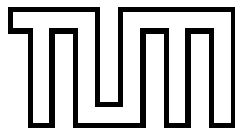


**Symmetrieprojizierte Kovariante
Dichtefunktionaltheorie
mit Anwendungen für Exotische Kerne**

Dissertation
von
Emílio Cavalcante Lopes

Institut für Theoretische Physik T30
Physik-Department
Technische Universität München



Juli 2002

Symmetrieprojierte Kovariante Dichtefunktionaltheorie mit Anwendungen für Exotische Kerne

Emílio Cavalcante Lopes

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Physik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. R. Krücken
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr. P. Ring
2. apl. Prof. Dr. H. Hofmann

Die Dissertation wurde am 09.07.2002 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 22.07.2002 angenommen.

FÜR LOTHAR.
PARA ADILSON.

An dieser Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. Peter Ring für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe, die interessante Themenstellung, sowie seine geduldige Betreuung und Unterstützung herzlich danken.

Herrn Dr. Mario Stoitsov danke ich für die klärenden Diskussionen zum Thema Lokalskalierungstranformation, Herrn Dr. J. A. Sheikh für die gemeinsame Arbeit im Gebiet der Symmetrieprojektion.

Mein besonderer Dank geht an den Deutschen Akademischen Austauschdienst (DAAD), dessen Förderprogramm mir die Arbeit an diesem Forschungsprojekt ermöglicht hat. Seine Unterstützung, die weit über den finanziellen Aspekt hinausging, war äußerst wichtig besonders in der schwierigen Anfangszeit. Insbesondere bedanke ich mich ganz herzlich bei Frau Helga Wahre vom Referat Lateinamerika Süd für ihr großes Engagement und ihre unermüdliche Hilfsbereitschaft.

Das Projekt wurde in seinem letzten Jahr durch die Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) gefördert.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Die Relativistische Mean-Field-Theorie	7
1.1 Die Lagrangedichte	7
1.2 Bewegungsgleichungen und Näherungen	10
2 Relativistische Theorie der Paarungskorrelationen	15
2.1 Quantisierung der Theorie und Bewegungsgleichungen	15
2.2 Eliminierung der bosonischen Freiheitsgrade	18
2.3 Die Gor'kov-Faktorisierung	18
2.4 Vernachlässigung der Retardierung	19
2.5 Die Dirac-Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen	20
3 Symmetrie-Projizierte HFB-Gleichungen	23
3.1 Grundlagen der HFB-Theorie	23
3.2 Die projizierte Energie	25
3.3 Die Überlapp-Integrale	26
3.4 Die Variationsgleichungen	29
3.5 Teilchenzahlprojektion	31
3.5.1 Variation der Norm	33
3.5.2 Das projizierte Hartree-Fock-Feld	33
3.5.3 Das projizierte Paarungsfeld	34

4 Teilchenzahlprojektion in Rahmen einer relativistischen Dichtefunktionaltheorie	35
4.1 Das Energiefunktional der RMFT	35
4.2 Die teilchenzahlprojizierte RMFT-Energie	38
4.3 Teilchenzahlprojizierte RMFT-Gleichungen	39
4.4 Die Paarwechselwirkung	40
5 Durchführung der Rechnungen	41
5.1 Die RMFT-Gleichungen für sphärische Kerne	41
5.2 Lösungsprinzip für die RMFT-Gleichungen	43
5.3 Lösung der RMFT-Gleichungen durch Entwicklung	44
5.4 Lokal-Skalierte Oszillatorbasis	45
5.5 Numerische Ausführung der Rechnungen	46
5.6 Zur Lösung der DHFB-Gleichungen im Ortsraum	48
6 Beschreibung Exotischer Kerne	51
6.1 Ergebnisse zu den Zinn-Isotopen	51
6.2 Ergebnisse zu den Neon-Isotopen	55
6.3 Ergebnisse zu den Lithium-Isotopen	60
6.4 Das Divergenzproblem bei der Teilchenzahlprojektion	65
Zusammenfassung	73
Literaturverzeichnis	77

Einleitung

Atomkerne sind komplexe quantenmechanische Systeme. Sie bestehen aus einer endlichen Anzahl von Teilchen, den Protonen und Neutronen, die gemeinsam Nukleonen genannt werden. Die Nukleonen selbst besitzen durch die Quarks und Gluonen eine innere Struktur. Die Dynamik dieser Nukleonenbausteine wird von der Quantenchromodynamik (QCD) bestimmt, die sich in den letzten Jahren als die grundlegende Theorie der starken Wechselwirkung etabliert hat. Es soll also im Prinzip möglich sein, von der QCD ausgehend die Nuklearstruktur und -Dynamik zu beschreiben und die im Laufe der Jahre entwickelte, erfolgreiche Phänomenologie abzuleiten. Jedoch erweist sich die QCD im relevanten Energiebereich in der Praxis als nichtanwendbar. Eine Behandlung nach der Störungstheorie ist wegen der starken Kopplung nicht durchführbar. So bleibt eine quantitative Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Nukleonen, und somit des Atomkerns als gebundenes System von Nukleonen, im Rahmen der QCD ein langzeitiges Ziel der Kernphysik.

Als nächste Stufe in der Näherungsskala bietet sich die mikroskopische Betrachtung des Atomkerns mit den Nukleonen als effektive Freiheitsgrade des Systems an. Dabei geht man zunächst davon aus, daß eine nichtrelativistische Behandlung des Problems ausreicht. Die Zweinukleonenwechselwirkung ist aus Streuexperimenten sehr gut bekannt. Es gibt heutzutage mehrere theoretische Ansätze, die in der Lage sind, mit hoher Genauigkeit die in Experimenten gemessenen Streuphasen zu reproduzieren. Bekannte Beispiele hierfür sind u.a. die Bonn- [MHE87], Paris- [Lac80] und Argonne-Potentiale [WSA84]. Alle diese Kräfte enthalten einen stark repulsiven „Core“, einen attraktiven Anteil bei mittleren Abständen sowie ein langreichweitiges Ein-Pion-Austauschpotential.

Eine exakte Lösung des Vielteilchenproblems anhand der Zweiteilchenwechselwirkungen ist allerdings nur für sehr leichte Kerne möglich. Dabei stellt man zudem fest, daß Dreikörperkräfte nicht zu vernachlässigen sind.

Man benötigt also eine Näherungsmethode zur Lösung des Vielteilchenproblems. Der Erfolg des Schalenmodells läßt auf die Annahme schließen, daß sich die Nukleonen mehr oder weniger unabhängig voneinander in einem mittleren Potential bewegen. Versucht man aber das nukleare Vielteilchensystem mit Hilfe der nackten Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung im Rahmen der nichtrelativistischen Hartree-Fock-Theorie zu beschreiben, scheitert man an

dem oben erwähnten stark repulsiven Charakter der Wechselwirkung bei kleinen Abständen. Kenntnisse über die Wechselwirkung zweier freier Nukleonen können somit nicht einfach auf den Streuprozess im Inneren des Kerns übertragen werden. Der Einfluß der anderen Nukleonen, insbesondere durch das Pauli-Prinzip, muß berücksichtigt werden. Durch ihn besitzt die effektive Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung im Kern Eigenschaften, die von denen der nackten Wechselwirkung grundlegend verschieden sind, z.B. in Hinsicht auf das Verhalten bei kleinen Abständen.

Mit der Brueckner-Theorie [RS80] ist es möglich, aus einer reinen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung effektive Potentiale zu konstruieren, die zur Beschreibung von Grundzustandseigenschaften im Rahmen einer Hartree-Fock-Theorie verwendet werden können. Die effektive Wechselwirkung, durch die sogenannte G -Matrix dargestellt, wird durch die Aufsummation aller Leiterdiagramme unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips bestimmt. Die G -Matrix ist somit für zwei Nukleonen im Medium das Analogon der Streumatrix für freie Nukleonen. Praktische Anwendungen dieser Methode erwiesen sich jedoch nur bedingt als erfolgreich. Es ist beispielsweise nicht gelungen, dadurch gleichzeitig Bindungsenergie und Sättigungsdichte von Kernmaterie zu reproduzieren. Dies wurde als Coester-Band-Phänomen bekannt [CCD70].

Bessere Ergebnisse erzielt man durch relativistische Erweiterungen der Brueckner-Theorie. Jedoch erfordert diese sogenannte Dirac-Brueckner-Hartree-Fock-Theorie zusätzliche Näherungen. Zudem sind die Gleichungen derart komplex, daß es bisher nicht möglich war, damit endliche Kerne zu berechnen. Dennoch weist dieser partielle Erfolg darauf hin, daß relativistische Effekte bei der Beschreibung des nuklearen Vielteilchensystems ausschlaggebend sein können. Nukleonen im Atomkern bewegen sich mit Geschwindigkeiten von bis zu einem Drittel der Lichtgeschwindigkeit. Da die meisten relevanten Größen vom Quadrat der Geschwindigkeit abhängen, sind Effekte von etwa 10% zu erwarten, was den Aufwand einer relativistischen Behandlung des Problems im Prinzip nicht rechtfertigt. Jedoch ergeben sich viele Eigenschaften im Kern aus der Differenz zweier großer Zahlen, sodaß auch kleine Effekte eine entscheidende Rolle spielen können. In der Tat führt eine Behandlung der Nukleonen als Dirac-Teilchen zu einer natürlichen Beschreibung des Spins und somit zu einem besseren Verständnis der Spin-Bahn-Kopplung. Insbesondere konnten relativistische Streurechnungen experimentell ermittelte Spin-Observablen wesentlich besser wiedergeben als nichtrelativistische Modelle [SW86].

Dennoch muß man feststellen, daß zur Zeit noch keine praktisch anwendbare mikroskopische Theorie der effektiven Nuklearwechselwirkung existiert. Dies hat im Laufe der Zeit zu der Verbreitung verschiedener, von vornherein phänomenologisch motivierter Wechselwirkungen geführt. Besonderes Merkmal solcher Ansätze sind freie Parameter, die an experimentelle Eigenschaften von Kernmaterie und endlichen Kernen angepaßt werden. Dabei berücksichtigt man die wichtige Erkenntnis aus der Brueckner-Theorie, daß die effektive Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung dichteabhängig ist. Analog zur Kohn-Sham-Theorie [KS65] wird die Ener-

gie des Systems als ein Funktional der Kerndichte ausgedrückt. Daraus läßt sich dann durch Variationsrechnung ein effektives, selbstkonsistentes Einteilchenpotential für die beteiligten Nukleonen ableiten. Dieses ergibt über die Lösung der entsprechenden Bewegungsgleichungen die Grundzustandsenergie und -dichte des Vielteilchensystems. Nichtrelativistische Ansätze wie Skyrme [Sky59] oder Gogny [DG80] haben sich in vielen Anwendungen als sehr erfolgreich erwiesen. Anhand einiger weniger angepaßter Parameter sind sie in der Lage, viele experimentelle Ergebnisse über das ganze periodische System zu reproduzieren.

Für eine relativistische Beschreibung des Atomkerns benutzt man Mesonen als Vermittler der Nuklearwechselwirkung. Der Ausgangspunkt solch einer relativistischen Dichtefunktionaltheorie ist eine Lagrangedichte, die den Atomkern als ein System von punktförmigen, durch Austausch von verschiedenen Mesonen miteinander wechselwirkenden Nukleonen beschreibt [SW86]. Die Kopplungen sind jedoch auch hier sehr stark, was eine Behandlung im Rahmen der Störungstheorie unmöglich macht. In der Praxis wird die Lagrangedichte auf klassischer Ebene behandelt, was vom Standpunkt einer Quantenfeldtheorie der Ersetzung der Quantenfelder durch Erwartungswerte in geeigneten Zuständen entspricht. Analog zu den Hartree-Fock-Rechnungen mit dichteabhängigen Skyrme- oder Gognykräften werden freie Parameter der Theorie an experimentelle Daten angepaßt. Dadurch werden vernachlässigte Vielteilchen- und Vakuumpolarisationseffekte sowie weitere kompliziertere Korrelationen effektiv berücksichtigt. Im Gegensatz zu ihren nichtrelativistischen Gegenstücken benötigt die Beschreibung des Kerns im Rahmen der Relativistischen Mittelfeldtheorie (RMFT) eine geringere Anzahl von freien Parametern. Diese besitzen zudem eine offensichtliche physikalische Bedeutung. Somit stellt die RMFT eine sehr einfache und elegante Theorie dar, die mit großem Erfolg auf viele Probleme der Kernstruktur angewandt wurde [Rin96].

Bei der Beschreibung von Kernen mit offenen Schalen spielen Paarungskorrelationen eine wichtige Rolle. Obwohl ihr Beitrag zur Bindungsenergie gering ist, verursachen sie eine Streuung von Teilchenpaaren, und folglich eine partielle Besetzung der Niveaus, um die Fermi-Kante. Dies beeinflusst viele kollektive Eigenschaften des Kerns, wie z.B. Radien oder Trägheitsmomente. In den meisten Anwendungen der RMFT wird für die Beschreibung von Paarungskorrelationen die BCS-Näherung verwendet. Dabei werden für die Berechnung der physikalischen Observablen Besetzungszahlfaktoren eingeführt, die mit Hilfe eines an experimentelle Massendifferenzen angepaßten Gap-Parameters ermittelt werden. Während für Kerne nahe dem Stabilitätstal dieses Schema erfolgreich angewandt wurde, ist diese Methode für exotische oder superschwere Kerne nicht direkt geeignet. Zum einen sind experimentelle Grundzustandsmassen für viele dieser Kerne nicht verfügbar. Zum anderen ist die BCS-Näherung nicht in der Lage, die Randbedingungen für die Zustände im Energiekontinuum zu erfüllen. Eine grundlegendere Methode für die Beschreibung von Korrelationen im Teilchen-Teilchen-Kanal ist aufgrund dessen notwendig. Dies ist im Rahmen einer klassischen Behandlung der Mesonenfelder jedoch nicht möglich, denn der daraus resultierende Hamiltonoperator stellt ein Einteilchenoperator dar.

Von einer quantisierten Version der Theorie ausgehend gelang es Kucharek und Ring [KR91] mittels Green–Funktion–Techniken, die Grundlage zur mikroskopischen Beschreibung von Paarungskorrelationen innerhalb einer relativistischen Quantenfeldtheorie zu entwickeln. Sie haben Bewegungsgleichungen für die Nukleonen ableiten können, die das relativistische Gegenstück zu den klassischen Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen darstellen. Dieser Formalismus erlaubt eine korrekte Beschreibung von Kontinuumszuständen.

Die heute vorhandenen RMFT–Parametersätze sind für eine einheitliche Beschreibung von Mean–Field und Paarungskorrelationen jedoch nicht geeignet [Kuc89]. Das Verhalten dieser Mesonenaustauschkraft bei größerem Impulsübertrag, wie er im Teilchen–Teilchen–Kanal vorkommt, erwies sich bei Anwendungen in Kernmaterie als unzulänglich. Als Folge dessen wurden bis dato nur Berechnungen mit phänomenologischen Kräften im Paarungskanal durchgeführt [GEL96]. Dieser Ansatz ist sehr erfolgreich bei der Beschreibung von Paarungskorrelationen, obwohl sie im Rahmen dieses Modells nicht voll relativistisch berücksichtigt werden. Dies kann dadurch erklärt werden, daß relativistische Effekte keine Rolle im Teilchen–Teilchen–Kanal spielen [Ser01].

Eine wesentliche Eigenschaft der Mean–Field–Näherung ist die Verletzung bestimmter Symmetrien. Das bedeutet, daß die daraus resultierenden Wellenfunktionen die Symmetrien des zugrundeliegenden Zweiteilchen–Hamiltonoperators nicht erfüllen. Dies ist im Prinzip eine unerwünschte Eigenschaft der Theorie. Sie erlaubt jedoch, komplizierte Korrelationen auf eine einfache Weise zu berücksichtigen und dadurch eine Näherung zur exakten Lösung des Vielteilchenproblems zu erhalten. Meist wird die Wellenfunktion des Systems durch eine Slater–Determinante angenähert, die im allgemeinen die Translations– und Rotationsinvarianz verletzt. Besonders davon betroffen ist die Teilchenzahlsymmetrie bei der Beschreibung von superfluiden Systemen mittels verallgemeinerter Slater–Determinanten.

In vielen Fällen kann man die Effekte dieser Symmetrieverletzungen vernachlässigen, in manchen spielen sie jedoch eine wesentliche Rolle, vor allem im Bereich von Phasenübergängen. Es ist ein Nachteil der Mean–Field–Näherung, daß sie zu scharfen Phasenübergängen selbst in Systemen führt, bei denen die exakte Lösung einen stetigen Übergang zwischen den zwei Phasen aufweist. Um eine bessere Beschreibung solcher Systeme im Bereich von Phasenübergängen zu erhalten, müssen die gebrochenen Symmetrien wiederhergestellt werden.

Dies kann durch eine Projektion auf die Eigenräume der Symmetrieeoperatoren bewerkstelligt werden. Da die Mean–Field–Theorie eine Variationstheorie darstellt, stellt sich die Frage, ob diese Projektion vor oder auch nach der Variation durchgeführt werden soll. Dabei hat sich die Projektion *vor* der Variation als das geeignete Verfahren erwiesen, weil es das relevante Variationsprinzip berücksichtigt. Sie wurde jedoch wegen der Komplexität der zugehörigen numerischen Aufgabe bisher hauptsächlich bei Untersuchungen in relativ kleinen Konfigurationsräumen angewandt. In den meisten Fällen hat man sich auf die BCS–Näherung beschränkt [DMP64]. Bei realistischeren Anwendungen, die eine Teilchenzahlprojektion erfordern, wird oft die Lipkin–Nogami–Näherung benutzt [MCD93, VER96]. Es stellt sich jedoch

heraus, daß diese das Variationsprinzip verletzt [FO97]. Erst vor kurzem gelang es Anguiano *et al.* [AER01] mit Hilfe der numerisch hochkomplizierten Gradientenmethode [RS80], voll projizierte HFB-Rechnungen durchzuführen, allerdings nur für den nichtrelativistischen Fall.

Sheikh und Ring haben kürzlich unter Anwendung des von Onishi erweiterten Wickschen Theorems erstmals projizierte HFB-Gleichungen ableiten können, die eine exakte Lösung der Variationsaufgabe nach der Projektion zulassen [SR00]. Diese Gleichungen haben dieselbe formale Struktur wie die herkömmlichen unprojizierten HFB-Gleichungen, wobei lediglich die Form der mittleren Potentiale elaborierter ist. Dies hat den Vorteil, daß bereits existierende Computer-Codes, die bewährte numerische Techniken zur iterativen Lösung der HFB-Variationsaufgabe anwenden, mit relativ wenigen Änderungen auf Teilchenzahlprojektion erweitert werden können. Weitere Untersuchungen mit einem exakt lösbaren Modell haben anschließend gezeigt, daß die Lösung solcher Gleichungen bei den heutigen Rechenleistungen numerisch nicht wesentlich aufwendiger ist, als im unprojizierten Fall [SLR01].

In der vorliegenden Arbeit werden erstmals projizierte relativistische HFB-Gleichungen für endliche Kerne hergeleitet und gelöst. Insbesondere wird dem Effekt der Teilchenzahlprojektion auf die makroskopischen Eigenschaften des Kerns nachgegangen sowie der Frage, ob sie zu einer (qualitativ) besseren Beschreibung des Vielteilchensystems verhilft.

In den letzten Jahren konnten durch die Fortschritte in der Beschleuniger-Technologie eine immer wachsende Menge an Information erhalten werden, die schließlich zu einem genauen Aufschluß über die grundlegende Natur der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung im Inneren des Kerns verhelfen soll. Dabei kann man verschiedene Forschungsgebiete erkennen, die sich mit unterschiedlichen Aspekten der starken Wechselwirkung beschäftigen. Bei Zusammenstößen schwerer Ionen in relativistischen Energiebereichen wird die Natur des Quark-Gluonen-Plasmas und die Grundannahmen der QCD untersucht. Streuexperimente mit Elektronen und Muonen erforschen die Quark-Gluon-Freiheitsgrade der Hadronen und des Atomkerns generell. Schließlich werden durch Experimente bei niedrigeren Energien die Struktur und Dynamik des Atomkerns sowohl innerhalb als auch außerhalb des Stabilitätstals untersucht. Dabei fördern insbesondere die Untersuchungen der sogenannten *exotischen Kerne*, d.h. Kerne weitab vom Tal der β -Stabilität, mit „Radioactive Nuclear Beams“ Techniken [NuP00] neue Aspekte der effektiven Nuklearwechselwirkung zu Tage. Die Studie der Kernmaterie unter extremen Bedingungen wie z.B. hohen Temperaturen, schnell rotierende Kerne, Superdeformation, Neutronen- bzw. Protonenreiche Kerne u.a. soll Fragen beantworten, die nicht nur in sich interessant sind. Sie sind auch von wesentlicher Bedeutung für ein besseres Verständnis der Nukleosynthese und somit der Entstehung des Universums.

Sehr nahe an der Neutronenabbruchkante kann die schwache Bindung dazu führen, daß Valenzneutronen Orbitale besetzen, die sich aufgrund ihrer geringeren Zentrifugalbarriere über die eigentlichen Kerngrenzen hinaus ausdehnen. Bei leichten Kernen kann dies zur Bildung von Neutronen-Halos führen, bei schwereren Kernen können Neutronenhäute entstehen. Da

diese Phänomene unter Umständen nur bei ganz bestimmten Teilchenzahlen auftreten, eignen sich Kernsysteme mit einem übermäßigen Neutronenüberschuß besonders gut als Objekt der vorliegenden Untersuchung.

In Kapitel 1 wird die Grundlage für diese Untersuchungen, nämlich die Relativistische Mean-Field-Theorie, dargestellt. Ihre Lagrangedichte wird vorgestellt und die zugehörigen Bewegungsgleichungen werden abgeleitet. Hier wird die RMFT auf dem Niveau einer klassischen Feldtheorie behandelt.

In Kapitel 2 werden die Feldoperatoren durch die Einführung kanonischer Vertauschungsrelationen quantisiert. Dies ermöglicht die Berücksichtigung von Paarungskorrelationen. Es wird auf die Verletzung der Teilchenzahlsymmetrie hingewiesen, die zur Ableitung der relativistischen HFB-Gleichungen notwendig ist.

Nach einer kurzen Einleitung in die Grundlagen der HFB-Theorie befaßt sich das Kapitel 3 mit einer Methode, die eine Wiederherstellung der verletzten Symmetrien, und insbesondere der Teilchenzahlsymmetrie, erlauben. Unter Anwendung von Techniken der Dichtefunktionaltheorie werden hier teilchenzahlprojizierte Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen hergeleitet.

