilung
- [Wal95] John Dirk Walecka, *Theoretical Nuclear and Subnuclear Physics*, Oxford University Press, 1995
- [Wei35] C. F. von Weizsäcker, Z. Phys. **96** (1935) 431
- [Wei79] Steven Weinberg, Physica **96 A** (1979) 327
- [Wei90] Steven Weinberg, Phys. Lett. B **251** (1990) 288
- [Zha93] J.-K. Zhang, Y. Jin, and D. S. Onley, Phys. Rev. C **48** (1993) 2697
- [Zon94] H.-S. Zong, F. Wang, J.-L. Ping, Commun. Theor. Phys. **22** (1994) 479

Danksagung

Diese Arbeit wäre nicht möglich gewesen ohne die Unterstützung und Betreuung vieler Menschen, denen ich hier dafür herzlich danken möchte.

Ich möchte mich sehr herzlich bei Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Walter Greiner für seine fortwährende Unterstützung meiner Forschungsarbeit und viele inspirierende Impulse bedanken. Die guten Arbeitsbedingungen am Institut ermöglichten es mir, den interessanten Fragestellungen in aller Tiefe nachzugehen.

Meinem Betreuer Herrn Prof. Dr. Joachim A. Maruhn möchte ich mich für die hervorragende Betreuung meiner Arbeit und permanente Unterstützung meiner Vorhaben bedanken. Sein stetiges Interesse daran hat diese Arbeit erst ermöglicht.

Herrn Prof. Dr. P.-G. Reinhard schulde ich Dank für die vielen inspirierenden Diskussionen und Ideen, sowie seine Unterstützung in etlichen Detailfragen. Die Treffen der Frankfurt-Erlangen-Kernstrukturgruppe waren stets sehr produktiv und gewinnbringend.

Herrn Dr. David. G. Madland möchte ich für die interessante und fruchtbare Zusammenarbeit danken. Bei persönlichen Gesprächen in Los Alamos und später per email oder telefonisch wurde so manche schöne Idee geboren.

Den früheren und jetzigen Mitgliedern meiner Arbeitsgruppe, Herrn Dr. Michael Bender, Herrn Dipl. Phys. Thomas Cornelius, Herrn Dipl. Phys. Lennart Kudling, Herrn Dr. Klemens Rutz und Herrn Dipl. Phys. Anto Sulaksono danke ich für viele wichtige Diskussionen und Hilfestellungen. Ihre Arbeit machte die hier präsentierten Untersuchungen erst möglich.

Herrn Prof. Dr. Sigurd Hofman, Herrn Prof. Dr. Gottfried Münzenberg, Herrn Prof. Dr. Yuri Ts. Oganessian und Herrn Prof. Dr. Valeri Zagrebaev möchte ich für viele interessante Diskussionen über überschwere Elemente danken.

Im Laufe meiner Promotionszeit hatte ich Gelegenheit, an einigen Konferenzen teilzunehmen und die Forschungsarbeit unserer Gruppe einem Fachpublikum vorzustellen. Während dreier Forschungsaufenthalte konnte ich meine Arbeit vertiefen und mit anderen Physikern diskutieren.

Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Walter Greiner und Herrn Prof. Dr. Joachim A. Maruhn danke ich für die Möglichkeit der Teilnahme am *IV Latin American Symposium on Nuclear Physics* vom 27.-30. September in Mexico City, Mexico sowie einem dreiwöchigen Forschungsaufenthalt am *Oak Ridge National Laboratory*, Oak Ridge, USA im September 1999 und zwei mehrtätigen Forschungsaufenthalten am *Los Alamos National Laboratory*, Los Alamos, USA (September 1999 und Dezember 2000).

Herrn Prof. Dr. P.-G. Reinhard danke ich für die Ermöglichung meiner Teilnahme am *Workshop on Very Heavy Nuclear Systems* vom 9.-14. Juli in Trento, Italien.

Herrn Prof. Dr. Yuri Ts. Oganessian möchte ich für die Einladung zur Konferenz *Fusion Dynamics at the Extremes*, 25.-27. Mai 2000 in Dubna, Russische Föderation sowie einem einwöchigen Forschungsaufenthalt am FLNR in Dubna im Januar 2001 danken.