Kapitel 4 verknüpft den in den zwei vorigen Kapiteln entwickelten Formalismus mit der Relativistischen Mean-Field-Theorie.

Kapitel 5 gibt einen Überblick über die praktische Lösung der Gleichungen. Insbesondere werden die teilchenzahlprojizierten relativistischen HB-Gleichungen für sphärische Kerne vorgestellt und ihr Lösungsansatz diskutiert.

In Kapitel 6 werden Ergebnisse für drei exotische Isotopenketten dargestellt und diskutiert. Dabei wird untersucht, inwiefern die Teilchenzahlprojektion Phänomene wie Neutronenhaut und Neutronenhalo beeinflusst.

Es folgt eine abschließende Zusammenfassung mit einer kurzen Diskussion der Ergebnisse sowie einem Ausblick auf mögliche weitere Untersuchungen für die Zukunft.

1 Die Relativistische Mean-Field-Theorie

Im folgenden wird die Relativistische Mean-Field-Theorie (RMFT), die für die Beschreibung des Atomkerns als Vielteilchensystem verwendet wird, vorgestellt. Zunächst wird die Lagrangedichte präsentiert. Anschließend werden die zugehörigen Bewegungsgleichungen abgeleitet und angenommene Näherungen diskutiert.

1.1 Die Lagrangedichte

Grundlage der RMFT ist eine lokale lorentzinvariante klassische Lagrangedichte, die den Atomkern als ein System von punktförmigen, durch Austausch von Mesonen miteinander wechselwirkenden Nukleonen beschreibt [SW86]:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_N + \mathcal{L}_M + \mathcal{L}_{\text{int}} . \quad (1.1)$$

Der erste Term stellt A freie Nukleonen dar:

$$\mathcal{L}_N = \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i (i\gamma_\mu \partial^\mu - M) \psi_i , \quad (1.2)$$

wobei ψ_i ein Dirac-Spinor und M die Nukleonenmasse ist.

Der Term \mathcal{L}_M enthält den freien Mesonenanteil. In dieser Arbeit werden folgende Mesonen berücksichtigt, die durch ihre Quantenzahlen Spin J , Parität π und Isospin T gekennzeichnet werden:

- Das skalare σ -Meson ($J^\pi = 0^+, T = 0$) führt zu einer starken Attraktion bei mittleren Abständen.
- Das isoskalare Vektormeson ω ($1^-, 0$) ist für den abstoßenden Anteil der Kernkraft bei kleinen Abständen verantwortlich.

- Das isovektorielle Vektormeson ρ ($1^-, 1$) sorgt für die Isospin-Abhängigkeit der Wechselwirkung.
- Und schließlich das Photon ($1^-, 0$), das die elektromagnetische (Coulomb) Wechselwirkung zwischen den Protonen vermittelt.

Das frei existierende Meson π ($0^-, 1$) wird hier trotz seiner Bedeutung als Vermittler der langreichweitigen Attraktion zwischen den Nukleonen nicht explizit berücksichtigt, da das entsprechende mittlere Feld die Parität verletzt. Experimentell wird jedoch festgestellt, daß die Parität in sehr guter Näherung erhalten ist, was in einer Mittelfeldbeschreibung reproduziert werden muß. Der Austausch eines σ -Mesons kann jedoch als Austausch zwei korrelierter Pionen verstanden werden [Ser92], welcher nichts an der Parität des Kerns ändert. So werden durch die Berücksichtigung des fiktiven σ -Mesons kompliziertere Prozesse simuliert, die zur phänomenologischen Beschreibung des starken attraktiven Teils der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung notwendig sind.

Der freie Mesonenteil der Lagrangedichte, bestehend aus kinetischen und Massenbeiträgen lautet also:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_M = & \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 \\
& - \frac{1}{4} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu \\
& - \frac{1}{4} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \vec{\rho}^\mu \\
& - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu},
\end{aligned} \tag{1.3}$$

mit den Feldtensoren

$$\Omega^{\mu\nu} = \partial^\mu \omega^\nu - \partial^\nu \omega^\mu, \tag{1.4a}$$

$$\vec{R}^{\mu\nu} = \partial^\mu \vec{\rho}^\nu - \partial^\nu \vec{\rho}^\mu, \tag{1.4b}$$

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \tag{1.4c}$$

Der dritte Term in der Lagrangedichte (1.1) stellt die Wechselwirkung zwischen Nukleonen und Mesonen dar:

- Das σ -Meson koppelt minimal an die Fermionenmassen:

$$\mathcal{L}_{\text{int}}^\sigma = -g_\sigma \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \psi_i \sigma. \tag{1.5a}$$

- Die Kopplung des ω -Mesons erfolgt minimal an die aus den Fermionfeldern konstruierbare Vektorgröße, den Baryonenstrom:

$$\mathcal{L}_{\text{int}}^{\omega} = -g_{\omega} \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma_{\mu} \omega^{\mu} \psi_i . \quad (1.5b)$$

- Das ρ -Meson wird minimal an den isovektoriellen Fermionenstrom angekoppelt:

$$\mathcal{L}_{\text{int}}^{\rho} = -g_{\rho} \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma_{\mu} \vec{\tau} \vec{\rho}^{\mu} \psi_i . \quad (1.5c)$$

- Das Photon koppelt linear an den Protonenstrom:

$$\mathcal{L}_{\text{int}}^A = -e \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma_{\mu} \frac{1 - \tau_3}{2} A^{\mu} \psi_i . \quad (1.5d)$$

Dabei stellen g_{σ} , g_{ω} und g_{ρ} Kopplungskonstanten des Modells dar, $\vec{\tau}$ den aus Spinmatrizen bestehenden Isovektor.

Wie oben vorgestellt, enthält die Lagrangedichte des Modells nur lineare Kopplungsterme. Es hat sich jedoch herausgestellt, daß wesentliche Eigenschaften sowohl von Kernmaterie, wie z.B. Kompressibilität, als auch von endlichen Kernen, insbesondere Oberflächeneigenschaften, in diesem einfachen Modell nicht reproduziert werden können. Boguta und Bodmer [BB77] haben daraufhin den σ -Massenterm in der Gleichung (1.3) durch ein Polynom vierter Ordnung

$$U(\sigma) = \frac{1}{2} m_{\sigma}^2 \sigma^2 + \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 + \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 \quad (1.6)$$

ergänzt. Die Parameter g_2 und g_3 sind zusätzlich anzupassen. Da das σ -Feld stark abhängig von der Kerndichte ist, entspricht diese Selbstkopplung der σ -Felder in gewisser Weise einer Dichteabhängigkeit der σ -Masse, die auch aus grundlegenden Argumenten zu erwarten ist [BT92]. Die Selbstkopplung des σ -Mesons ist jedoch nur eine Möglichkeit zur Einführung von Nichtlinearität. In der letzten Zeit wird es auch mit Nichtlinearität in den ω - und ρ -Feldern experimentiert [Bod91, ST94, SAF00].

Zusammenfassend erhält man also folgende Lagrangedichte für die RMFT:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = & \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i (i\gamma_\mu \partial^\mu - M) \psi_i \\
& + \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 - \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 - g_\sigma \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \psi_i \sigma \\
& - \frac{1}{4} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu - g_\omega \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma_\mu \omega^\mu \psi_i \\
& - \frac{1}{4} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \vec{\rho}^\mu - g_\rho \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma_\mu \vec{\tau} \vec{\rho}^\mu \psi_i \\
& - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - e \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma_\mu \frac{1 - \tau_3}{2} A^\mu \psi_i .
\end{aligned} \tag{1.7}$$

Gleichung (1.7) stellt die Lagrangedichte einer relativistischen Feldtheorie dar, die nun quantisiert und nach den Methoden der Quantenfeldtheorie behandeln werden könnte [IZ80]. Die Kopplungen sind jedoch sehr stark, was eine Behandlung im Rahmen einer Störungstheorie verhindert. In der Praxis wird stattdessen die Lagrangedichte (1.7) auf klassischer Ebene behandelt, was vom Standpunkt einer Quantenfeldtheorie der Ersetzung der Quantenfelder durch Erwartungswerte in geeigneten Zuständen entspricht.

1.2 Bewegungsgleichungen und Näherungen

Im Rahmen einer klassischen Feldtheorie wird die Dynamik des Systems durch das Hamiltonsche Variationsprinzip bestimmt. Für jede generalisierte Koordinate $q_i = \psi_i, \sigma, \omega^\mu, \vec{\rho}^\mu, A^\mu$ muß die totale Variation der Wirkung verschwinden:

$$\delta S = \delta \int d^4x \mathcal{L}(q_i, \partial_\mu q_i) = 0. \tag{1.8}$$

Dies führt zu den Euler–Lagrange–Gleichungen

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu q_i)} \right], \tag{1.9}$$

aus der sich für die Nukleonen die Diracgleichung

$$\left[\gamma^\mu \left(i\partial_\mu - g_\omega \omega_\mu - g_\rho \vec{\tau} \vec{\rho}_\mu - e \frac{1 - \tau_3}{2} A_\mu \right) - (M + g_\sigma \sigma) \right] \psi = 0, \tag{1.10}$$

für das σ -Meson die Klein-Gordon-Gleichung

$$(\partial^\mu \partial_\mu - m_\sigma^2) \sigma = -g_\sigma \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \psi_i - g_2 \sigma^2 - g_3 \sigma^3, \quad (1.11)$$

für das ω - und ρ -Meson die Proca-Gleichungen

$$\partial_\nu \Omega^{\nu\mu} + m_\omega^2 \omega^\mu = g_\omega \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma^\mu \psi_i, \quad (1.12)$$

$$\partial_\nu \vec{R}^{\nu\mu} + m_\rho^2 \vec{\rho}^\mu = g_\rho \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma^\mu \vec{\tau} \psi_i, \quad (1.13)$$

und für das elektromagnetische Feld die Maxwellgleichung

$$\partial_\nu F^{\nu\mu} = e \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma^\mu \frac{1}{2} (1 - \tau_3) \psi_i \quad (1.14)$$

ergeben.

Aus der Diracgleichung läßt sich folgende Kontinuitätsgleichung ableiten, aus der die Erhaltung der Baryonenstromdichte folgt:

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad \text{mit} \quad j^\mu = \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma^\mu \psi_i. \quad (1.15)$$

Damit lassen sich die Proca-Gleichungen zu Klein-Gordon-Gleichungen für die einzelnen Komponenten der Vektorfelder vereinfachen:

$$(\partial_\nu \partial^\nu + m_\omega^2) \omega^\mu = g_\omega \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma^\mu \psi_i, \quad (1.16)$$

$$(\partial_\nu \partial^\nu + m_\rho^2) \vec{\rho}^\mu = g_\rho \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma^\mu \vec{\tau} \psi_i. \quad (1.17)$$

In der Lorentzzeichnung

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \quad (1.18)$$

ergibt sich für das Photonenfeld

$$\partial_\nu \partial^\nu A^\mu = e \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \gamma^\mu \frac{1}{2} (1 - \tau_3) \psi_i. \quad (1.19)$$

Da die Lagrangedichte (1.7) nicht explizit von den Koordinaten x^μ abhängt, erfüllt der Energie–Impuls–Tensor

$$T^{\mu\nu} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu q_i)} \partial^\nu q_i - g^{\mu\nu} \mathcal{L} \quad (1.20)$$

die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0 , \quad (1.21)$$

aus der die Erhaltung von Gesamtenergie und Gesamtimpuls des Systems

$$p^\mu = \int d^3x T^{0\mu} \quad (1.22)$$

folgt.

Um obige Bewegungsgleichungen weiterhin zu vereinfachen, berücksichtigt man physikalische Symmetrien des zu betrachtenden Systems: Erstens beschränkt man sich auf stationäre Lösungen der Bewegungsgleichungen. Bei der sogenannten *Stationären Näherung* wird die Zeitabhängigkeit der Lösungen für die Spinoren ψ_i durch den Faktor $\exp(i\varepsilon_i t/\hbar)$ beschrieben, wobei ε_i die Einteilchenenergie des entsprechenden Spinors darstellt. Zweitens erlegt man dem System *Zeitumkehrinvarianz* auf. Somit verschwinden die räumlichen Komponenten der Vierervektoren ω^μ , $\vec{\rho}^\mu$ und A^μ . Ferner gilt die *Ladungserhaltung*. Dadurch wird nur die dritte Komponente des Isektors $\vec{\rho}^\mu$ benötigt, von dem nun lediglich ρ_3^0 übrigbleibt.

Nach diesen Vereinfachungen nimmt die Diracgleichung für die Nukleonen folgende Form an:

$$\{-i \boldsymbol{\alpha} \nabla + V(\mathbf{r}) + \beta [M + S(\mathbf{r})]\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) , \quad (1.23)$$

wobei $\beta = \gamma^0$ und $\alpha^i = \beta^{-1} \gamma^i$ ($i = 1, 2, 3$).

Zwei Potentiale treten in der Diracgleichung auf: das vektorielle Potential

$$V(\mathbf{r}) = g_\omega \omega^0(\mathbf{r}) + g_\rho \tau_3 \rho_3^0(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} e (1 - \tau_3) A^0(\mathbf{r}) \quad (1.24)$$

und das skalare Potential

$$S(\mathbf{r}) = g_\sigma \sigma(\mathbf{r}) . \quad (1.25)$$

Letzteres trägt zu einer effektiven, nichtkonstanten Nukleonenmasse bei:

$$M^*(\mathbf{r}) = M + S(\mathbf{r}) . \quad (1.26)$$

Die Klein–Gordon–Gleichungen für die Mesonenfelder lauten nun

$$(-\Delta + m_\sigma^2) \sigma(\mathbf{r}) = -g_\sigma \rho_s(\mathbf{r}) - g_2 \sigma^2(\mathbf{r}) - g_3 \sigma^3(\mathbf{r}) , \quad (1.27a)$$

$$(-\Delta + m_\omega^2) \omega^0(\mathbf{r}) = g_\omega \rho_v(\mathbf{r}) , \quad (1.27b)$$

$$(-\Delta + m_\rho^2) \rho_3^0(\mathbf{r}) = g_\rho \rho_3(\mathbf{r}) , \quad (1.27c)$$

$$-\Delta A^0(\mathbf{r}) = e \rho_p(\mathbf{r}) \quad (1.27d)$$

mit den zugehörigen Quellen:

$$\rho_s = \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i \psi_i \quad (\text{Skalare Dichte}), \quad (1.28a)$$

$$\rho_v = \sum_{i=1}^A \psi_i^+ \psi_i \quad (\text{Vektorielle Dichte}), \quad (1.28b)$$

$$\rho_3 = \sum_{i=1}^A \psi_i^+ \tau_3 \psi_i \quad (\text{Isovektorielle Dichte}), \quad (1.28c)$$

$$\rho_p = \sum_{i=1}^A \psi_i^+ \frac{1}{2}(1 + \tau_3) \psi_i \quad (\text{Protonendichte}). \quad (1.28d)$$

Durch die *Mean-Field-Näherung* ergibt sich, daß die Nukleonen ausschließlich durch die Mesonenfelder miteinander wechselwirken und sich somit frei in einem mittleren Potential bewegen. Dieses wird wiederum selbstkonsistent durch die Nukleonenverteilungen bestimmt, die als Quelle in den Klein-Gordon-Gleichungen auftreten.

Das Spektrum der Diracgleichung (1.23) enthält nicht nur Lösungen positiver Energie, sondern gleichermaßen die Antiteilchenzustände des Diracsees. Im Prinzip sollen in einer vollen relativistischen Beschreibung alle Lösungen berücksichtigt werden, in der Praxis führt dies zu Divergenzen in der Energie und anderen Observablen. Im Fall von endlichen Kernen ist eine exakte Renormierung extrem kompliziert, da die zugehörigen Gleichungen nur numerisch zu lösen sind und die Struktur der divergierenden Terme sich folglich nicht analytisch erkennen läßt. Um dies zu umgehen, werden in der sogenannten *No-Sea-Näherung* die im Grundzustand besetzten Zustände negativer Energie und somit die Vakuumpolarisation vernachlässigt.

Die RMFT ist also als effektive Feldtheorie im Rahmen der Mean-Field- und No-Sea-Näherungen zu betrachten. In diesem Zusammenhang wird angenommen, daß die Anpassung der freien Parameter der Theorie an experimentelle Daten die in diesen Näherungen vernachlässigten Vielteilchen- und Vakuumpolarisationseffekte effektiv berücksichtigt.

2 Relativistische Theorie der Paarungskorrelationen

In der Relativistischen Mean-Field-Theorie werden die Mesonen als klassische Felder behandelt (siehe Kapitel 1). Als Konsequenz stellt der RMFT-Hamiltonoperator einen Einteilchenoperator dar, der nur Terme der Struktur $\psi^+\psi$ enthält. Paarungskorrelationen erforderliche Cooperpaare vom Typ $\psi^+\psi^+$ kommen im Rahmen dieser Näherung nicht vor. Es stellt sich im folgenden heraus, daß durch die Quantisierung der Theorie Zweiteilchenwechselwirkungen hervorgehen und somit die Berücksichtigung von Paarungskorrelationen ermöglichen.

2.1 Quantisierung der Theorie und Bewegungsgleichungen

Die Quantisierung der Theorie erfolgt durch die Einführung kanonischer Vertauschungsrelationen. Für die Nukleonenfelder sind diese die Antikommutatoren zu gleichen Zeiten:

$$\{\psi_\alpha(\mathbf{r}, t), \psi_\beta^+(\mathbf{r}', t)\} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2.1a)$$

$$\{\psi_\alpha(\mathbf{r}, t), \psi_\beta(\mathbf{r}', t)\} = \{\psi_\alpha^+(\mathbf{r}, t), \psi_\beta^+(\mathbf{r}', t)\} = 0 , \quad (2.1b)$$

wobei α und β die Dirac-Indizes an den Fermionenfeldern darstellen.

Für die Mesonenfelder gelten die Kommutatoren

$$[\Phi_\mu(\mathbf{r}, t), \Pi_\nu^+(\mathbf{r}', t)] = i \delta_{\mu\nu} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2.2a)$$

$$[\Phi_\mu(\mathbf{r}, t), \Phi_\nu(\mathbf{r}', t)] = [\Pi_\mu^+(\mathbf{r}, t), \Pi_\nu^+(\mathbf{r}', t)] = 0 , \quad (2.2b)$$

wobei Φ_μ eines der Mesonenfelder σ , ω^μ , $\vec{\rho}^\mu$, A^μ und Π_μ den entsprechenden Impuls darstellt. Bei den Vektorfeldern sind μ und ν Lorentzindizes.

Die explizite Form des konjugierten Impulses lautet:

$$\pi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}(\mathbf{r}, t)} , \quad (2.3)$$

mit

$$\dot{q}_i \equiv \partial_0 q_i . \quad (2.4)$$

Der Hamiltonoperator des Systems ergibt sich als Legendre–Transformierte der Lagrange–dichte:

$$H(\pi_i, q_i) = \int d^3r \left[\sum_i \pi_i(\mathbf{r}, t) \dot{q}_i(\mathbf{r}, t) - \mathcal{L}(\dot{q}_i, q_i) \right] , \quad (2.5)$$

Analog zur Lagrangedichte (1.7) weist der Hamiltonoperator des Systems folgende Struktur auf:

$$H = H_N + H_M + H_{\text{int}} . \quad (2.6)$$

Für den freien Nukleonen– bzw. Mesonenanteil ergibt sich

$$H_N = \int d^3r \psi^\dagger (-i \boldsymbol{\alpha} \nabla + \beta M) \psi , \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} H_M = \int d^3r \left[\frac{1}{2} (\Pi_\sigma \Pi_\sigma + \nabla \sigma \cdot \nabla \sigma + m_\sigma^2 \sigma^2) + \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 + \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 \right. \\ - \frac{1}{2} (\Pi_\omega^\mu \Pi_{\omega\mu} + \nabla \omega^\mu \cdot \nabla \omega_\mu + m_\omega^2 \omega^\mu \omega_\mu) \\ - \frac{1}{2} (\vec{\Pi}_\rho^\mu \vec{\Pi}_{\rho\mu} + \nabla \vec{\rho}^\mu \cdot \nabla \vec{\rho}_\mu + m_\rho^2 \vec{\rho}^\mu \vec{\rho}_\mu) \\ \left. - \frac{1}{2} (\Pi_A^\mu \Pi_{A\mu} + \nabla A^\mu \cdot \nabla A_\mu) \right] . \end{aligned} \quad (2.8)$$

Die Wechselwirkung zwischen Nukleonen und Mesonen wird durch den Operator

$$H_{\text{int}} = \int d^3r \bar{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \Gamma_{\alpha\beta}^\mu \psi_\beta(\mathbf{r}, t) \Phi_\mu(\mathbf{r}, t) \quad (2.9)$$

beschrieben mit folgenden Vertexfunktionen für die einzelnen Mesonen:

$$\Gamma_{\alpha\beta} = g_\sigma \delta_{\alpha\beta} \quad \text{für das } \sigma\text{-Meson,} \quad (2.10a)$$

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\mu = g_\omega \gamma_{\alpha\beta}^\mu \quad \text{für das } \omega\text{-Meson,} \quad (2.10b)$$

$$\vec{\Gamma}_{\alpha\beta}^\mu = g_\rho \gamma_{\alpha\beta}^\mu \vec{\tau} \quad \text{für das } \rho\text{-Meson,} \quad (2.10c)$$

und schließlich

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\mu = e \gamma_{\alpha\beta}^\mu \frac{1}{2} (1 + \tau_3) \quad \text{für das Photon.} \quad (2.10d)$$

Die Feldoperatoren nehmen in der Heisenbergischen Darstellung die Form

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iHt} \psi(\mathbf{r}, 0) e^{-iHt} , \quad (2.11a)$$

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = e^{iHt} \Phi(\mathbf{r}, 0) e^{-iHt} \quad (2.11b)$$

an und erfüllen die Bewegungsgleichung

$$[H, \psi] = -i\dot{\psi} \quad (2.12a)$$

bzw.

$$[H, \Phi] = -i\dot{\Phi} . \quad (2.12b)$$

Der Übersicht halber werden im folgenden die räumlichen und zeitlichen Koordinaten sowie die Dirac-Indizes zu einem einheitlichen Index $a \equiv (\alpha, \mathbf{r})$ zusammengefaßt, sodaß

$$\psi_a \equiv \psi_\alpha(\mathbf{r}, t) \quad \text{usw.} \quad (2.13)$$

Man führt nun die Zweipunkt-Green-Funktion

$$G_{ab} = -i\langle A | T \psi_a \bar{\psi}_b | A \rangle \quad (2.14)$$

ein, wobei $|A\rangle$ der exakte Grundzustand des aus A -Nukleonen bestehenden Kernsystems und T der Zeitordnungsoperator ist.

Durch Differentiation nach der Zeit ergibt sich unter Berücksichtigung von Gleichung (2.12a) folgende Bewegungsgleichung für die Größen G_{ab} :

$$\sum_c (\not{p} - M)_{ac} G_{cb} = \delta_{ab} - i \sum_{cm} \Gamma_{ac}^m \langle A | T \psi_c \Phi_m \bar{\psi}_b | A \rangle , \quad (2.15)$$

mit

$$\not{p} \equiv \gamma_\mu p^\mu = \gamma_0(i\partial_0 - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) . \quad (2.16)$$

Zusätzlich werden zur Beschreibung von Paarungskorrelationen die sogenannten anomalen Green-Funktionen eingeführt [Gor58]:

$$F_{ab} = -i\langle A + 2 | T \bar{\psi}_a \bar{\psi}_b | A \rangle , \quad (2.17a)$$

$$\tilde{F}_{ab} = -i\langle A | T \psi_a \psi_b | A + 2 \rangle . \quad (2.17b)$$

Die Bewegungsgleichung für die Größen F_{ab} ist

$$\sum_c (\not{p} - M)_{ac} F_{cb} = -i \sum_{cm} \Gamma_{ca}^m \langle A + 2 | T \bar{\psi}_c \Phi_m \bar{\psi}_b | A \rangle , \quad (2.18)$$

mit der Definition

$$\not{p} \equiv \gamma_0(-i\partial_0 - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) . \quad (2.19)$$

2.2 Eliminierung der bosonischen Freiheitsgrade

Gleichung (2.12b) führt zu den Klein–Gordon–Gleichungen für das Meson μ in Operatorform:

$$(\partial_\nu \partial^\nu + m_\mu^2) \Phi^m = \mp \sum_{ab} \bar{\psi}_a \Gamma_{ab}^m \psi_b, \quad (2.20)$$

mit den lokalen Vertexfunktionen

$$\Gamma_{ab}^m \equiv \Gamma_{\alpha\beta}^\mu \delta(r_a - r_b) \delta(r_a - r_m). \quad (2.21)$$

Das obere Vorzeichen in (2.20) gilt für skalare, das untere für vektorielle Mesonen. Die σ –Selbstkopplungsterme wurden dabei vorerst weggelassen. Dieser Punkt wird im Kapitel 4 noch einmal diskutiert.

Als Lösung der obigen Gleichung erhält man die Feldoperatoren

$$\Phi^m = \mp \sum_{abm'} D^{mm'} \bar{\psi}_a \Gamma_{ab}^{m'} \psi_b, \quad (2.22)$$

wobei $D^{mm'}$ den Mesonenpropagator darstellt [IZ80]:

$$D^{mm'} = -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k \frac{e^{-ik(r-r')}}{k^2 - m_\mu^2 + i\varepsilon} \delta_{\mu\mu'}. \quad (2.23)$$

Für vektorielle Mesonen ist $\delta_{\mu\mu'}$ durch den metrischen Tensor $g^{\mu\mu'}$ zu ersetzen.

Mit Hilfe von Gleichung (2.22) lassen sich die bosonischen Freiheitsgrade eliminieren und man erhält Gleichungen für die Green–Funktionen, die nur fermionische Operatoren enthalten:

$$\sum_c (\not{p} - M)_{ac} G_{cb} = \delta_{ab} \mp i \sum_{cdemm'} \Gamma_{ac}^m D_{mm'} \Gamma_{de}^{m'} \langle A | T \psi_e \bar{\psi}_d \psi_c \bar{\psi}_b | A \rangle, \quad (2.24a)$$

$$\sum_c (\not{p} - M)_{ac} F_{cb} = \mp i \sum_{cdemm'} \Gamma_{ca}^m D_{mm'} \Gamma_{de}^{m'} \langle A + 2 | T \psi_e \bar{\psi}_d \bar{\psi}_c \bar{\psi}_b | A \rangle. \quad (2.24b)$$

2.3 Die Gor'kov–Faktorisierung

Das Gleichungssystem (2.24) ist zwar exakt aber aufgrund der unbekanntenen Vierpunkt–Green–Funktionen in der rechten Seite nicht geschlossen. Dieses Problem wird durch Anwendung der Gor'kov–Faktorisierung [Gor58] beseitigt, die die Vierpunkt–Green–Funktion durch das Produkt von Zweipunkt–Green–Funktionen annähert:

$$\begin{aligned} \langle A | T \psi_e \bar{\psi}_d \psi_c \bar{\psi}_b | A \rangle &\approx \langle A | T \psi_e \bar{\psi}_d | A \rangle \langle A | T \psi_c \bar{\psi}_b | A \rangle \\ &\quad - \langle A | T \psi_c \bar{\psi}_d | A \rangle \langle A | T \psi_e \bar{\psi}_b | A \rangle \\ &\quad - \langle A | T \psi_e \psi_c | A + 2 \rangle \langle A + 2 | T \bar{\psi}_d \bar{\psi}_b | A \rangle \\ &= -G_{ed} G_{cb} + G_{cd} G_{eb} + \tilde{F}_{ec} F_{db}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Der erste Term in der Summe stellt den direkten oder Hartree–Term dar, der zweite Term den Austausch– oder Fock–Term. Der dritte Term ist für die Beschreibung von Paarungskorrelationen verantwortlich und wird Gor’kov–Term genannt. Die Vernachlässigung der beiden letzten Terme führt zur Mean–Field–Näherung, die im vorigen Kapitel diskutiert wurde. In analoger Weise erhält man

$$\langle A + 2 | T \psi_e \bar{\psi}_d \bar{\psi}_c \bar{\psi}_b | A \rangle \approx -G_{ed} F_{cb} + G_{ec} F_{db} + F_{dc} G_{eb} . \quad (2.26)$$

Genauergenommen sollte in der obigen Gleichung statt G_{ab} die normale Green–Funktion des $(A + 2)$ –Teilchen–Systems stehen. Die Vernachlässigung dieses Unterschiedes führt zu der aus der BCS–Theorie wohlbekannten Verletzung der Teilchenzahlsymmetrie.

Mit der Konvention, daß über gleiche Indizes summiert wird, läßt sich das Gleichungssystem (2.24) nun schreiben:

$$\begin{aligned} (\not{p} - M)_{ac} G_{cb} &= \delta_{ab} \pm i \Gamma_{ac}^m D_{mm'} \Gamma_{de}^{m'} G_{ed} G_{cb} \\ &\mp i \Gamma_{ae}^m D_{mm'} \Gamma_{dc}^{m'} G_{ed} G_{cb} \\ &\mp i \Gamma_{ad}^m D_{mm'} \Gamma_{ce}^{m'} \tilde{F}_{ed} F_{cb} , \end{aligned} \quad (2.27a)$$

$$\begin{aligned} (\not{p} - M)_{ca} F_{cb} &= \pm i \Gamma_{ca}^m D_{mm'} \Gamma_{de}^{m'} G_{ed} F_{cb} \\ &\mp i \Gamma_{da}^m D_{mm'} \Gamma_{ce}^{m'} G_{ed} F_{cb} \\ &\pm i \Gamma_{ea}^m D_{mm'} \Gamma_{dc}^{m'} F_{de} G_{cb} . \end{aligned} \quad (2.27b)$$

2.4 Vernachlässigung der Retardierung

Im nächsten Schritt wird die Zeitabhängigkeit der Mesonenpropagatoren vernachlässigt. Dies wird als *instantane Näherung* bezeichnet und entspricht im Mesonenpropagator

$$\frac{i}{(k^0)^2 - \mathbf{k}^2 - m_\mu^2} \quad (2.28)$$

der Vernachlässigung der Energie k^0 gegen die große Masse der beteiligten Mesonen. Somit werden nur stationäre Mesonenfelder berücksichtigt, die mit der nukleonischen Struktur des Kernsystems stets im Gleichgewicht sind.

Mit dieser Näherung wird die Wechselwirkung lokal in der Zeit, sodaß bei gleichen Zeiten gilt

$$\tilde{F} = \gamma^0 F^* \gamma^0 . \quad (2.29)$$

Das Gleichungssystem (2.27) ist nun geschlossen.

2.5 Die Dirac–Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen

Mit Einführung der Einteilchendichte

$$\rho_{ab} \equiv \langle A | \psi_b^\dagger \psi_a | A \rangle \quad (2.30a)$$

und der anomalen Dichte (Paarungstensor)

$$\kappa_{ab} \equiv \langle A | \psi_b \psi_a | A \rangle \quad (2.30b)$$

nimmt das Gleichungssystem für die Green–Funktionen unter Berücksichtigung von (2.29) in Matrixform folgende Gestalt an:

$$\begin{pmatrix} (i\partial_0 - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} - \beta\Sigma)_{ac} & -\Delta_{ac} \\ \Delta_{ca}^* & (-i\partial_0 - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} - \beta\Sigma)_{ca} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{cb} \\ F_{cb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{ab} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Dabei ist

$$\Sigma_{ac} \equiv \delta_{ac}M + \Gamma_{ac}, \quad (2.32a)$$

$$\Gamma_{ac} \equiv V_{adce}\rho_{ed} - V_{adec}\rho_{ed}, \quad (2.32b)$$

$$\Delta_{ac} \equiv V_{acde}\kappa_{de}. \quad (2.32c)$$

Hierbei wurde folgendes zeitunabhängiges Zweiteilchenpotential definiert

$$V_{abcd} \equiv \mp \gamma^0 \Gamma_{ac}^m D^{mm'} \gamma^0 \Gamma_{bd}^{m'}. \quad (2.33)$$

Noch zu berücksichtigen ist die Zeitabhängigkeit der Funktionen G und F in der Gleichung (2.31). Wegen der zeitlichen Translationsinvarianz hängt G_{ab} lediglich von der Differenz $t_a - t_b$ ab. Bei F_{ab} kommt zusätzlich der Faktor $e^{-2i\lambda t_a}$ hinzu, dessen Ursprung von der quantenmechanischen Formel für die zeitliche Ableitung eines beliebigen Operators $O(t)$ herrührt:

$$\partial_t \langle A | O(t) | A + 2 \rangle = i(E_A - E_{A+2}) \langle A | O(t) | A + 2 \rangle. \quad (2.34)$$

Die Differenz zwischen den Grundzustandsenergien E_{A+2} und E_A beträgt 2λ , wobei $\lambda \equiv \partial E / \partial N$ das chemische Potential darstellt.

Durch eine Fourier–Transformation

$$\begin{pmatrix} G_{ab}(\omega) \\ F_{ab}(\omega) \end{pmatrix} \equiv \int dt e^{i(\omega+\lambda)t} \begin{pmatrix} G_{ab}(t) \\ F_{ab}(t) \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

wird die Zeitabhängigkeit anschließend eliminiert und man erhält für das Gleichungssystem (2.31)

$$(\omega - \mathcal{H}) \begin{pmatrix} G(\omega) \\ F(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

wobei

$$\mathcal{H} \equiv \begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

die relativistische Form der Hartree–Fock–Bogoliubov–Matrix darstellt, die in [KR91] Dirac–Hartree–Fock–Bogoliubov–Matrix genannt wurde, weil h den Dirac–Hamiltonoperator darstellt:

$$h = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta\Sigma . \quad (2.38)$$

Mit Hilfe einer Spektralzerlegung erhält man:

$$G_{ab}(\omega) = \sum_{\nu} \frac{U_{a\nu}U_{b\nu}^*}{\omega - e_{\nu} + i\eta} + \frac{V_{a\nu}^*V_{b\nu}}{\omega + e_{\nu} + i\eta} , \quad (2.39a)$$

$$F_{ab}(\omega) = \sum_{\nu} \frac{V_{a\nu}U_{b\nu}^*}{\omega - e_{\nu} - i\eta} + \frac{U_{a\nu}^*V_{b\nu}}{\omega + e_{\nu} - i\eta} . \quad (2.39b)$$

Die Pole der Green–Funktionen $G(\omega)$ und $F(\omega)$ sind die Quasiteilchenenergien und die Amplituden

$$U_{a\nu} = \langle A|\psi_a|A + 1, \nu \rangle , \quad (2.40a)$$

$$V_{a\nu} = \langle A|\psi_a^+|A - 1, \nu \rangle \quad (2.40b)$$

die HFB–Koeffizienten.

Somit wurde das relativistische Gegenstück zu den klassischen Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen hergeleitet, die sogenannten Dirac–Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen:

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{\nu} \\ V_{\nu} \end{pmatrix} = e_{\nu} \begin{pmatrix} U_{\nu} \\ V_{\nu} \end{pmatrix} . \quad (2.41)$$

Die Lösungen U_{ν} und V_{ν} stellen jeweils einen Dirac–Spinor dar:

$$\begin{pmatrix} U_{\nu} \\ V_{\nu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{\nu}^U \\ F_{\nu}^U \\ G_{\nu}^V \\ F_{\nu}^V \end{pmatrix} , \quad (2.42)$$

wobei G für die „große“ und F für die „kleine“ Komponente des Diracspinors steht. Daraus werden *relativistische Dichten*

$$\rho = VV^+ = \begin{pmatrix} G_V G_V^+ & G_V F_V^+ \\ F_V G_V^+ & F_V F_V^+ \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \kappa = VU^{\top} = \begin{pmatrix} G_V G_U^{\top} & G_V F_U^{\top} \\ F_V G_U^{\top} & F_V F_U^{\top} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

berechnet, die wiederum die Potentiale (2.32) bestimmen. Die Lösung des Systems hat somit selbstkonsistent zu erfolgen.

3 Symmetrie–Projizierte HFB–Gleichungen

Im letzten Kapitel wurde auf die Verletzung der Teilchenzahlsymmetrie hingewiesen, die bei der Ableitung der Dirac–Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen entsteht. In diesem Kapitel wird eine Projektionsmethode entwickelt, die es erlaubt, verletzte Symmetrien, und insbesondere die Teilchenzahlsymmetrie, wiederherzustellen. Das Ergebnis sind projizierte HFB–Gleichungen, die dieselbe algebraische Struktur ihrer unprojizierten Kontrahenten aufweisen und sich somit durch dieselben bewährten numerischen Techniken behandeln lassen. Lediglich die Ausdrücke für das Hartree–Fock–Potential und Paarungsfeld sind dabei aufwendiger.

Zunächst werden Grundlagen der HFB–Theorie vorgestellt. Die projizierte Energie wird dann eingeführt und durch Norm- und Hamiltonoperatorsüberläppe ausgedrückt. Anschließend wird es gezeigt, daß diese sich wiederum durch die HFB–Dichten ρ und κ ausdrücken lassen. Es folgt eine Ableitung der HFB–Gleichungen unter der Annahme, daß das Energiefunktional sich vollständig durch ρ und κ ausdrücken läßt. Schließlich werden teilchenzahlprojizierte HFB–Gleichungen hergeleitet.

3.1 Grundlagen der HFB–Theorie

Ausgangspunkt ist ein Hamiltonoperator, der im allgemeinen einen Einteilchenanteil und eine Zweiteilchenwechselwirkung beinhaltet:

$$H = \sum_{n_1 n_2} e_{n_1 n_2} \psi_{n_1}^+ \psi_{n_2} + \frac{1}{4} \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \psi_{n_1}^+ \psi_{n_2}^+ \psi_{n_4} \psi_{n_3}. \quad (3.1)$$

Die Feldoperatoren ψ_n^+ und ψ_n ($n = 1, \dots, M$) stellen Erzeugungs– bzw. Vernichtungsoperatoren dar. Die Vernichtungsoperatoren erfüllen

$$\psi_n |-\rangle = 0 \quad (3.2)$$

für alle n , wobei $|-\rangle$ das Fermionenvakuum darstellt. Das antisymmetrisierte Zweiteilchenmatrixelement wird definiert durch

$$\bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} = \langle n_1 n_2 | V | n_3 n_4 - n_4 n_3 \rangle . \quad (3.3)$$

Man führt nun einen Satz von *Quasiteilchenoperatoren* ein, die durch eine lineare Transformation der Feldoperatoren entstehen:

$$\alpha_k = \sum_n (U_{nk}^* \psi_n + V_{nk}^* \psi_n^+) , \quad (3.4a)$$

$$\alpha_k^+ = \sum_n (V_{nk} \psi_n + U_{nk} \psi_n^+) . \quad (3.4b)$$

Das Quasiteilchenvakuum $|\Phi\rangle$ ist eine verallgemeinerte Slater–Determinante und wird so definiert, daß

$$\alpha_k |\Phi\rangle = 0 \quad (3.5)$$

für alle k erfüllt wird. Im Zusammenhang einer Mittelfeldtheorie stellt $|\Phi\rangle$ eine Näherung für den Grundzustand des Systems dar. Da die Quasiteilchentransformation Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren vermischt, entspricht $|\Phi\rangle$ keinem Zustand mit scharfer Teilchenzahl.

In Matrixform nimmt die Quasiteilchentransformation (3.4) folgende Gestalt an:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^+ & V^+ \\ V^\top & U^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^+ \end{pmatrix} \equiv \mathcal{W}^+ \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^+ \end{pmatrix} . \quad (3.6)$$

Da die Quasiteilchenoperatoren dieselben Vertauschungsrelationen erfüllen müssen, wie die ursprünglichen Operatoren, muß die Transformationsmatrix \mathcal{W} unitär sein:

$$\mathcal{W}^+ \mathcal{W} = \mathcal{W} \mathcal{W}^+ = I . \quad (3.7)$$

Dies führt zu folgenden Relationen zwischen den Koeffizienten U_{nk} und V_{nk} :

$$U^+ U + V^+ V = I , \quad U U^+ + V^* V^\top = I , \quad (3.8a)$$

$$U^\top V + V^\top U = 0 , \quad U V^+ + V^* U^\top = 0 . \quad (3.8b)$$

Die im Kapitel 2 eingeführten Dichten lassen sich durch die Transformationskoeffizienten in folgender Form ausdrücken:

$$\rho = V^* V^\top , \quad (3.9a)$$

$$\kappa = V^* U^\top = -U V^+ \quad (3.9b)$$

Daraus wird ersichtlich, daß ρ hermitesch und κ antisymmetrisch ist:

$$\rho^\dagger = \rho, \quad (3.10a)$$

$$\kappa^\top = -\kappa. \quad (3.10b)$$

Weiterhin folgt aus den Unitaritätsrelationen:

$$\rho - \rho^2 = -\kappa\kappa^*, \quad (3.11a)$$

$$\rho\kappa = \kappa\rho^*. \quad (3.11b)$$

Valatin[Val61] definiert die verallgemeinerte Dichtenmatrix

$$\mathcal{R} \equiv \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = \mathcal{W} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathcal{W}^\dagger. \quad (3.12)$$

Mit Hilfe von (3.11a) folgt

$$\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}. \quad (3.13)$$

Es stellt sich heraus, daß die Matrix \mathcal{R} den HFB-Zustand $|\Phi\rangle$ eindeutig definiert. Desweiteren wird sie durch die Quasiteilchentransformation \mathcal{W} diagonalisiert [RS80].

Ein wichtiges Konzept der HFB-Theorie stellt die sogenannte *kanonische Basis* dar. In der kanonischen Basis ist die Dichtenmatrix ρ diagonal und ihre Eigenwerte sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten v_k^2 des Zustandes k . Der Paarungstensor κ nimmt in dieser Basis die kanonische Form an:

$$\kappa = \begin{pmatrix} 0 & u_1 v_1 & & & 0 \\ -u_1 v_1 & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & 0 & u_k v_k \\ & & & -u_k v_k & 0 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Die HFB-Wellenfunktionen weisen in der kanonischen Basis dieselbe Struktur wie BCS-Wellenfunktionen auf.

3.2 Die projizierte Energie

Man definiert einen allgemeinen Projektionsoperator

$$P^I = \int dg d^I(g) \hat{R}(g), \quad (3.15)$$

wobei $\hat{R}(g)$ einen Symmetrieoperator darstellt und das Integral über alle Elemente g der Symmetriegruppe läuft.

Unter der Annahme, daß der Hamiltonoperator H mit dem Symmetrieoperator $\hat{R}(g)$ kommutiert, ist die projizierte Energie gegeben durch:

$$E^I = \frac{\langle \Phi | H P^I | \Phi \rangle}{\langle \Phi | P^I | \Phi \rangle} = \frac{\int dg d^I(g) \langle \Phi | H \hat{R}(g) | \Phi \rangle}{\int dg d^I(g) \langle \Phi | \hat{R}(g) | \Phi \rangle}. \quad (3.16)$$

Es werden nun „gedrehte“ Slater–Determinanten definiert

$$|g\rangle \equiv \frac{\hat{R}(g) |\Phi\rangle}{\langle \Phi | \hat{R}(g) | \Phi \rangle}, \quad \text{mit } |0\rangle \equiv |\Phi\rangle, \quad (3.17)$$

und die Koeffizienten

$$x(g) \equiv d^I(g) \langle \Phi | \hat{R}(g) | \Phi \rangle \quad (3.18a)$$

und

$$y(g) \equiv \frac{x(g)}{\int dg x(g)}, \quad \text{soda\ss} \int dg y(g) = 1, \quad (3.18b)$$

eingeführt.