Bei Herrn Prof. Dr. Sigurd Hofmann und Herrn Prof. Dr. Gottfried Münzenberg bedanke ich mich für die Möglichkeit, an der *Sandanski-2* Konferenz vom 5.-9. Mai 2001 in Sandanski, Bulgarien teilzu-

nehmen.

Herrn Dipl. Phys. Kristof Balazs, Herrn Dipl. Phys. Thomas Cornelius, Herrn Dr. James Friar, Herrn Dipl. Phys. Matthias Hanauske, Herrn Prof. Dr. Peter Hess, Herrn Dipl. Phys. Stefan Hofmann, Herrn Dr. Tien Kieu, Herrn Dipl. Phys. Lennart Kudling, Herrn Dr. Serban Misicu, Herrn Dr. Peter Möller, Herrn Dipl. Phys. Philipp Reuter, Herrn Dipl. Phys. Anto Sulaksono und Herrn Dr. Dario Vretenar möchte ich für interessante Diskussionen danken.

Den Systemadministratoren Herrn Dipl. Phys. Manuel Reiter und Herrn Dipl. Phys. Henning Weber danke ich für die Unterstützung und die sehr gute Betreuung des lokalen Clusters.

Die numerischen Rechnungen wurden auf den Computern des Instituts für Theoretische Physik, des lokalen Rechenzentrums und den Rechnern der GSI durchgeführt.

Frau Bouscher–Bouffier, Frau Palade, Frau Radulescu, Frau Ruppel und Frau Steidl möchte ich für die Unterstützung danken.

Meinen ehemaligen und jetzigen Zimmerkollegen Kristof Balazs, Thomas Cornelius, Stefan Hofmann, Constantin Loizides, Dr. Amruta Mishra, Hautpmann Dr. Serban Misicu, Graf aus der Klein-Wallachei, Dr. Joachim Reinhard und Jörg Ruppert danke ich für die freundliche Atmosphäre und ihre Geduld, mit der sie meine Anwesenheit duldeten :).

Thomas Cornelius, Frank Illenberger, Lennart Kudling, Irene Loizides, Cristina Penso und Anto Sulaksono danke ich für das sorgsame Korrekturlesen meiner Arbeit.

Für viel Freude und einen optimalen Ausgleich zur Physik danke ich Joe Laperal Gomez, Manni Haas, Luna del Sol, den Funny Bones, Veto und Wild Heart. Vera Both, Alexander Haas, Frank Illenberger, Tobias Schuler, Christine Seuring, Michael Vögler (und auch Dir, Jannis) danke ich für viele schöne Stunden. Irene Loizides danke ich für eine wunderbare Zeit.

Besonders herzlich möchte ich meinen Eltern danken, ohne deren Unterstützung all dies nicht möglich gewesen wäre.

Lebenslauf

20.03.1973	Geburt in Langen (Hessen) als Sohn von Dieter Bürvenich und Edith Bürvenich, geborene Klink.
1979-1983	Besuch der Willhelm-Hauff-Schule in Neu-Isenburg.
1983-1985	Besuch der Brüder-Grimm-Schule in Neu-Isenburg.
1985-1992	Besuch der Goetheschule in Neu-Isenburg.
1992-1993	Zivildienst beim Club Behinderter und ihrer Freunde (CBF) e.V. in Dreieich-Sprendlingen.
1993-1995	Grundstudium der Physik an der J.W. Goethe-Universität in Frankfurt.
05/1995	Ablegung der Vordiplomprüfung.
09/1995	Aufnahme in das Institut für Theoretische Physik. Beginn der Diplomarbeit mit dem Titel "Superschwere Kerne in selbstkonsistenten Kernmodellen" unter der Leitung von Prof. Dr. Joachim A. Maruhn, Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Walter Greiner und Prof. Dr. P.-G. Reinhard.
03/1998	Ablegung der Diplomprüfung.
05/1998	Beginn des Promotionsstudiums. Beginn der Dissertation mit dem Titel "Untersuchung und Weiterentwicklung eines relativistischen Punkt-kopplungsmodells zur Anwendung in der Kernstrukturphysik" unter der Leitung von Prof. Dr. Joachim A. Maruhn, Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Walter Greiner und Prof. Dr. P.-G. Reinhard.
05/1998-04/2000	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main.
05/2000-03/2001	Stipendium nach dem Hessischen Gesetz zur Förderung von Nachwuchswissenschaftlern.
04/2001-10/2001	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik II der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg.
seit 10/2001	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main.