Letztere erfüllen

$$x(-g) = x^*(g), \quad (3.19a)$$

$$y(-g) = y^*(g), \quad (3.19b)$$

wobei ein negativer „Winkel“ die inverse Umdrehung bedeutet:

$$\hat{R}(-g) = \hat{R}^+(g). \quad (3.20)$$

Damit läßt sich die projizierte Energie (3.16) schreiben

$$E^I = \frac{\int dg x(g) \langle 0 | H | g \rangle}{\int dg x(g)} = \int dg y(g) \langle 0 | H | g \rangle. \quad (3.21)$$

3.3 Die Überlapp–Integrale

Um die Überlapp–Funktionen $\langle \Phi | \hat{R}(g) | \Phi \rangle$ und $\langle 0 | H | g \rangle$ zu berechnen, bedient man sich des von Onishi erweiterten Wickschen Theorems [RS80], das ermöglicht, diese Überlappe durch die HFB–Koeffizienten der Slater–Determinanten $|0\rangle = |\Phi\rangle$ und $|g\rangle \propto \hat{R}(g) |\Phi\rangle$ auszudrücken. Die HFB–Koeffizienten des Zustandes $|g\rangle$ sind gegeben durch

$$U_g = D_g U, \quad (3.22a)$$

$$V_g = D_g^* V, \quad (3.22b)$$

wobei die Matrix D_g den Symmetrieoperator $\hat{R}(g)$ in der Basis der Einteilchenzustände $|n\rangle = a_n^+ |-\rangle$ darstellt:

$$\{D_g\}_{nn'} \equiv \langle n | \hat{R}(g) | n' \rangle. \quad (3.23)$$

Aus (3.22) folgt

$$\mathcal{W}_g = \mathcal{D}_g \mathcal{W}, \quad (3.24)$$

wobei

$$\mathcal{D}_g \equiv \begin{pmatrix} D_g & 0 \\ 0 & D_g^* \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Mit Hilfe des Thouless-Theorems kann man das Quasiteilchenvakuum $|\Phi\rangle$ im Fall gerader Teilchenzahl durch die Feldoperatoren ausdrücken:

$$|\Phi\rangle = \mathcal{N} e^{\hat{Z}} |-\rangle, \quad (3.26)$$

mit

$$\hat{Z} = \sum_{n < n'} Z_{nn'} \psi_n^+ \psi_{n'}^+, \quad (3.27)$$

wobei die Matrix Z durch

$$Z = V^* U^{*-1} = -\rho \kappa^{*-1} \quad (3.28)$$

gegeben wird und \mathcal{N} ein Normierungsfaktor ist:

$$\mathcal{N} = \sqrt{|\text{Det } U|} = \text{Det}(1 - Z^* Z)^{-1/4}. \quad (3.29)$$

Somit läßt sich schreiben:

$$\langle \Phi | \hat{R}(g) | \Phi \rangle = |\text{Det } U| \langle - | e^{\hat{Z}^+} e^{\hat{Z}_g} | - \rangle, \quad (3.30)$$

mit

$$Z_g = V_g^* U_g^{*-1}. \quad (3.31)$$

Man führt nun die Funktion

$$G_g(\lambda) = \langle - | e^{\hat{Z}^+} e^{\lambda \hat{Z}_g} | - \rangle \quad (3.32)$$

ein. Sie erfüllt

$$\frac{d}{d\lambda} G_g(\lambda) = \frac{1}{2} G_g(\lambda) \text{Tr} \ln(1 - \lambda Z^* Z_g). \quad (3.33)$$

Die Integration obiger Differentialgleichung ergibt

$$G_g(\lambda) = e^{1/2 \text{Tr} \ln(1 - \lambda Z^* Z_g)} = \pm \sqrt{\text{Det}(1 - \lambda Z^* Z_g)} . \quad (3.34)$$

Setzt man nun den Ausdruck für $G_g(1)$ in (3.30) ein, so folgt

$$\langle \Phi | \hat{R}(g) | \Phi \rangle = \pm \sqrt{\frac{\text{Det}(1 - Z^* Z_g)}{\text{Det}(1 - Z^* Z)}} = \pm \sqrt{\text{Det} D_g} \sqrt{\text{Det} N_g} , \quad (3.35)$$

wobei die Matrix N_g definiert wurde durch

$$N_g \equiv U^\top U_g^* + V^\top V_g^* = U^\top D_g^* U^* + V^\top D_g V^* . \quad (3.36)$$

Für den Hamiltonoperatorsüberlapp ergibt die Onishi-Formel [RS80]

$$\langle 0 | H | g \rangle \equiv H(g) = H_{\text{sp}}(g) + H_{\text{ph}}(g) + H_{\text{pp}}(g) , \quad (3.37)$$

mit

$$H_{\text{sp}}(g) = \sum_{n_1 n_2} e_{n_1 n_2} \rho_{n_2 n_1}(g) = \text{Tr} [e \rho(g)] , \quad (3.38a)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{ph}}(g) &= \frac{1}{2} \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \rho_{n_3 n_1}(g) \rho_{n_4 n_2}(g) \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma(g) \rho(g)] \end{aligned} \quad (3.38b)$$

und

$$\begin{aligned} H_{\text{pp}}(g) &= \frac{1}{4} \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \bar{\kappa}_{n_1 n_2}^*(g) \kappa_{n_3 n_4}(g) \\ &= -\frac{1}{2} \text{Tr} [\Delta(g) \bar{\kappa}^*(g)] = -\frac{1}{2} \text{Tr} [\bar{\Delta}^*(g) \kappa(g)] . \end{aligned} \quad (3.38c)$$

Dabei wurden folgende Felder eingeführt:

$$\Gamma_{n_1 n_3}(g) = \sum_{n_2 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \rho_{n_4 n_2}(g) , \quad (3.39a)$$

$$\Delta_{n_1 n_2}(g) = \frac{1}{2} \sum_{n_3 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \kappa_{n_3 n_4}(g) , \quad (3.39b)$$

$$\bar{\Delta}_{n_1 n_2}^*(g) = \frac{1}{2} \sum_{n_3 n_4} \bar{\kappa}_{n_3 n_4}^*(g) \bar{v}_{n_3 n_4 n_1 n_2} , \quad (3.39c)$$

$$\bar{\Delta}_{n_1 n_2}(g) = \frac{1}{2} \sum_{n_3 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \bar{\kappa}_{n_3 n_4}(g) . \quad (3.39d)$$

Die oben auftretenden *generalisierten Dichten* sind gegeben durch

$$\rho_{nn'}(g) = \langle 0 | \psi_{n'}^+ \psi_n | g \rangle = \{ V_g^* N_g^{-1} V^\top \}_{nn'} , \quad (3.40a)$$

$$\kappa_{nn'}(g) = \langle 0 | \psi_{n'} \psi_n | g \rangle = \{ V_g^* N_g^{-1} U^\top \}_{nn'} , \quad (3.40b)$$

$$-\bar{\kappa}_{nn'}^*(g) = \langle 0 | \psi_{n'}^+ \psi_n^+ | g \rangle = \{ U_g^* N_g^{-1} V^\top \}_{nn'} . \quad (3.40c)$$

Um die projizierte Energie als Funktional der Dichten (3.9) zu schreiben, werden die Überlappe nun ebenfalls durch diese ausgedruckt:

$$\langle \Phi | \hat{R}(g) | \Phi \rangle = \pm \frac{\text{Det } D_g}{\sqrt{\text{Det } \rho \text{ Det } C_g}} , \quad (3.41)$$

mit

$$C_g^{-1} \equiv \rho \rho_g - \kappa \kappa_g^* , \quad (3.42)$$

wobei die „gedrehten“ *Dichten* eingefuhrt wurden:

$$\rho_g = D_g \rho D_g^+ , \quad \rho_{-g} = D_g^+ \rho D_g , \quad (3.43a)$$

$$\kappa_g = D_g \kappa D_g^\top , \quad \kappa_{-g} = D_g^+ \kappa D_g^* , \quad (3.43b)$$

$$Z_g = D_g Z D_g^\top , \quad Z_{-g} = D_g^+ Z D_g^* . \quad (3.43c)$$

Auch die Hamiltonoperatorsubelappe (3.38) konnen durch die HFB–Dichten mittels folgender Relationen ausgedruckt werden:

$$\rho(g) = \rho_g C_g \rho , \quad (3.44a)$$

$$\kappa(g) = \rho_g C_g \kappa , \quad (3.44b)$$

$$\bar{\kappa}^*(g) = \kappa_g^* C_g \rho . \quad (3.44c)$$

3.4 Die Variationsgleichungen

Im letzten Abschnitt wurde die projizierte Energie als Funktional der HFB–Dichten ρ und κ ausgedruckt. Diese sollte nun nach den unabhangigen Variablen ρ_{nn} , $\text{Re } \rho_{n'n}$, $\text{Im } \rho_{n'n}$, $\text{Re } \kappa_{n'n}$ und $\text{Im } \kappa_{n'n}$ fur $n < n'$ unter der Zwangsbedingung $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}$ variiert werden. Dies ist aquivalent mit einer Variation nach den unabhangigen Parametern ρ_{nn} , $\rho_{n'n}$, $\rho_{n'n}^*$, $\kappa_{n'n}$ und $\kappa_{n'n}^*$ ebenfalls fur $n < n'$ und unter derselben Zwangsbedingung.

Der Variationsansatz lautet

$$\delta \{ E(\rho, \kappa) - \text{Tr} [\Lambda (\mathcal{R}^2 - \mathcal{R})] \} = 0 , \quad (3.45)$$

wobei $\Lambda_{nn'}$ Lagrangemultiplikatoren darstellen.

Die Variation der projizierten Energie läßt sich schreiben als:

$$\delta E = \sum_{n < n'} \left(\frac{\partial E}{\partial \rho_{n'n}} \delta \rho_{n'n} + \frac{\partial E}{\partial \rho_{n'n}^*} \delta \rho_{n'n}^* + \frac{\partial E}{\partial \kappa_{n'n}} \delta \kappa_{n'n} + \frac{\partial E}{\partial \kappa_{n'n}^*} \delta \kappa_{n'n}^* \right) + \sum_n \frac{\partial E}{\partial \rho_{nn}} \delta \rho_{nn}, \quad (3.46)$$

Man führt nun folgende Felder ein:

$$h_{nn'} \equiv \frac{\partial E}{\partial \rho_{n'n}} \quad \text{für } n \leq n', \quad (3.47a)$$

$$\Delta_{nn'} \equiv -\frac{\partial E}{\partial \kappa_{n'n}^*} \quad \text{für } n < n'. \quad (3.47b)$$

Da das Funktional E reell ist, gilt

$$h_{nn'}^* = \frac{\partial E}{\partial \rho_{n'n}^*}, \quad (3.48a)$$

$$\Delta_{nn'}^* = -\frac{\partial E}{\partial \kappa_{n'n}}. \quad (3.48b)$$

Desweiteren folgt aus den Gleichungen (3.10)

$$h_{nn'} = h_{n'n}^*, \quad (3.49a)$$

$$\Delta_{nn'} = -\Delta_{n'n}. \quad (3.49b)$$

Somit läßt sich die Variation der projizierten Energie in folgende Form umschreiben:

$$\begin{aligned} \delta E &= \frac{1}{2} \left(\sum_{nn'} \frac{\partial E}{\partial \rho_{n'n}} \delta \rho_{n'n} + \frac{\partial E}{\partial \rho_{n'n}^*} \delta \rho_{n'n}^* + \frac{\partial E}{\partial \kappa_{n'n}} \delta \kappa_{n'n} + \frac{\partial E}{\partial \kappa_{n'n}^*} \delta \kappa_{n'n}^* \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{nn'} h_{nn'} \delta \rho_{n'n} + h_{nn'}^* \delta \rho_{n'n}^* - \Delta_{nn'}^* \delta \kappa_{n'n} - \Delta_{nn'} \delta \kappa_{n'n}^* \right) \\ &= \frac{1}{2} [\text{Tr}(h \delta \rho) + \text{Tr}(h^* \delta \rho^*) - \text{Tr}(\Delta^* \delta \kappa) - \text{Tr}(\Delta \delta \kappa^*)] \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \rho & \delta \kappa \\ -\delta \kappa^* & -\delta \rho^* \end{pmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Mit Einführung der Matrix

$$\mathcal{H} \equiv \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

entspricht dies

$$\delta E = \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{H} \delta \mathcal{R}) \quad (3.52)$$

und der Variationsansatz lautet nun

$$\delta \{E(\rho, \kappa) - \text{Tr} [\Lambda(\mathcal{R}^2 - \mathcal{R})]\} = \frac{1}{2} \text{Tr} [(\mathcal{H} - \Lambda\mathcal{R} - \mathcal{R}\Lambda + \Lambda) \delta\mathcal{R}] = 0 . \quad (3.53)$$

Da $\delta\mathcal{R}$ eine beliebige Variation darstellt, bedeutet dies

$$\mathcal{H} - \Lambda\mathcal{R} - \mathcal{R}\Lambda + \Lambda = 0 , \quad (3.54)$$

oder anders ausgedrückt

$$[\mathcal{H}, \mathcal{R}] = 0 , \quad (3.55)$$

wobei die Relation $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}$ verwendet wurde.

Dies ist äquivalent mit den HFB-Gleichungen

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} , \quad (3.56)$$

die hier lediglich unter der Annahme abgeleitet worden sind, daß sich das Energiefunktional durch die Dichten ρ und κ ausdrücken läßt. Dies ist der Fall für die projizierte Energie, wie in den vorherigen Abschnitten dieses Kapitels gezeigt wurde, und man erhält somit projizierte Gleichungen derselben Struktur.

3.5 Teilchenzahlprojektion

In dieser Arbeit beschränkt man sich auf die Wiederherstellung der Teilchenzahlsymmetrie, die durch die Einführung von Paarungskorrelationen verletzt wird. Im Fall der Teilchenzahlprojektion stellt die Matrix D_g ein Vielfaches der Einheitsmatrix dar, was die Variationsgleichungen erheblich vereinfacht.

Der auf die Teilchenzahl N projizierende Operator lautet

$$P^N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi(\hat{N}-N)} . \quad (3.57)$$

Die Drehung im Eichraum ist definiert als

$$D_\phi = e^{i\phi} . \quad (3.58)$$

Somit sind die „gedrehten“ Dichten (3.43) gegeben durch

$$\rho_\phi = \rho , \quad (3.59a)$$

$$\kappa_\phi = e^{2i\phi} \kappa . \quad (3.59b)$$

Für die generalisierten Dichten (3.44) erhält man:

$$\rho(\phi) = C(\phi)\rho, \quad \rho(-\phi) = C^+(\phi)\rho = \rho^+(\phi), \quad (3.60a)$$

$$\kappa(\phi) = C(\phi)\kappa = \kappa C^\top(\phi), \quad \kappa(-\phi) = C^+(\phi)\kappa = \kappa C^*(\phi), \quad (3.60b)$$

$$\bar{\kappa}^*(\phi) = e^{-2i\phi}C(\phi)\kappa, \quad \bar{\kappa}^*(-\phi) = e^{2i\phi}\kappa^*C^+(\phi), \quad (3.60c)$$

wobei die Matrix

$$C(\phi) \equiv \rho^{-1}C_\phi = e^{2i\phi}[1 + \rho(e^{2i\phi} - 1)]^{-1} \quad (3.61)$$

definiert wurde, mit der Eigenschaft

$$C^+(\phi) = C(-\phi). \quad (3.62)$$

Aus (3.58) folgt $\text{Det } D_\phi = e^{iM\phi}$, wobei M die Größe des Konfigurationsraums darstellt. Damit ergibt sich für den Normüberlapp

$$x(\phi) = \frac{1}{2\pi} e^{-i\phi N} \frac{\text{Det } D_\phi}{\sqrt{\text{Det } \rho \text{Det } C_\phi}} = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{i\phi(M-N)}}{\sqrt{\text{Det } C(\phi)}}. \quad (3.63)$$

Die projizierte Energie läßt sich schreiben als

$$E^N = \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) [H_{\text{sp}}(\phi) + H_{\text{ph}}(\phi) + H_{\text{pp}}(\phi)], \quad (3.64)$$

mit

$$H_{\text{sp}}(\phi) = \text{Tr} [e\rho(\phi)], \quad (3.65a)$$

$$H_{\text{ph}}(\phi) = \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma(\phi)\rho(\phi)], \quad (3.65b)$$

$$H_{\text{pp}}(\phi) = -\frac{1}{2} \text{Tr} [\Delta(\phi)\bar{\kappa}^*(\phi)] = -\frac{1}{2} \text{Tr} [\bar{\Delta}^*(\phi)\kappa(\phi)]. \quad (3.65c)$$

Die Felder

$$\Gamma_{n_1 n_3}(\phi) = \sum_{n_2 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \rho_{n_4 n_2}(\phi), \quad (3.66a)$$

$$\Delta_{n_1 n_2}(\phi) = \frac{1}{2} \sum_{n_3 n_4} \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \kappa_{n_3 n_4}(\phi), \quad (3.66b)$$

sowie

$$\bar{\Delta}_{n_1 n_2}^*(\phi) = \frac{1}{2} \sum_{n_3 n_4} \bar{\kappa}_{n_3 n_4}^*(\phi) \bar{v}_{n_3 n_4 n_1 n_2} \quad (3.66c)$$

genügen

$$\Gamma(-\phi) = \Gamma^+(\phi), \quad (3.67a)$$

$$\Delta(-\phi) = e^{-2i\phi} \bar{\Delta}(\phi), \quad (3.67b)$$

$$\bar{\Delta}^*(-\phi) = e^{2i\phi} \Delta^*(\phi). \quad (3.67c)$$

3.5.1 Variation der Norm

Bei Teilchenzahlprojektion läßt sich der Normüberlapp mittels Gleichung (3.11) durch die Einteilchendichte ρ ausdrücken.

Man führt zunächst durch die Gleichungen

$$\frac{\partial x(\phi)}{\partial \rho_{n'n}} = x(\phi) X_{nn'}(\phi), \quad (3.68a)$$

$$\frac{\partial y(\phi)}{\partial \rho_{n'n}} = y(\phi) Y_{nn'}(\phi). \quad (3.68b)$$

die Matrizen $X(\phi)$ und $Y(\phi)$ ein.

Durch Differentiation erhält man dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial x(\phi)}{\partial \rho_{n'n}} &= \frac{1}{2} x(\phi) \operatorname{Tr} \left[C(\phi) \frac{\partial}{\partial \rho_{n'n}} C^{-1}(\phi) \right] \\ &= \frac{1}{2} x(\phi) (1 - e^{-2i\phi}) C_{nn'}(\phi) \\ &= x(\phi) i e^{-i\phi} \sin \phi C_{nn'}(\phi). \end{aligned} \quad (3.69)$$

Daraus folgt:

$$X(\phi) = i e^{-i\phi} \sin \phi C(\phi), \quad (3.70a)$$

$$Y(\phi) = i e^{-i\phi} \sin \phi \bar{C}(\phi) - i \int_0^{2\pi} d\phi' y(\phi') e^{-i\phi'} \sin \phi' C(\phi'). \quad (3.70b)$$

3.5.2 Das projizierte Hartree–Fock–Feld

Das Hartree–Fock–Feld in den projizierten Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen ergibt sich als die Ableitung der teilchenzahlprojizierten Energie nach der Einteilchendichte:

$$h_{nn'}^N = \frac{\partial E^N}{\partial \rho_{n'n}} = \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \left[Y_{nn'}(\phi) H(\phi) + \frac{\partial H(\phi)}{\partial \rho_{n'n}} \right], \quad \text{für } n \leq n'. \quad (3.71)$$

Es setzt sich aus drei Beiträgen zusammen:

$$h^N = \varepsilon^N + \Gamma^N + \Lambda^N. \quad (3.72)$$

Sie lauten

$$\varepsilon^N = \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \left[Y(\phi) H_{\text{sp}}(\phi) + \frac{\partial}{\partial \rho} H_{\text{sp}}(\phi) \right], \quad (3.73a)$$

$$\Gamma^N = \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \left[Y(\phi) H_{\text{ph}}(\phi) + \frac{\partial}{\partial \rho} H_{\text{ph}}(\phi) \right], \quad (3.73b)$$

$$\Lambda^N = \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \left[Y(\phi) H_{\text{pp}}(\phi) + \frac{\partial}{\partial \rho} H_{\text{pp}}(\phi) \right]. \quad (3.73c)$$

Für eine beliebige Matrix A gilt

$$\text{Tr} \left[A \frac{\partial}{\partial \rho_{n'n}} C(\phi) \right] = -2ie^{-i\phi} \sin \phi \{C(\phi) A C(\phi)\}_{nn'} \quad (3.74)$$

und damit erhält man unter Berücksichtigung der Hermitezität

$$\varepsilon^N = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \{Y(\phi) \text{Tr}[e\rho(\phi)] + [1 - 2ie^{-i\phi} \sin \phi \rho(\phi)] e C(\phi)\} + \text{h.c.} \quad (3.75a)$$

$$\Gamma^N = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \left\{ Y(\phi) \frac{1}{2} \text{Tr}[\Gamma(\phi)\rho(\phi)] + [1 - 2ie^{-i\phi} \sin \phi \rho(\phi)] \Gamma(\phi) C(\phi) \right\} + \text{h.c.} \quad (3.75b)$$

$$\Lambda^N = -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \left\{ Y(\phi) \frac{1}{2} \text{Tr}[\Delta(\phi)\bar{\kappa}^*(\phi)] - 2ie^{-i\phi} \sin \phi C(\phi)\Delta(\phi)\bar{\kappa}^*(\phi) \right\} + \text{h.c.} \quad (3.75c)$$

3.5.3 Das projizierte Paarungsfeld

Das Paarungsfeld ist die Variation der projizierten Energie nach der anomalen Dichte κ :

$$\Delta_{nn'}^N = -\frac{\partial E^N}{\partial \kappa_{n'n}^*} = -\int_0^{2\pi} d\phi y(\phi) \frac{\partial H(\phi)}{\partial \kappa_{n'n}^*}, \quad \text{für } n < n'. \quad (3.76)$$

Analog zum Hartree–Fock–Feld erhält man für das Paarungsfeld in den projizierten HFB–Gleichungen:

$$\Delta^N = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-2i\phi} y(\phi) C(\phi)\Delta(\phi) - (\cdot)^\top. \quad (3.77)$$

4 Teilchenzahlprojektion in Rahmen einer relativistischen Dichtefunktionaltheorie

Im folgenden wird der in den zwei vorigen Kapiteln entwickelte Formalismus auf die Relativistische Mean-Field-Theorie angewandt. Aus einem Energiefunktional werden durch ein Variationsprinzip die Bewegungsgleichungen der RMFT sowohl im unprojizierten als auch im projizierten Fall abgeleitet.

Es stellt sich heraus, daß der Einsatz einer mesonischen Wechselwirkung im Paarungskanal bei realistischen Anwendungen nicht möglich ist. Man bedient sich deswegen zur Beschreibung von Korrelationen im Teilchen-Teilchen-Kanal der phänomenologischen Gogny-Kraft, die hier kurz vorgestellt wird.

4.1 Das Energiefunktional der RMFT

Das Energiefunktional der RMFT ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
 E_{\text{RMF}}(\rho, \varphi) = \int d\mathbf{r} \left\{ \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{r}) (\boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + \beta M) \psi(\mathbf{r}) | \Phi \rangle \right. \\
 + \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{r}) g_\sigma \beta \sigma(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) | \Phi \rangle + \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{r}) g_\omega \omega^0(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) | \Phi \rangle \\
 + \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{r}) g_\rho \beta \tau_3 \rho^0(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) | \Phi \rangle \\
 + \frac{1}{2} \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{r}) e \beta (1 + \tau_3) A^0(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) | \Phi \rangle \\
 + \frac{1}{2} \{ [\nabla \sigma(\mathbf{r})]^2 + m_\sigma^2 \sigma^2(\mathbf{r}) \} + \frac{1}{3} g_2 \sigma^3(\mathbf{r}) + \frac{1}{4} g_3 \sigma^4(\mathbf{r}) \\
 - \frac{1}{2} \{ [\nabla \omega^0(\mathbf{r})]^2 + m_\omega^2 [\omega^0(\mathbf{r})]^2 \} - \frac{1}{2} \{ [\nabla \rho^0(\mathbf{r})]^2 + m_\rho^2 [\rho^0(\mathbf{r})]^2 \} \\
 \left. - \frac{1}{2} [\nabla A^0(\mathbf{r})]^2 \right\}, \tag{4.1}
 \end{aligned}$$

wobei $\psi^+(\mathbf{r})$ einen Feldoperator darstellt, der ein Nukleon am Orte \mathbf{r} erzeugt, und φ einem der Mesonenfelder σ , ω und ρ entspricht. Die Abhängigkeit des Energiefunktional von der Dichte ρ ist implizit in der Slater–Determinante $|\Phi\rangle$, die aus den selbstkonsistenten Einteilchenlösungen aufgebaut wird und hier als Kernwellenfunktion dient.

Im obigen Ausdruck sind schon alle Näherungen berücksichtigt, die im Abschnitt 1.2 vorgestellt wurden. Insbesondere werden Einteilchenzustände negativer Energie vernachlässigt (No–Sea–Näherung). In der instantanen Näherung vom Abschnitt 2.4 fallen die freien kinetischen Terme $\Pi_\varphi\Pi_\varphi \sim \dot{\varphi}^2$ für das Bosonenfeld φ im Hamiltonoperator (2.6) weg. Weil die Mesonenfelder klassisch behandelt werden, treten Fock–Terme in Gleichung (4.1) nicht auf.

Berücksichtigt man explizit die Abhängigkeit von der Dichte ρ erhält man folgenden Ausdruck für das Energiefunktional der RMFT:

$$\begin{aligned}
E_{\text{RMF}}(\rho, \varphi) = & \text{Tr} (h^0 \rho) + g_\sigma \text{Tr} (\beta \sigma \rho) + g_\omega \text{Tr} (\omega^0 \rho) \\
& + g_\rho \text{Tr} (\beta \tau_3 \rho^0 \rho) + \frac{1}{2} e \text{Tr} (\beta (1 + \tau_3) A^0 \rho) \\
& + \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} \{ [\nabla \sigma(\mathbf{r})]^2 + m_\sigma^2 \sigma^2(\mathbf{r}) \} + \frac{1}{3} g_2 \sigma^3(\mathbf{r}) + \frac{1}{4} g_3 \sigma^4(\mathbf{r}) \right. \\
& - \frac{1}{2} \{ [\nabla \omega^0(\mathbf{r})]^2 + m_\omega^2 [\omega^0(\mathbf{r})]^2 \} - \frac{1}{2} \{ [\nabla \rho^0(\mathbf{r})]^2 + m_\rho^2 [\rho^0(\mathbf{r})]^2 \} \\
& \left. - \frac{1}{2} [\nabla A^0(\mathbf{r})]^2 \right\}, \tag{4.2}
\end{aligned}$$

wobei die Spur hier auch die Integration über die Koordinate \mathbf{r} enthält.

Der Einteilchen–Hamiltonoperator in (4.2) ist definiert durch

$$h^0 \equiv \boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + \beta M . \tag{4.3}$$

Im Rahmen der Mean–Field–Näherung enthält das Energiefunktional der RMFT, wie oben dargestellt, nur Terme der Struktur $\psi^+\psi$. Um Paarungskorrelationen beschreiben zu können, sind Cooperpaare vom Typ $\psi^+\psi^+$ erforderlich. Diese gehen durch eine Quantisierung der Theorie nach der im Kapitel 2 dargestellten Prozedur hervor. Der Einsatz einer mesonischen Wechselwirkung im Teilchen–Teilchen–Kanal ist in der Praxis jedoch bisher nicht realisierbar. Zum einen kann die Eliminierung der bosonischen Freiheitsgrade des Abschnitts 2.2 nur für einen Hamiltonoperator analytisch durchgeführt werden, der quadratisch in den zu eliminierenden Feldern ist. Man kann jedoch bei realistischen Anwendungen der RMFT nicht auf die nichtlinearen Terme der σ –Selbstkopplung verzichten (siehe Kapitel 1). Ferner sind die heute vorhandenen RMFT–Parametersätze für eine einheitliche Beschreibung von Mean–Field und Paarungskorrelationen nicht geeignet [Kuc89]. Das Verhalten dieser Mesonenaustauschkkräfte bei größerem Impulsübertrag, wie er im Teilchen–Teilchen–Kanal vorkommt, erwies sich bei Anwendungen in Kernmaterie als unzulänglich.

In dieser Arbeit werden die Paarungskorrelationen aus den oben diskutierten Gründen durch den Einsatz einer phänomenologischen Wechselwirkung berücksichtigt, wie in [GEL96] vorgeschlagen wurde. Ihr Beitrag zum Energiefunktional lautet

$$E_{\text{pp}}(\rho, \kappa) = -\frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \langle \Phi | \psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}_2) v^{\text{pp}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1) | \Phi \rangle, \quad (4.4)$$

wobei die Kernwellenfunktion $|\Phi\rangle$ nunmehr einem HFB-Zustand entspricht.

Das phänomenologische Zweiteilchenpotential v^{pp} in (4.4) ist ausschließlich für die Teilchen–Teilchen–Korrelationen zuständig. Demzufolge wird mit Hilfe des Wick’schen Theorems nur der entsprechende Anteil aus dem obigen Matrixelement berücksichtigt. Die Anwendung einer phänomenologischen Kraft anstelle einer aus den Mesonenaustauschpotentialen abgeleiteten Wechselwirkung verletzt in keiner Weise das Variationsprinzip. Durch Abziehen eines Terms der Form

$$E_{\text{pair}}(\kappa) = \frac{1}{2} \sum_{abcd} \kappa_{ab}^* v_{abcd}^{\text{pp}} \kappa_{cd} \quad (4.5)$$

vom Energiefunktional (4.1) würde man unter Anwendung von Variationstechniken dieselben Gleichungen erhalten, wie es sich weiterunten herausstellt.

Desweiteren birgt der nichtrelativistische Charakter der phänomenologischen Paarwechselwirkung in sich keinen Nachteil, da relativistische Effekte keine Rolle im Teilchen–Teilchen–Kanal spielen. Serra hat unter Verwendung eines vollrelativistischen Potentials im Paarungskanal gezeigt, daß die Beiträge aus den kleinen Komponenten zum Paarungstensor um einen Faktor 10 kleiner sind als die sich aus den großen Komponenten ergebenden [Ser01].

Zusammenfassend wird in dieser Arbeit folgendes Energiefunktional verwendet:

$$E(\rho, \kappa, \varphi) = E_{\text{RMF}}(\rho, \varphi) + E_{\text{pp}}(\kappa) \quad (4.6)$$

Die Variation dieses Energiefunktionals nach ρ und κ^* führt zu den Dirac–Hartree–Bogoliubov–Gleichungen, wie bereits im Kapitel 3 beschrieben:

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Dabei wurden folgende Felder eingeführt:

$$h \equiv \frac{\partial E_{\text{RMF}}}{\partial \rho} = h^0 + g_\sigma \beta \sigma + g_\omega \omega^0 + g_\rho \beta \tau_3 \rho^0 + \frac{1}{2} e \beta (1 + \tau_3) A^0 - \lambda, \quad (4.8a)$$

$$\Delta \equiv -\frac{\partial E_{\text{RMF}}}{\partial \kappa^*} = \frac{1}{2} \sum_w v_{nn'lw}^{\text{pp}} \kappa_{lw}. \quad (4.8b)$$

Das chemische Potential λ wird so bestimmt, daß sich die richtige Teilchenzahl ergibt. Aus den Lösungen U und V werden die relativistischen Dichten

$$\rho = VV^+ \quad \text{und} \quad \kappa = VU^T \quad (4.9)$$

wie in Kapitel 2 berechnet.

Die Variation des Energiefunktionals nach den Mesonenfeldern σ , ω , ρ und A ergibt die Klein–Gordon–Gleichungen, wie sie bereits im Kapitel 1 vorgestellt wurden.

4.2 Die teilchenzahlprojizierte RMFT–Energie

Die Berechnung der teilchenzahlprojizierten RMFT–Energie erfolgt analog zum Vorgehen des letzten Abschnittes. Dabei enthalten die Erwartungswerte in der Gleichung (4.1) nun den Projektionsoperator P^N . Bei der relativistischen Beschreibung von Kernsystemen wird allerdings die *Baryonenzahl* und nicht, wie im nichtrelativistischen Fall, die Teilchenzahl erhalten. Dem zufolge stellt die Matrix D_ϕ nicht mehr ein Vielfaches der Einheitsmatrix wie in (3.58) dar. Es stellt sich jedoch heraus, daß dieser Unterschied keine wesentliche Auswirkung auf die Ergebnisse hat und somit vernachlässigt werden kann. Die Unschärfe in der Teilchenzahl entsteht durch die Einführung von Paarungskorrelationen. Die Paarwechselwirkung ist an der Fermi–Kante konzentriert. Diese Überlegungen führen zur Kenntnis, daß Antiteilchen, die energetisch 1000 MeV unter der Fermi–Kante liegen, keine Auswirkung auf den Projektionsprozeß haben können.

Die Erwartungswerte in der Gleichung (4.1) weisen im projizierten Fall folgende Struktur auf:

$$\frac{\langle \Phi | P^N \hat{O} P^N | \Phi \rangle}{\langle \Phi | P^N P^N | \Phi \rangle} = \frac{\langle \Phi | \hat{O} P^N | \Phi \rangle}{\langle \Phi | P^N | \Phi \rangle}. \quad (4.10)$$

Dabei stellt \hat{O} einen der in den Matrixelementen der Gleichung (4.1) auftretenden Operatoren dar. Es wird angenommen, daß der Operator \hat{O} mit dem Teilchenzahloperator vertauscht. Dies trifft für alle hier in Frage kommenden Operatoren zu. Durch die Gleichung (3.21) kann für jeden Term geschrieben werden:

$$\frac{\langle \Phi | \hat{O} P^N | \Phi \rangle}{\langle \Phi | P^N | \Phi \rangle} = \int d\phi y(\phi) \langle 0 | \hat{O} | \phi \rangle \quad (4.11)$$

wobei $|\phi\rangle$ eine „gedrehte“ Slater–Determinante gemäß der Gleichung (3.17) darstellt. Insbesondere wird $|0\rangle \equiv |\Phi\rangle$ definiert.

Mit Hilfe des Onishi–Theorems lassen sich die Überlappe auf der rechten Seite in (4.11) durch die generalisierten Dichten (3.60) ausdrücken. Für die Einteilchenoperatoren erhält man

$$\langle 0 | \hat{O} | \phi \rangle = \text{Tr} [O \rho(\phi)], \quad (4.12a)$$

wobei O die dem Operator \hat{O} gehörige Matrix darstellt.
Für die Zweiteilchenwechselwirkung ergibt sich

$$\langle 0 | \psi^+ \psi^+ v^{\text{pp}} \psi \psi | \phi \rangle = -\text{Tr}_2 [\bar{\kappa}^*(\phi) v^{\text{pp}} \kappa(\phi)] . \quad (4.12\text{b})$$

Definiert man nun die *projizierte Einteilchendichte*

$$\rho^N \equiv \int d\phi y(\phi) \rho(\phi) , \quad (4.13)$$

wird folgender Ausdruck für die teilchenzahlprojizierte Energie des Systems erhalten:

$$\begin{aligned} E^N(\rho, \kappa, \varphi) = & \text{Tr} (h^0 \rho^N) + g_\sigma \text{Tr} (\beta \sigma \rho^N) + g_\omega \text{Tr} (\omega^0 \rho^N) \\ & + g_\rho \text{Tr} (\beta \tau_3 \rho^0 \rho^N) + \frac{1}{2} e \text{Tr} (\beta (1 + \tau_3) A^0 \rho^N) \\ & - \frac{1}{2} \int d\phi y(\phi) \text{Tr}_2 [\bar{\kappa}^*(\phi) v^{\text{pp}} \kappa(\phi)] \\ & + \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} \{ [\nabla \sigma(\mathbf{r})]^2 + m_\sigma^2 \sigma^2(\mathbf{r}) \} + \frac{1}{3} g_2 \sigma^3(\mathbf{r}) + \frac{1}{4} g_3 \sigma^4(\mathbf{r}) \right. \\ & \quad - \frac{1}{2} \{ [\nabla \omega^0(\mathbf{r})]^2 + m_\omega^2 [\omega^0(\mathbf{r})]^2 \} - \frac{1}{2} \{ [\nabla \rho^0(\mathbf{r})]^2 + m_\rho^2 [\rho^0(\mathbf{r})]^2 \} \\ & \quad \left. - \frac{1}{2} [\nabla A^0(\mathbf{r})]^2 \right\} . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Durch die Gleichungen (3.60) stellt obiger Ausdruck letztendlich ein Funktional der unprojizierten HFB-Dichten ρ und κ dar. Im folgenden werden teilchenzahlprojizierte DHB-Gleichungen durch Variation nach diesen Größen abgeleitet.

4.3 Teilchenzahlprojizierte RMFT-Gleichungen

In dem Funktional (4.14) sind die Mesonenfelder nur klassisch berücksichtigt. Nur im Teilchen–Teilchen–Kanal werden die Paarungskorrelationen durch eine Zweiteilchenwechselwirkung beschrieben. In dieser Näherung treten in der Gleichung (3.72) nur die Terme ε^N und Λ^N , nicht aber der Teilchen–Loch–Beitrag Γ^N auf. Da die Verletzung der Teilchenzahlsymmetrie durch die Einführung von Paarungskorrelationen hervorgerufen wird, ist dies ein konsistentes Vorgehen.

Die Variation des projizierten Energiefunktionals (4.14) nach ρ und κ führt zu den teilchenzahlprojizierten Dirac–Hartree–Bogoliubov–Gleichungen:

$$\begin{pmatrix} h^N & \Delta^N \\ -\Delta^{N*} & -h^{N*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = E^N \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} . \quad (4.15)$$

Das Hartree- und das Paarungsfeld sind durch folgende Ausdrücke definiert:

$$h^N = \frac{\partial E^N}{\partial \rho}, \quad \Delta^N = -\frac{\partial E^N}{\partial \kappa^*}. \quad (4.16)$$

Gemäß der Gleichung (3.72) erhält das Hartree-Feld im projizierten Fall einen Beitrag vom Teilchen-Teilchen-Kanal:

$$h^N = \varepsilon^N + \Lambda^N. \quad (4.17)$$

Die Felder ε^N und Λ^N sind durch die Gleichungen (3.75a) und (3.75c) gegeben. Der Term ε^N enthält, wie in der unprojizierten HFB-Theorie, die Einteilchenenergiebeiträge. Das Feld Λ^N entsteht durch die implizite Abhängigkeit der projizierten Paarungsenergie von der Dichte ρ und ist gleich Null im unprojizierten Fall. Das projizierte Paarungsfeld Δ^N wird durch (3.77) berechnet.

Die Variation des Energiefunktionals nach den Mesonenfeldern σ , ω und ρ ergibt, wie im unprojizierten Fall, die Klein-Gordon-Gleichungen:

$$(-\Delta + m_\sigma^2) \sigma(\mathbf{r}) = -g_\sigma \rho_s^N(\mathbf{r}) - g_2 \sigma^2(\mathbf{r}) - g_3 \sigma^3(\mathbf{r}), \quad (4.18a)$$

$$(-\Delta + m_\omega^2) \omega^0(\mathbf{r}) = g_\omega \rho_v^N(\mathbf{r}), \quad (4.18b)$$

$$(-\Delta + m_\rho^2) \rho_3^0(\mathbf{r}) = g_\rho \rho_3^N(\mathbf{r}), \quad (4.18c)$$

$$-\Delta A^0(\mathbf{r}) = e \rho_p^N(\mathbf{r}). \quad (4.18d)$$

Jedoch treten nun *projizierte Dichten* als Quellenterme in den Mesonengleichungen auf.

4.4 Die Paarwechselwirkung

Als Zweiteilchenwechselwirkung im Teilchen-Teilchen-Kanal findet in dieser Arbeit die Gogny-Kraft [DG80] Verwendung:

$$v^{\text{pp}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i=1,2} e^{(r_1 - r_2)^2 / \mu_i^2} (W_i + B_i P^\sigma - H_i P^\tau - M_i P^\sigma P^\tau), \quad (4.19)$$

wobei μ_i , W_i , B_i , H_i und M_i ($i = 1, 2$) Parameter der Wechselwirkung darstellen. Die Operatoren P^σ und P^τ tauschen die Spin- bzw. die Isospinkoordinaten in einem Zweiteilchenzustand.

Wegen der nichtrelativistischen Natur der Paarungskraft [Ser01] werden Paarungskorrelationsbeiträge aus den kleinen Komponenten vernachlässigt.

Die Gogny-Kraft wurde sehr erfolgreich angewandt zur Beschreibung von Paarungskorrelationen sowohl in relativistischen [LVR98, PVL97] als auch in nichtrelativistischen Modellen [DG80, ER93, GDB94].

5 Durchführung der Rechnungen

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die praktische Lösung der RMFT-Gleichungen. Insbesondere werden die teilchenzahlprojizierten relativistischen HB-Gleichungen für sphärische Kerne vorgestellt und ihr Lösungsansatz diskutiert.

Es wird auf die Schwierigkeiten bei der Beschreibung von Kernen mit exotischen Dichteverteilungen durch Entwicklung in einer Oszillatorbasis eingegangen und eine Möglichkeit, diese Problematik zu umgehen, dargestellt.

Es folgen weitere Details zur numerischen Ausführung der Rechnungen, sowie eine Diskussion über die Verwendung von Ortsraummethoden zur Lösung der DHB-Gleichungen.

5.1 Die RMFT-Gleichungen für sphärische Kerne

Die unprojizierten Dirac-Hartree-Bogoliubov-Gleichungen wurden im Kapitel 2 hergeleitet:

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\nu \\ V_\nu \end{pmatrix} = E_\nu \begin{pmatrix} U_\nu \\ V_\nu \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Hier ist h der Dirac-Hamiltonoperator, λ das chemische Potential, Δ das Paarungsfeld und $(U_\nu \ V_\nu)^\top$ der Eigenvektor mit Eigenwert E_ν . Dabei stellen U_ν und V_ν jeweils einen Dirac-Spinor dar:

$$\begin{pmatrix} U_\nu \\ V_\nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_\nu^U \\ F_\nu^U \\ G_\nu^V \\ F_\nu^V \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

In dieser Arbeit werden ausschließlich Kerne mit Kugelsymmetrie beschrieben. Geeignete Koordinaten in diesem Fall sind folglich die Kugelkoordinaten r , θ und φ sowie die Spinkoordinate s . Die Quantenzahlen der Eigenzustände eines solchen Systems sind der Drehimpuls j , seine magnetische Quantenzahl m_j , die Parität π und der Isospin t . Bei Berücksichtigung

der Kugelsymmetrie separieren die Lösungen in Raum-, Winkel- und Isospinanteil:

$$G_\nu^{U,V}(\mathbf{r}, s, t) = g_\nu^{U,V}(r) \Omega_{l_\nu, j_\nu, m_j}(\theta, \varphi, s) \chi_{\tau_\nu}(t), \quad (5.3a)$$

$$F_\nu^{U,V}(\mathbf{r}, s, t) = i f_\nu^{U,V}(r) \Omega_{\tilde{l}_\nu, j_\nu, m_j}(\theta, \varphi, s) \chi_{\tau_\nu}(t). \quad (5.3b)$$

Die Phasen der Spinoren wurden so gewählt, daß reelle Eigenwertgleichungen entstehen. Die Bahndrehimpulsindizes l und \tilde{l} hängen mit der Drehimpulsquantenzahl j und der Parität des Zustandes zusammen:

$$l = j \pm \frac{1}{2}, \quad \tilde{l} = j \mp \frac{1}{2} \quad \text{für } \pi = (-)^{j \pm 1/2}. \quad (5.4)$$

Die Funktion Ω_{l,j,m_j} ist ein j -Spinor, der durch die Spin-Bahn-Kopplung entsteht:

$$\Omega_{l,j,m_j}(\theta, \varphi, s) = \sum_{m_l, m_s} C_{m_s m_l m_j}^{1/2 l j} Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}(s). \quad (5.5)$$

Der Isospinanteil ist in der Isospin-Funktion χ_τ enthalten.

Somit ist der Winkelanteil des Problems analytisch gelöst und lediglich die Gleichungen für die Radialamplituden $g^{U,V}$ und $f^{U,V}$ verbleiben:

$$\begin{pmatrix} M^* + V - \lambda & \partial_r - \frac{\kappa-1}{r} & \hat{\Delta}_{gg} & \hat{\Delta}_{gf} \\ -\partial_r - \frac{\kappa+1}{r} & -M^* + V - \lambda & \hat{\Delta}_{fg} & \hat{\Delta}_{ff} \\ \hat{\Delta}_{gg} & \hat{\Delta}_{fg} & M^* + V + \lambda & \partial_r - \frac{\kappa-1}{r} \\ \hat{\Delta}_{gf} & \hat{\Delta}_{ff} & -\partial_r - \frac{\kappa+1}{r} & -M^* + V + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_\nu^U \\ f_\nu^U \\ g_\nu^V \\ f_\nu^V \end{pmatrix} = \varepsilon_\nu \begin{pmatrix} g_\nu^U \\ f_\nu^U \\ g_\nu^V \\ f_\nu^V \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Die Zustände in dem Zentralpotential sind nun durch die Quantenzahl

$$\kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad \text{für } j = l \mp \frac{1}{2} \quad (5.7)$$

charakterisiert, die die Werte $\kappa = -1, 1, -2, 2, -3, 3, \dots$ annimmt.

Bei der Paarwechselwirkung werden wegen der sphärischen Symmetrie nur Beiträge zu den Paarungsmatrixelementen berücksichtigt, die von zu gesamtem Drehimpuls $J = 0$ gekoppelten Paaren entstehen. Desweiteren werden Paarungskorrelationsbeiträge aus den kleinen Komponenten vernachlässigt, wie in Kapitel 4 diskutiert wurde:

$$\Delta_{gf} = \Delta_{fg} = \Delta_{ff} = 0. \quad (5.8)$$

Im projizierten Fall werden das Hartree- und Paarungsfeld durch ihre projizierten Kontrahenten ersetzt:

$$\begin{pmatrix} h^N & \Delta^N \\ -\Delta^{N*} & -h^{N*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\nu \\ V_\nu \end{pmatrix} = E_\nu^N \begin{pmatrix} U_\nu \\ V_\nu \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Die Felder $h^N = \varepsilon^N + \Lambda^N$ und Δ^N werden gemäß den Gleichungen (3.75a), (3.75c) und (3.77) berechnet.

Bei den Klein–Gordon–Gleichungen ist der Radialanteil des Laplaceoperators in Kugelkoordinaten zu verwenden. Sie lauten:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + m_\mu^2 \right) \Phi_\mu(r) = S_\mu(r) . \quad (5.10)$$

Dabei stellt $S_\mu(r)$ die entsprechende Quelle für das Meson μ , eines von σ, ω, ρ, A , dar. Diese wird dann im projizierten Fall aus den projizierten Dichten berechnet:

$$\rho_{s,v,3,p}^N \equiv \int d\phi y(\phi) \rho_{s,v,3,p}(\phi) , \quad (5.11)$$

wobei die generalisierten Dichten $\rho_{s,v,3,p}(\phi)$ gemäß (3.60) bestimmt werden.

5.2 Lösungsprinzip für die RMFT–Gleichungen

Die Dirac–Hartree–Bogoliubov– und Klein–Gordon–Gleichungen in der RMFT stellen ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem dar: Zum einen bewegen sich die Nukleonen in einem von Mesonen gebildeten mittleren Potential, zum anderen treten die Nukleonendichten als Quelle in den Mesonengleichungen auf. Dies erfordert eine selbstkonsistente Lösung, die iterativ erfolgen muß:

1. Angefangen wird mit einer vorgegebenen Einteilchendichte ρ und einem Paarungstensor κ aus einem BCS–Ansatz sowie Mesonenfeldern, die einem Woods–Saxon–Potential entsprechen. Die Projektionsgrößen $C(\phi)$, $x(\phi)$, $y(\phi)$, $X(\phi)$ und $Y(\phi)$ aus Kapitel 3 werden aus den HFB–Dichten bestimmt. Daraus lassen sich die generalisierten Dichten $\rho(\phi)$ und $\kappa(\phi)$ aus den Gleichungen (3.60) berechnen.
2. Die Potentiale für die Dirac–Hartree–Bogoliubov–Gleichungen werden bestimmt: Aus dem Zweiteilchenpaarungspotential v^{pp} , Gleichung (4.19), und den generalisierten Dichten ergibt sich das Paarungsfeld $\Delta(\phi)$ und schließlich die projizierten Felder ε^N , Λ^N und Δ^N . Das vektorielle und skalare Potential werden aus den Mesonenfeldern berechnet.
3. Die Dirac–Hartree–Bogoliubov–Gleichungen für die Nukleonen werden gelöst. Daraus ergeben sich Dirac–Spinoren und Einteilchenenergien. Dabei wird das chemische Potential so bestimmt, daß sich die richtige Teilchenzahl für Protonen und Neutronen ergibt. Dies ist auf Grund der Teilchenzahlprojektion im Prinzip nicht erforderlich, stellt dennoch sicher, daß die Lösungen der DHB–Gleichungen eine starke Komponente mit der zu projizierenden Teilchenzahl besitzt.

4. Neue Nukleonendichten, Projektionsgrößen und generalisierte Dichten werden wie im Schritt 1 berechnet.
5. Mittels (5.11) werden teilchenzahlprojizierte Dichten erhalten, mit denen man nun die Klein–Gordon–Gleichungen für die Mesonenfelder löst.

Schritte 2 bis 5 werden solange wiederholt, bis die Differenz zwischen den Mesonenfeldern aus zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten eine vorher gewählte Toleranz nicht überschreitet.

5.3 Lösung der RMFT–Gleichungen durch Entwicklung

Eine Möglichkeit, die RMFT–Gleichungen zu lösen, ist die Entwicklung sowohl der Fermionenwellenfunktion als auch der Bosonenfelder in einer geeigneten Basis. Damit reduzieren sich die Dirac–Hartree–Bogoliubov–Gleichungen auf eine Matrixgleichung für die Koeffizienten dieser Entwicklung. Die Klein–Gordon–Gleichungen werden inhomogene lineare Gleichungssysteme. Dies hat den Vorteil, daß man nun, anstatt gekoppelte Differentialgleichungssysteme integrieren zu müssen, ein reell–symmetrisches Matrixalgebraproblem hat, bei dem es sich meist robustere Behandlungsmöglichkeiten anbieten.

Als Basis bietet sich der Raum der Eigenfunktionen des Hamiltonoperators eines sphärischen harmonischen Oszillators an [GRT90]. Die Lösungen der Schrödingergleichung für das Potential

$$V(r) = \frac{1}{2}M\omega^2 r^2 \quad (5.12)$$

sind die Radialfunktionen

$$R_{nl} = N_{nl} b^{-3/2} x^l L_{n-1}^{l+1/2}(x^2) e^{-x^2/2}, \quad (5.13)$$

mit der Oszillatorlänge

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}, \quad (5.14)$$

der dimensionslosen Koordinate

$$x = \frac{r}{b} \quad (5.15)$$

und dem Normierungsfaktor

$$N_{nl} = \sqrt{\frac{2(n-1)!}{(n+l-\frac{1}{2})!}}. \quad (5.16)$$

Bei den Laguerrepolynomen $L_{n-1}^{l+1/2}(x^2)$ ist n die Radial- und l die Bahndrehimpulsquantenzahl.

Die Entwicklung der Spinorkomponenten erfolgt dann gemäß

$$g^{U,V}(r) = \sum_{n=1}^{n_{\max}} g_n^{U,V} R_{nl}(r), \quad (5.17a)$$

$$f^{U,V}(r) = \sum_{n=1}^{n'_{\max}} f_n^{U,V} R_{nl}(r), \quad (5.17b)$$

wobei $N_{\max} = 2(n_{\max} - 1) + l$ die Anzahl der Hauptoszillatorschalen darstellt, die bei der Entwicklung berücksichtigt werden. Da der Impulsoperator im Dirac-Hamiltonoperator die große Komponente des Basiszustandes mit Radialquantenzahl n mit der kleinen Komponente des Basiszustandes mit Radialquantenzahlen $n \pm 1$ koppelt, muß die Entwicklung der kleinen Komponenten mit $N'_{\max} \geq N_{\max} + 1$ durchgeführt werden [GRT90].

Die Mesonenfelder, mit Ausnahme des Photonfeldes, werden auf analoge Weise entwickelt. Die Gleichung für das sehr langreichweitige Coulombfeld wird mittels Green-Funktion-Techniken gelöst.

5.4 Lokal-Skalierte Oszillatorbasis

Beabsichtigt man Halo-Kerne zu beschreiben, ist die Entwicklung in einer Oszillatorbasis als Lösungsmethode für die RMFT-Gleichungen ungeeignet. Diese Kerne weisen wegen der schwachen Bindung der Valenznukleonen eine zum Teil extrem ausgedehnte Dichte auf. Die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators können aufgrund ihres gaußischen Abfalls das Verhalten der Dichte nahe der Kernoberfläche und über sie hinaus generell nicht beschreiben. Eine Kombination mehrerer Basiszustände ist notwendig. Weil die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators jedoch stark lokalisiert sind, wird eine sehr große Basis benötigt, was den Einsatz dieser Methode nicht praktikabel macht.

Es ist dennoch möglich, auch im Falle schwachabfallender Nukleonenverteilungen im Oszillatorraum zu arbeiten. Dafür müssen die Basisfunktionen so modifiziert werden, daß sie nun das gewünschte asymptotische Verhalten aufweisen. Dies wird durch die lokale Skalierungstransformation (LST) von Stoitsov *et al.* [SNP98] erreicht. Dabei wird die Koordinate r durch eine neue Koordinate $\tilde{r} \equiv f(r)$ ersetzt, wobei $f(r)$ zum einen eine monoton steigende Funktion von r sein und zum anderen $f(0) = 0$ erfüllen muß.

Die transformierten Radialfunktionen sind definiert durch [SNP98]

$$\tilde{R}_{nl}(r) = \left[\frac{f^2(r) df(r)}{r^2 dr} \right]^{1/2} R_{nl}(f(r)). \quad (5.18)$$

Obige Transformation ist unitär, sodaß die Normierung der Basisfunktionen erhalten bleibt, unabhängig von der Wahl der LST-Funktion $f(r)$. Insbesondere verhalten sich die Matrixelemente eines beliebigen Operators $V(r)$ folgendermaßen unter obiger Transformation:

$$\int dr R_{nl}(r) V(r) R_{n'l'}(r) \longrightarrow \int dr \tilde{R}_{nl}(r) V(f(r)) \tilde{R}_{n'l'}(r), \quad (5.19)$$

sodaß die mit dieser Transformation verbundenen Änderungen zu bereits existierenden Rechenprogrammen minimal sind.

Die Parametrisierung

$$f(r) = \begin{cases} r & \text{für } r \leq R, \\ R [8r/R - 8R/r + R^2/r^2 - 12 \ln(r/R)]^{1/2} & \text{für } r > R, \end{cases} \quad (5.20)$$

wurde in [SRV98] für Anwendungen mit leichten Kernen hergeleitet, motiviert durch das gewünschte asymptotische Verhalten der Nukleonendichten. Für große Werte von r dominiert der lineare Term in der Entwicklung (5.20), sodaß $f(r \rightarrow \infty) \sim r^{1/2}$. Da die Radialfunktionen proportional zu $e^{-r^2/2}$ sind (siehe Gleichung (5.13)), fallen sie nun exponentiell ab. Außerdem gewährleistet diese bestimmte Form der LST-Funktion, daß ihre Ableitungen am Verbindungspunkt $r = R$ bis zur vierten Ordnung stetig ist. Sie erwies sich als sehr erfolgreich in der Beschreibung von Neon-Isotopen und wird daher auch in dieser Arbeit verwendet. Der Wert des freien Parameters R liegt im Bereich 0.5–1 fm.

In der Abbildung 5.1 wird $e^{-f^2(x)}$ für verschiedene Werte des Parameters R dargestellt, wobei $R = \infty$ dem untransformierten Fall $f(x) = x$ entspricht. Daraus ist ersichtlich, daß die transformierten Radialfunktionen im asymptotischen Bereich exponentiell, statt gaußisch, abfallen, was bei der Beschreibung schwachabfallender Nukleonverteilungen von Halo-Kernen von großem Vorteil ist.

5.5 Numerische Ausführung der Rechnungen

Bei den durchgeführten Untersuchungen wurden für die Entwicklung sowohl der Wellenfunktionen der Nukleonen als auch der Mesonenfelder 20 Oszillatorhauptschalen verwendet.

Für die Lagrangedichte werden die in Tabelle 5.1 dargestellten Parametersätze verwendet. Sie wurden durch Anpassung an Grundzustandseigenschaften von endlichen Kernen und Kernmaterie gewonnen, wobei der Parametersatz NL2 in der Literatur speziell für leichte Kerne entwickelt wurde [Lee86] und hier für die Berechnung von Lithium-Isotopen benutzt wird. Für die schwereren Neon- und Zinn-Isotopen wird der Parametersatz NL3 verwendet [LKR97].

Für die im Paarungskanal eingesetzte Gogny-Kraft wird der Parametersatz D1S aus [BBD95] benutzt. Dieser wird in Tabelle 5.2 dargestellt. Die resultierende Paarungskraftstärke wurde

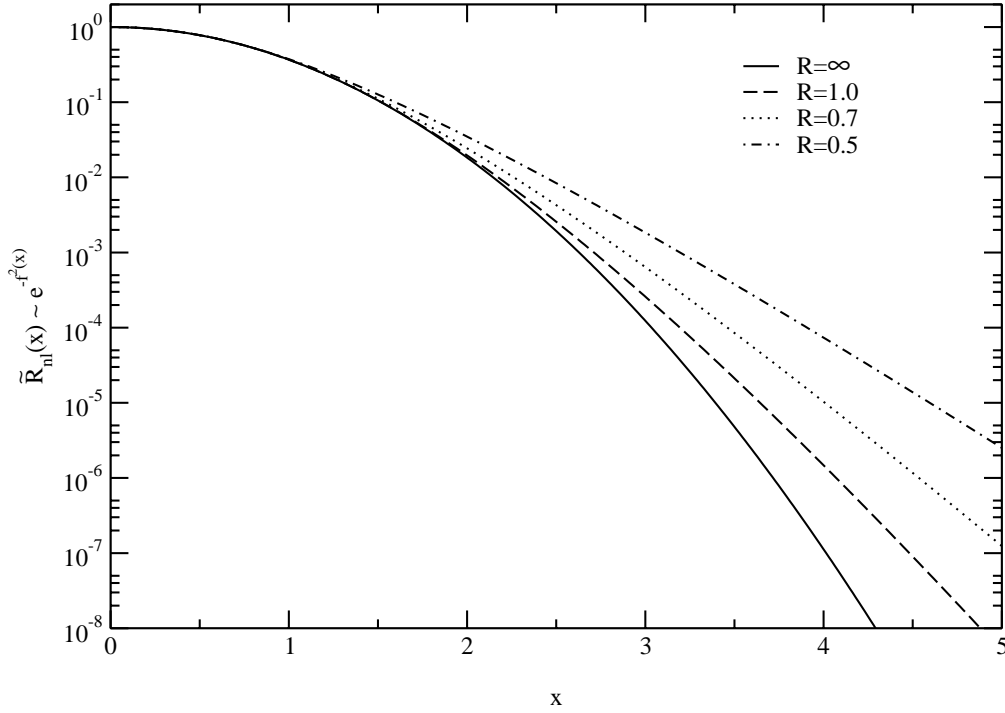


Abbildung 5.1: Verhalten der skalierten Radialfunktionen für verschiedene Werte des Parameters R .

wie in [GEL96] mit einem Faktor 1.15 skaliert, um die geringere Niveaudichte bei RMFT-Berechnungen zu kompensieren.

Die Berechnung der Matrixelemente in der Oszillatorbasis erfolgte durch ein Gauß-Quadratur-Verfahren, bei dem 64 Punkte benutzt wurden.

Die Integralen der Teilchenzahlprojektion wurden mittels der Fomenko-Entwicklung [Fom70] durch eine Summe ersetzt:

$$P^N = \frac{1}{2\pi} \int d\phi e^{i\phi(\hat{N}-N)} \approx \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L e^{i\phi_l(\hat{N}-N)}, \quad (5.21)$$

wobei $\phi_l = \frac{\pi}{L}(l - 1/2)$ und L die Anzahl der Punkte in dieser Entwicklung darstellt. Hierbei erwiesen sich 12 Punkte als hinreichend. Aus Symmetriegründen kann man die Summe auf das Intervall $[0, \pi]$ beschränken. Dabei heben sich die imaginären Anteile gegenseitig auf. Die Konvergenz der Summen wurde ständig überprüft, indem man die Rechnungen mit einer höheren Anzahl von Punkten wiederholte.

Die Werte der Basis-Parameter, nämlich der Oszillatorlänge b und des LST-Radius R , sind für jeden Kern anzupassen und werden im nächsten Kapitel zusammen mit dem jeweiligen Ergebnis genannt.

	NL2 [Lee86]	NL3 [LKR97]
M [MeV]	938.0	939.0
m_σ [MeV]	504.89	508.194
m_ω [MeV]	780.0	782.501
m_ρ [MeV]	763.0	763.0
g_σ	9.111	10.217
g_ω	11.493	12.868
g_ρ	5.507	4.474
g_2 [fm $^{-1}$]	-2.304	-10.431
g_3	13.783	-28.885

Tabelle 5.1: Parametersätze für die effektive Lagrangedichte der RMFT.

	DS1 [BBD95]	
$\mu_{1,2}$ [fm]	0.7	1.2
$W_{1,2}$ [MeV]	-1720.30	103.639
$B_{1,2}$ [MeV]	1300.00	-163.483
$H_{1,2}$ [MeV]	-1813.53	162.812
$M_{1,2}$ [MeV]	1397.60	-223.934

Tabelle 5.2: Gogny-Parametersatz DS1.

5.6 Zur Lösung der DHFB-Gleichungen im Ortsraum

Die RMFT-Gleichungen wurden in dieser Arbeit mittels Entwicklung in einer Oszillatorbasis gelöst. Eine weitere Lösungsmethode für diese Gleichungen ist die Lösung im Ortsraum. Vielversprechend ist der Einsatz dieser Methode besonders für Halo-Kerne oder Kerne, die eine exotische Dichteverteilung aufweisen, wie z.B. Bubblekerne [DP97]. Für die Lösung der HFB-Gleichungen im Ortsraum gibt es im Grunde zwei Möglichkeiten, wobei beide gemeinsam haben, daß der Raum diskretisiert wird.

Die erste Möglichkeit ist die Anwendung eines *Schießverfahrens* auf der Basis eines Runge-Kutta-Algorithmus [PFT86]: Ausgehend von durch Randbedingungen festgelegten asymptotischen Werten der Lösungen wird von innen nach außen und umgekehrt für einen bestimmten Wert der Energie integriert. Die Lösungen müssen dann an einem vorher gewählten Verbindungspunkt stetig und differenzierbar ineinander übergehen, was nur bei diskreten Werten der Energie möglich ist. Ist dies nicht der Fall, wird der angesetzte Wert für die Eigenenergie verändert und das Verfahren wiederholt, bis der Anschluß innerhalb einer vorgegebenen Genauigkeit erfolgt ist. Bei den komplizierten DHFB-Integrodifferentialgleichungen stößt allerdings diese bewährte Methode an ihre Grenzen und wurde bisher nur im Spezialfall

einer lokalen Paarungskraft, wie z.B. die Delta-Kraft, angewendet. Bei Paarungskräften mit endlicher Reichweite ist es bisher nicht gelungen, das Schießverfahren ohne erheblichen numerischen Aufwand zuverlässig anzuwenden.

Weiterhin bietet sich für die Lösung der DHFB-Gleichungen im Ortsraum die in den Ingenieurwissenschaften weit verbreitete *Finite-Element-Methode* (FEM) an [PVR97]. Bei der FEM wird der Ortsraum diskretisiert und in sogenannte Elemente aufgeteilt. Jedem Element wird ein Satz polynomartiger Funktionen zugeordnet, die nur in dessen Teilgebiet von Null verschieden sind. Durch Entwicklung in einer „Ortsraumbasis“, die sich aus all diesen lokalen Funktionen zusammensetzt, werden die zu lösenden Differentialgleichungen in ein Eigenwertproblem umgewandelt. Wegen der lokalen Natur der Basis sind die resultierenden Matrizen schwach besetzt und können trotz ihrer Größe mittels spezieller Methoden behandelt werden.

Die spezielle Basis bietet den Vorteil, daß jede Funktionsform sich darstellen läßt; Dies ist z.B. bei Schwingungsproblemen von großem Nutzen, läßt jedoch bei physikalischen Problemen wichtige Informationen über das asymptotische Verhalten der Lösungen unbeachtet. Zudem führt die große Freiheit in der Gestaltung der Lösungen zum Auftreten von spuriösen Zuständen: Dies sind numerisch legitime Lösungen, die wegen ihres stark oszillierenden Verhaltens physikalisch nicht annehmbar sind. Solche Zustände sind meist leicht zu erkennen und herauszufiltern, können sich in manchen Fällen jedoch durch eine Energie-Entartung mit physikalischen Zuständen mischen und diese unnutzbar machen. Dieses Phänomen tritt zwar selten auf, ist dennoch wegen des iterativen Lösungsverfahrens nicht akzeptabel. Es wurde festgestellt, daß die Verwendung von Polynomen höheren Grades oder gar von B-Splines als Basisfunktionen die Anzahl der spuriösen Zustände reduziert. Dies hat den zusätzlichen Vorteil, daß gleiche Genauigkeit mit wenigen Stützstellen erzielt werden kann, erhöht jedoch die Bandbreite der Matrizen und damit den Rechen- und Speicheraufwand des Diagonalisationsproblems.

Es ist zudem zu erwarten, daß der Einsatz von teilchenzahlprojizierten Potentialen selbst im Fall einer lokalen Paarungskraft zu vollbesetzten Matrizen führt, was die Verwendung der Finite-Element-Methode für die Lösung der projizierten DHFB-Gleichungen nicht praktikabel macht.

6 Beschreibung Exotischer Kerne

Mit den in den vorigen Kapiteln entwickelten Werkzeugen wurden exotische Kerne untersucht. Insbesondere wurden Kernsysteme in der Nähe der Neutronenabbruchkante untersucht, bei denen aufgrund eines übermäßigen Neutronenüberschusses Neutronen-Halos oder Neutronenhäute entstehen können.

So wurden projizierte DHB-Rechnungen für Lithium-, Neon- und Zinn-Atomkerne durchgeführt. Im Mittelpunkt dieser Untersuchungen stand die Frage nach dem Effekt der Teilchenzahlprojektion auf die makroskopischen Eigenschaften exotischer Kerne bzw. ob sie zu einer physikalisch besseren Beschreibung solcher Systeme verhilft.

6.1 Ergebnisse zu den Zinn-Isotopen

Untersucht wurden zunächst die Zinn-Isotope mit gerader Neutronenzahl von ^{100}Sn bis ^{132}Sn . Dabei wurde der RMFT-Parametersatz NL3 benutzt. Unprojizierte relativistische Untersuchungen zu diesen Kernen wurden bereits in [LVR98] veröffentlicht.

In Abbildung 6.1 werden die Neutronenpaarungsenergie $E_{\text{pair}} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \Delta \kappa^*$, gegebenenfalls der entsprechende projizierte Ausdruck (3.65c), die Bindungsenergie pro Nukleon und der Radius aus projizierten und unprojizierten RMFT-Berechnungen mit den vorhandenen experimentellen Daten verglichen. Die Paarungsenergie kann experimentell nicht gemessen werden, ist dennoch ein wichtiges Maß für die Größe der Paarungskorrelationen im Rahmen des verwendeten Modells.

Zusätzlich wurden Berechnungen durchgeführt, bei denen die Teilchenzahlprojektion erst nach Konvergenz der Hartree-Bogoliubov-Iteration erfolgte. Die Ergebnisse dieser sogenannten Projektion nach der Variation (*Projection after Variation*, PAV) werden auch in der Abbildung dargestellt. Beide Projektionsmethoden liefern größere Werte für die Bindungsenergie als unprojizierte Rechnungen, was auf eine physikalisch bessere Beschreibung der Kernsysteme durch die Teilchenzahlprojektion schließen läßt. Man stellt generell eine gute Übereinstimmung der theoretischen Ergebnisse mit den experimentellen Werten fest. Jedoch ergibt sich bei den HB-Rechnungen eine Überbindung der Zinn-Isotope. Bei ^{100}Sn und ^{102}Sn ist diese am größten. Allerdings wird bei solchen Kernen mit $N \approx Z$ erwartet,

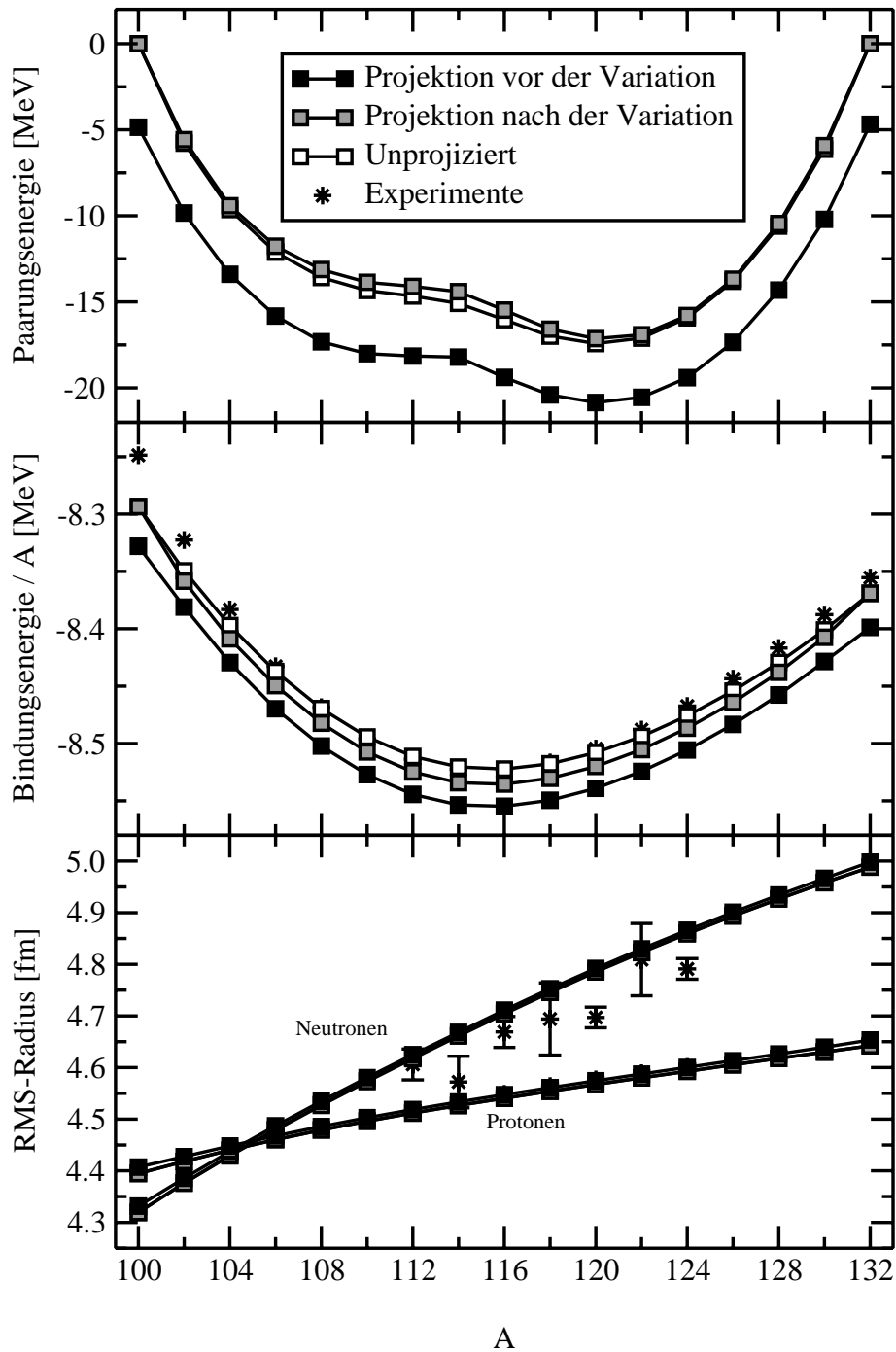


Abbildung 6.1: Neutronenpaarungsenergie, Bindungsenergie pro Nukleon und Radius für Zinn-Isotope verglichen mit experimentellen Daten aus [AW95, VJV87, Kra99, Trz01]. Bei den Radien ist der Effekt der Teilchenzahlprojektion jedoch so gering, daß sich die Ergebnisse der verschiedenen Methoden kaum unterscheiden.

daß Paarungskorrelationen zwischen Neutronen und Protonen, die hier nicht berücksichtigt werden, eine wichtige Rolle spielen und die Massen beeinflussen können [TWH98, WS01]. Für die Paarungsenergie ergibt die Projektion nach der Variation systematisch im Betrag niedrigere Werte als unprojizierte Rechnungen. Dies ist zwar ein unerwartetes Ergebnis, widerspricht aber auf keine Weise dem Variationsprinzip, für das lediglich eine größere Bindungsenergie wesentlich ist. Die Paarungsenergie der Projektion vor der Variation liegt über den ganzen Neutronenzahlbereich deutlich tiefer als die Ergebnisse der beiden anderen Prozeduren. Dies ist durch zusätzliche, durch die Teilchenzahlprojektion hervorgehende Korrelationen bedingt [DMP64]. Die Radien werden im untersten Teil des Bildes dargestellt. Die berechneten Werte sind in relativ guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, besonders wenn man den teilweise großen Meßfehler der Neutronenradien berücksichtigt. Dabei ist keine Änderung durch die Teilchenzahlprojektion zu beobachten. Der Neutronenradius steigt mit der Massenzahl viel steiler als der Protonenradius. Dieses Verhalten spiegelt sich in den Einteilchendichten wider, wie man in Abbildung 6.2 sehen kann. Die Protonendichte ändert sich kaum, während die Neutronendichte sich mit steigender Massenzahl immer weiter ausdehnt. Dadurch entsteht eine Zone aus beinahe reiner Neutronenmaterie, eine sogenannte Neutronenhaut. Auch hier kann man keinen durch die Teilchenzahlprojektion bedingten Effekt feststellen.

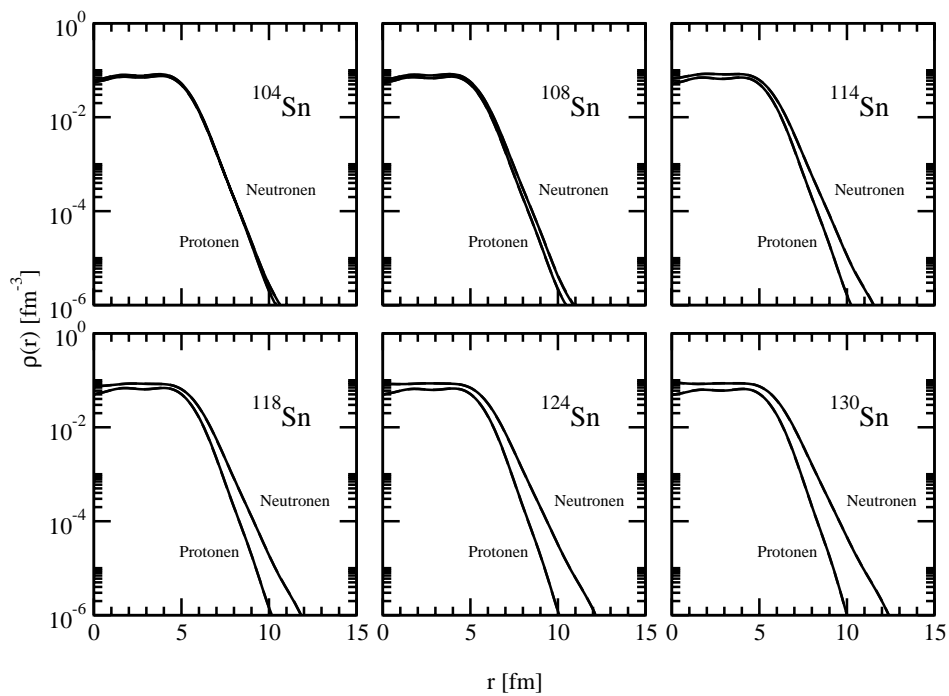


Abbildung 6.2: Einteilchendichte für Zinn-Isotope als Funktion des Radius. Die gestrichelten Kurven bezeichnen unprojizierte Ergebnisse, projizierte sind durch durchgezogene Kurven gekennzeichnet. Der Effekt der Teilchenzahlprojektion ist hier jedoch so gering, daß die Ergebnisse beider Methoden übereinander liegen und nicht zu unterscheiden sind.

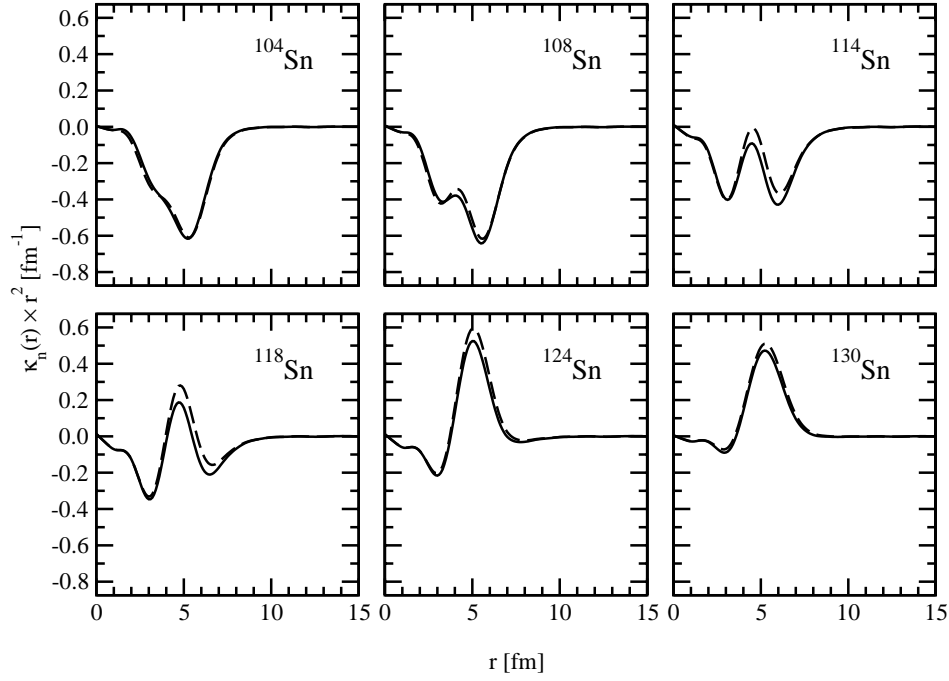


Abbildung 6.3: Diagonaler Anteil des Neutronenpaarungstensors, Gleichungen (6.1), für Zinn-Isotope als Funktion des Radius. Die gestrichelten Kurven bezeichnen unprojizierte Ergebnisse, projizierte sind durch durchgezogene Kurven gekennzeichnet.

In Abbildung 6.3 wird der diagonale Anteil des Neutronenpaarungstensors

$$\kappa(r) = \sum_{\nu=1}^N [g_{\nu}^V(r)g_{\nu}^U(r) - f_{\nu}^V(r)f_{\nu}^U(r)] \quad (6.1a)$$

bzw.

$$\kappa^N(r) = \int d\phi y(\phi)C(\phi)\kappa(r) \quad (6.1b)$$

für die Kerne der Abbildung 6.2 dargestellt. Bei niedriger Besetzung der Hauptschale werden hauptsächlich Niveaus positiver Parität aufgefüllt. Gegen $A = 122$ sind diese Niveaus fast vollständig besetzt und folglich sinkt ihr Beitrag zur Paarungsenergie ab. Ab diesem Punkt tragen die Niveaus negativer Parität am stärksten zur Paarungsenergie bei. Weil der Paarungstensor je nach Parität des Niveaus unterschiedliche Phasen aufweist, entsteht das Vorzeichenwechseln mit steigender Neutronenzahl, das im Bild sowohl im unprojizierten als auch im projizierten Fall zu erkennen ist.

6.2 Ergebnisse zu den Neon–Isotopen

Bei dem Element Neon wurden die Isotope mit gerader Neutronenzahl zwischen ^{30}Ne und ^{40}Ne untersucht. Wie schon bei den Zinn–Isotopen fand hier der RMFT–Parametersatz NL3 Verwendung.

Bei früheren unprojizierten Untersuchungen im Ortsraum wurde die Bildung von Neutronen–Halos ab $A = 32$ festgestellt [PVL97]. Dabei wurde, wie in der vorliegenden Arbeit, die Gogny–Kraft als Wechselwirkung im Paarungskanal eingesetzt. Für die Lösung der relativistischen HB–Gleichungen bediente man sich der Finite–Element–Methode. Die Anwendung dieser Methode bei projizierten Berechnungen ist jedoch zunächst, wie im Kapitel 5 diskutiert, nicht praktikabel. Aus diesem Grund griff man hier auf die Methode der Entwicklung in einer Oszillatorbasis zurück. Um schwachabfallende Dichte, wie sie bei Halo–Kernen vorkommen, trotzdem beschreiben zu können, wurde die im Abschnitt 5.4 eingeführte lokal–skalierte Basis verwendet. Der Basisparameter b wird dabei, wie gewöhnlich, durch die Formel

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_0}}, \quad \text{mit } \hbar\omega_0 = 41 A^{-1/3}, \quad (6.2)$$

bestimmt. Der zusätzliche Parameter R wird durch mehrere Berechnungen im Isotop ^{30}Ne bestimmt. Es wird ein Wert genommen, bei dem es sich ein exponentieller Abfall der Dichte ergibt. Da bei dem Kern ^{30}Ne kein Halo zu erwarten ist, verursacht die Skalierung, abgesehen von dem besseren asymptotischen Verhalten, auch keine wesentliche Änderung in der Einteilchendichte. Dies ist in Abbildung 6.4 ersichtlich, in der die Neutroneneinteilchendichte für ^{30}Ne als Funktion des Radius für verschiedene Werte des LST–Parameters R dargestellt wird. Man stellt dabei fest, daß die Dichte vom genauen Wert des Parameters R im Bereich 1.0–1.2 fm kaum abhängt. Ausgewählt für die weiteren Untersuchungen wurde der Wert $R = 1.1$ fm. Dieser Werte wird dann für die Berechnungen aller anderen Neon–Isotope verwendet.

In Abbildung 6.5 werden die Neutronenpaarungsenergie, die Bindungsenergie pro Nukleon und der Radius aus projizierten und unprojizierten Berechnungen verglichen. Experimentelle Werte für diese Kerne sind zu diesem Zeitpunkt nicht vorhanden. Wie schon bei den Zinn–Kernen zu beobachten war, ergeben projizierte Rechnungen für alle Isotope eine tiefere Paarungsenergie als im unprojizierten Fall. Wie bei den Zinn–Isotopen mit abgeschlossener Schale, bricht bei ^{30}Ne ohne Teilchenzahlprojektion ebenfalls die Paarung zusammen. Dieses Ergebnis ist typisch für HFB–Berechnungen. Im projizierten Fall hingegen ergibt sich für diesen Kern eine von Null verschiedene Paarungsenergie. Die projizierten Gesamtbindungsenergien sind für alle Isotope in Übereinstimmung mit dem Variationsprinzip um einige MeV niedriger als die unprojizierten. Die Radien werden im untersten Teil des Bildes dargestellt. Zum Vergleich ist eine $N^{1/3}$ –Kurve eingezeichnet, die an den Neutronenradius von ^{28}Ne angepaßt wurde. Bei $A = 30$ ist ein Knick im Verlauf der Neutronenkurve zu beobachten. Für

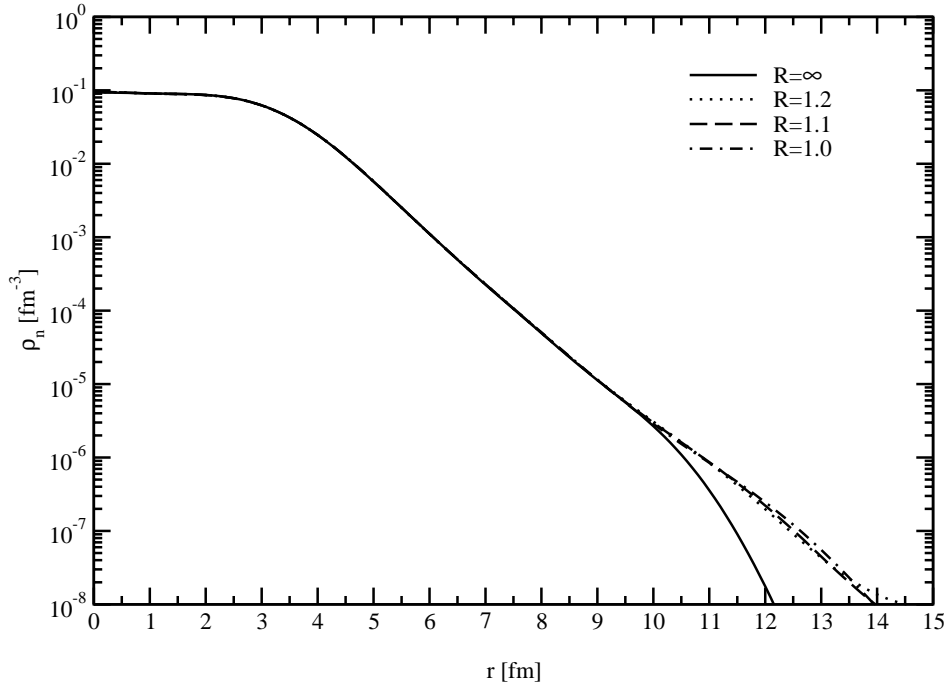


Abbildung 6.4: Neutroneneichte für ^{30}Ne als Funktion des Radius für verschiedene Werte des LST-Parameters R , in fm. Die mit $R = \infty$ bezeichnete Kurve entspricht dem untransformierten Fall.

größere Neutronenzahlen liegt der Neutronenradius, sowohl in den projizierten als auch in den unprojizierten Ergebnissen, deutlich über der $N^{1/3}$ -Kurve. Ähnlich wie bei den Zinn-Kernen bleibt der Protonenradius praktisch konstant mit der Massenzahl. Durch die Teilchenzahlprojektion bleibt dieses Bild im wesentlichen unverändert, abgesehen von einer geringfügigen Reduzierung des Neutronenradius bei einigen Isotopen.

Abbildung 6.6 stellt die Einteilchendichte für die hier untersuchten Neon-Isotope dar. Wie in den Referenzen [PVL97, SRV98] ist im unprojizierten Fall ein starkes Ansteigen der Neutronendichte für $A \geq 32$ gegenüber $A = 30$ festzustellen. Die Neutronendichte dehnt sich weit über die eigentlichen Grenzen des Kerns hinaus aus. Dies ist ein typisches Kennzeichen für das Halo-Phänomen. Nach der Teilchenzahlprojektion ist bei ^{32}Ne ein deutliches Absinken der Neutronendichte zu beobachten. Die Teilchenzahlprojektion führt somit zu einem stetigeren Übergang zwischen dem Nicht-Halo- und dem Halo-Regime.

Um die Rolle der Paarungskorrelationen für die Halo-Bildung zu verdeutlichen, wird in Abbildung 6.7 der diagonale Anteil des Neutronenpaarungstensors für die hier untersuchten Neon-Kerne dargestellt. Die Paarwechselwirkung ist an der Kernoberfläche konzentriert und ihre Stärke steigt kontinuierlich mit der Neutronenzahl. Für alle Halo-Isotope erstreckt sich der Paarungstensor über die Kerngrenze hinaus. Auch das durch die Teilchenzahlprojektion bedingte Erhaltenbleiben der Paarung bei ^{30}Ne wird hier sichtbar. Mit Ausnahme von diesem

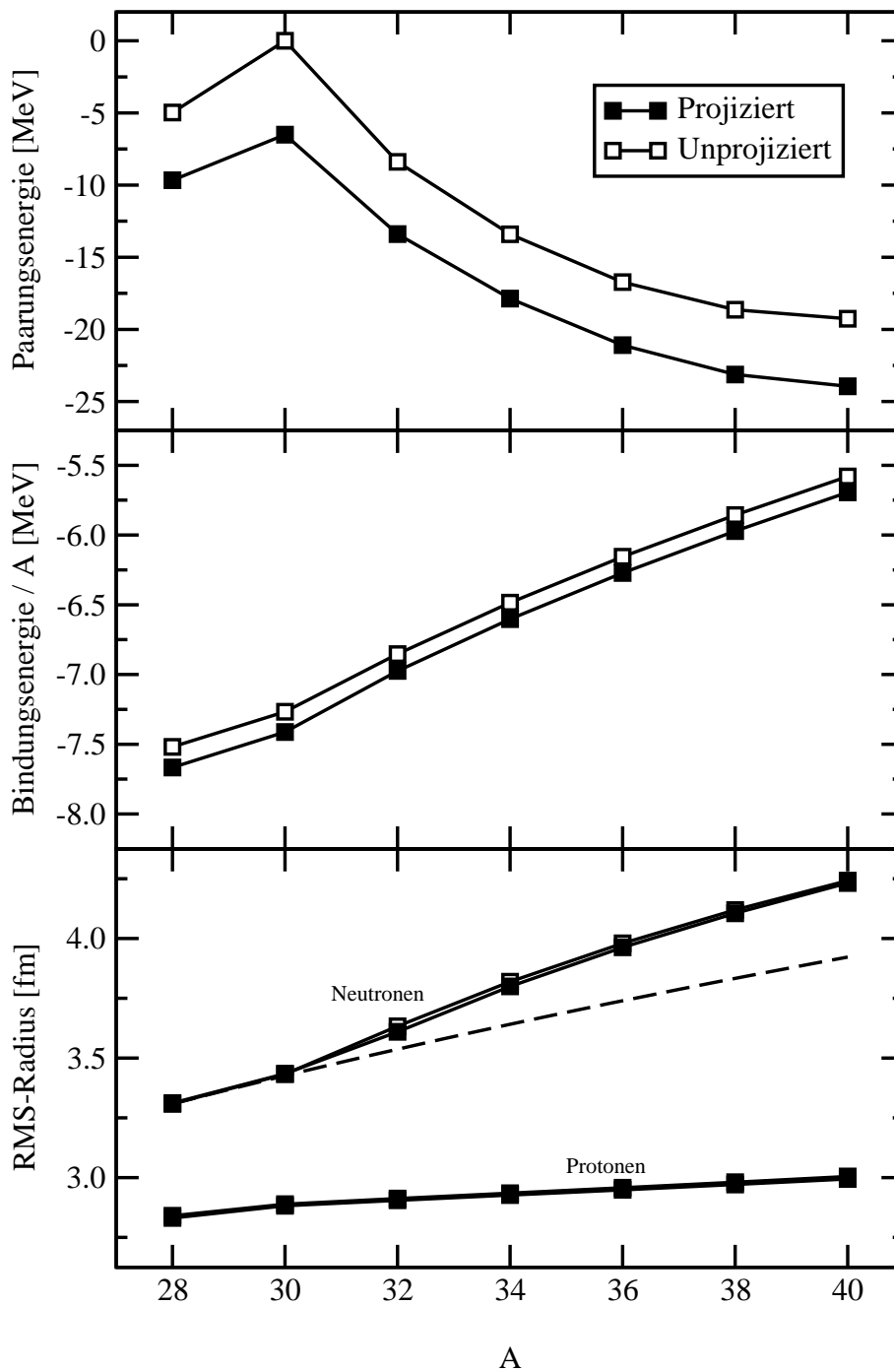


Abbildung 6.5: Neutronenpaarungsenergie, Bindungsenergie pro Nukleon und Radius für Neon-Isotope. Die gestrichelte Linie im untersten Teil des Bildes stellt eine $N^{1/3}$ -Kurve dar, die an den Neutronenradius von ^{28}Ne angepaßt wurde. Bei den Radien ist der Effekt der Teilchenzahlprojektion jedoch so gering, daß sich die Ergebnisse projizierter und unprojizierter Berechnungen, insbesondere für die Protonen, nicht unterscheiden.

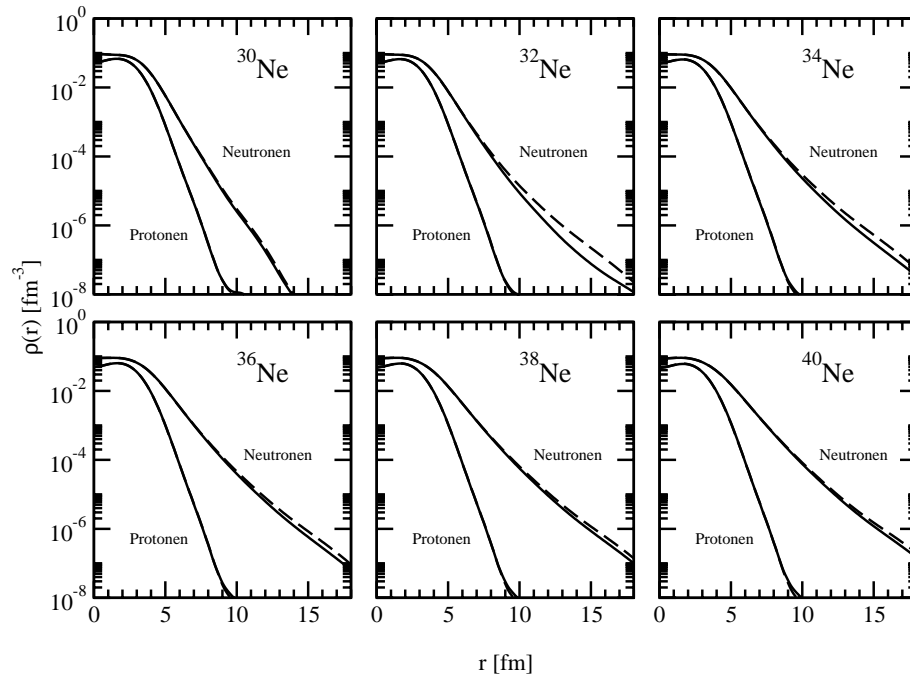


Abbildung 6.6: Einteilchendichte für Neon–Isotope als Funktion des Radius. Wie schon bei den Zinn–Kernen bezeichnen die gestrichelten Kurven unprojizierte Ergebnisse, projizierte sind durch durchgezogene Kurven gekennzeichnet.

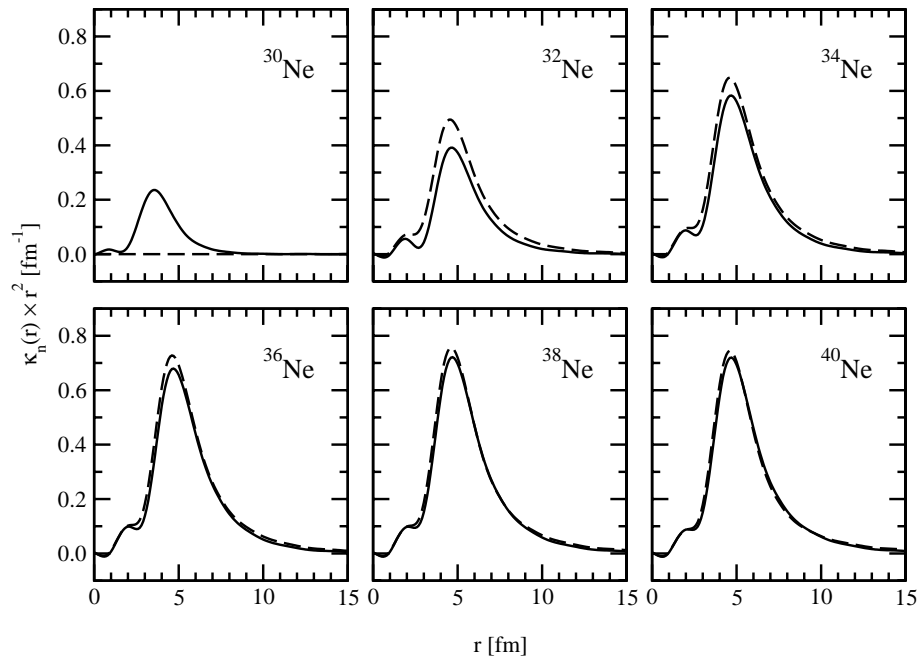


Abbildung 6.7: Diagonaler Anteil des Neutronenpaarungstensors für Neon–Isotope als Funktion des Radius. Die Legenden sind die gleichen, wie sie in der Abbildung 6.6 verwendet wurden.

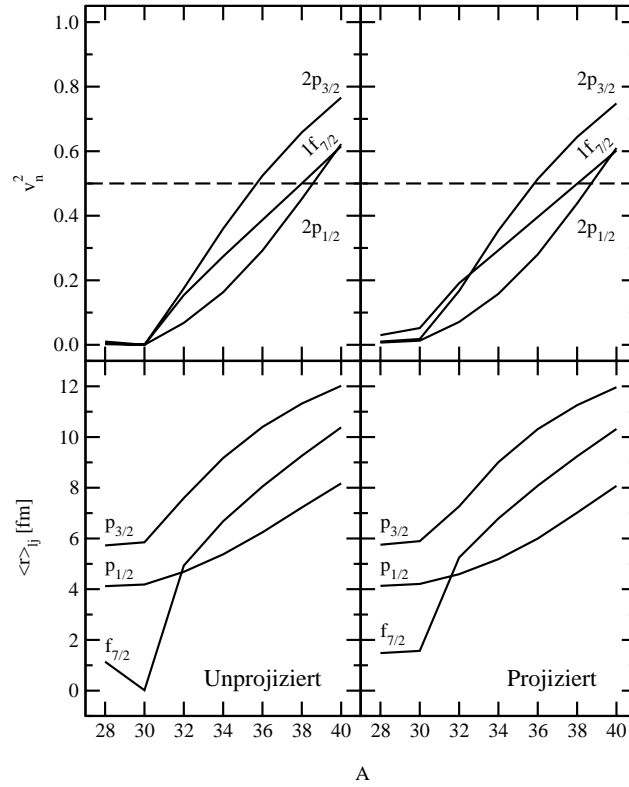


Abbildung 6.8: Beiträge der verschiedenen Spin-Parität-Kanäle zum Neutronenanteil des Kernradius sowie Besetzungswahrscheinlichkeiten der entsprechenden Einteilchenniveaus bei den Neon-Isotopen.

Kern führt die Teilchenzahlprojektion bei allen Isotopen zu einem Absenken des Diagonalwertes des Paarungstensors. Dies steht im Gegensatz zu dem oben diskutierten Verhalten der Paarungsenergie. Die Erklärung hierfür liegt im nichtlokalen Charakter der Gogny-Kraft, wodurch auch außerdiagonale Elemente des Paarungstensors zur Paarungsenergie beitragen.

In Abbildung 6.8 werden die Beiträge der verschiedenen Spin-Parität-Kanäle zum Neutronenanteil des Kernradius dargestellt. Die Einteilchenniveaus $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ und $1f_{7/2}$ sind direkt an der Halo-Bildung beteiligt. Die entsprechenden Besetzungswahrscheinlichkeiten werden im oberen Teil des Bildes dargestellt. Dies sind, wie im Kapitel 3 erklärt, die Eigenwerte der Dichtenmatrix in der kanonischen Basis. Im unprojizierten Fall nähern sich diese Niveaus bei $A = 32$ der Fermi-Kante und werden besetzt. An den Besetzungswahrscheinlichkeiten ist es zudem zu erkennen, daß diese Niveaus energetisch relativ nahe beieinander sind. Die Paarwechselwirkung streut Neutronenpaare von dem $1f_{7/2}$ -Orbital in die $2p$ -Niveaus, die dank ihrer geringeren Zentrifugalbarriere zur Halo-Bildung führen. Durch die Teilchenzahlprojektion ändert sich das mittlere Potential und die obengenannten Niveaus, insbesondere $1f_{7/2}$, werden bereits ab $A = 30$ besetzt. Das Absenken der Neutronendichte bei ^{32}Ne nach der Teilchenzahlprojektion, deutlich sichtbar in Abbildung 6.6, ist in diesem Bild nicht zu erkennen. Diese Änderung in der Dichte hat in der Tat eine sehr kleine Auswirkung auf den Radius, wie man beim Betrachten der Abbildung 6.5 feststellen kann.

6.3 Ergebnisse zu den Lithium–Isotopen

Es wurden die Lithium–Isotope ${}^7\text{Li}$, ${}^9\text{Li}$ und ${}^{11}\text{Li}$ untersucht. Dafür bediente man sich des Parametersatzes NL2, der speziell für die Berechnung leichter Kerne entwickelt wurde [Lee86]. Ähnlich wie bei den Neon–Untersuchungen wird der LST–Parameter R durch mehrere Berechnungen in ${}^7\text{Li}$ bestimmt. Daraus ergab sich der Wert $R = 0.5$ fm. Der Oszillatorbasis–Parameter b wurde weiterhin durch (6.2) bestimmt.

Erste Berechnungen ergaben, daß die Fermi–Kante bei dem Kern ${}^{11}\text{Li}$ im Kontinuum liegt. Dieser Kern ist nach diesen Ergebnissen trotz negativer Gesamtenergie somit ungebunden. Da eine gewisse Willkür bei der Wahl des Skalierungsfaktors der Paarungskraft (siehe Abschnitt 5.5) bestand, wurde zunächst der Einfluß dieses Parameters auf die Ergebnisse untersucht. Das Resultat dieser Untersuchung wird in Abbildung 6.9 dargestellt.

Im oberen Teil des Bildes wird die Energie in der kanonischen Basis für die Neutroneneinteilchenniveaus nahe an der Fermi–Kante dargestellt. Das Fermi–Niveau wird dabei durch die gestrichelte Kurve bezeichnet. Ab einem Skalierungsfaktor $f_{\text{pair}} \approx 1.4$ ist die Fermi–Kante negativ und der Kern gebunden. Die Neutroneneinteilchenenergien ändern sich sehr wenig mit dem Paarkraft–Faktor. Bei den Beiträgen zum Neutronenradius (mittlerer Teil des Bildes) ist ein starker Anstieg beim $s_{1/2}$ –Kanal begleitet von einem stetigen Absenken im $p_{1/2}$ –Kanal ab $f_{\text{pair}} = 1.1$ zu beobachten. Dies ist dadurch zu verstehen, daß die Paarungskraft ab diesem Punkt stark genug ist, um Neutronenpaare vom Zustand $1p_{1/2}$ in das Niveau $1s_{1/2}$ zu streuen. Dies führt zu einem ähnlich starken Anstieg des Gesamtradius, der im unteren Teil des Bildes dargestellt wird.

Durch den höheren Skalierungsfaktor 1.4 statt des bisher verwendeten Wertes 1.15 senkt die Bindungsenergie von -44.43 MeV auf -45.88 MeV und stimmt somit besser mit dem experimentellen Wert -45.64 MeV überein. Auch der Kernradius liegt mit 3.19 fm bei stärkerer Paarung gegenüber 3.01 fm bei den Berechnungen mit $f_{\text{pair}} = 1.15$ näher dem experimentellen Wert 3.12 fm. Die Paarungsenergie beider Konfigurationen unterscheiden sich dabei durch einen Faktor 6. Sie ist allerdings keine experimentell meßbare Größe. Der Einsatz einer stärkeren Paarung mit dem Ziel, einen gebundenen Grundzustand bei ${}^{11}\text{Li}$ zu erhalten, führt zugleich zu Ergebnissen, die im sehr guter Übereinstimmung mit den gemessenen Werten sind.

Die Ergebnisse für die Neutronenpaarungsenergie, die Bindungsenergie und den Gesamtradius werden in Abbildung 6.10 dargestellt und mit den experimentellen Daten der gesamten Lithium–Isotopenkette verglichen. Die unprojizierten Resultaten stimmen gut mit den vorhandenen experimentellen Daten überein. Wie schon bei den Untersuchungen der anderen Isotopenketten festgestellt wurde, werden sowohl die Neutronenpaarungsenergie als auch die Bindungsenergie durch die Teilchenzahlprojektion abgesenkt. Die Radien bleiben bei ${}^7\text{Li}$ und ${}^9\text{Li}$ durch die Teilchenzahlprojektion, abgesehen von einer leichten Verkleinerung, im wesentlichen unverändert. Bei ${}^{11}\text{Li}$ führt sie jedoch zu einem deutlichen Absenken des Kernradius,

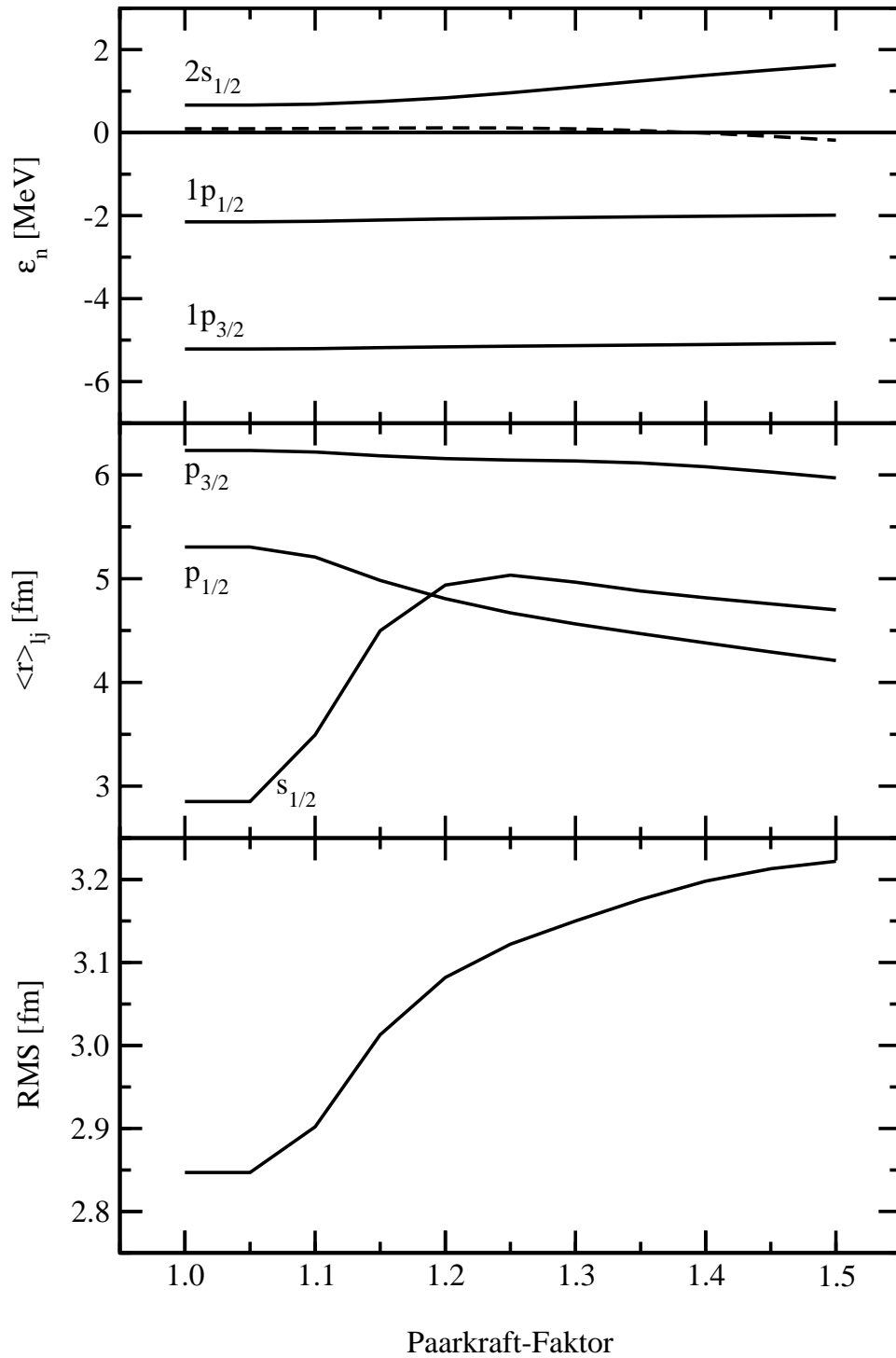


Abbildung 6.9: Energie in der kanonischen Basis für die Neutroneneinteilchenniveaus nahe an der Fermi-Kante (oberer Teil), Beitrag der entsprechenden Spin-Parität-Kanäle zum Neutronenradius (mittlerer Teil) sowie Gesamtradius für ^{11}Li (unterer Teil) als Funktion des Skalierungsfaktors der Paarungskraft. Die Fermi-Kante ist im oberen Teil des Bildes durch die gestrichelte Kurve bezeichnet.

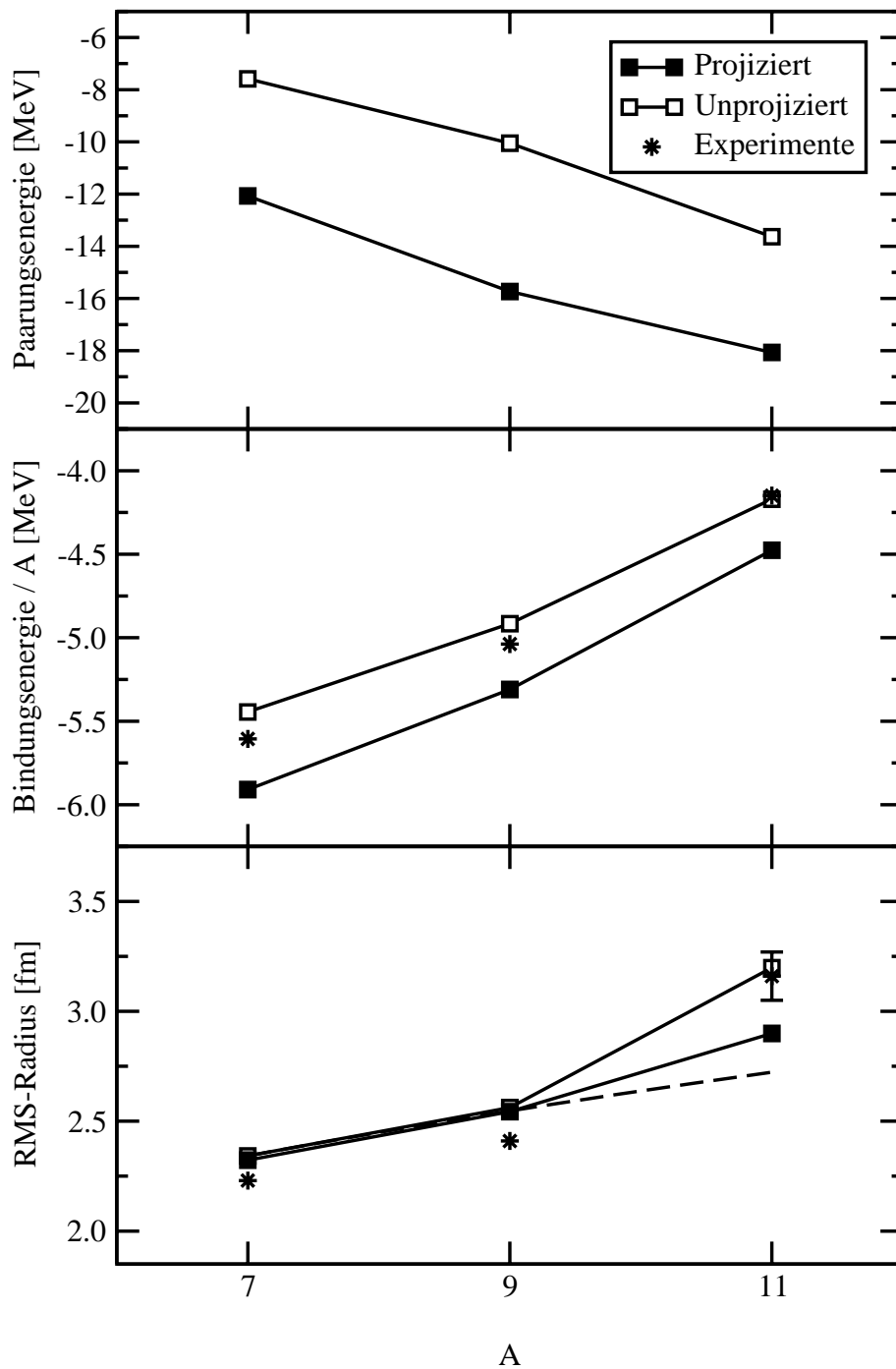


Abbildung 6.10: Neutronenpaarungsenergie, Bindungsenergie pro Nukleon und Radius für Lithium-Isotope verglichen mit experimentellen Werten aus [AW95, Tan85, Sag92, Tan88]. Die gestrichelte Linie im untersten Teil des Bildes stellt eine $A^{1/3}$ -Kurve dar, die an den Gesamtradius von ${}^7\text{Li}$ angepaßt wurde.

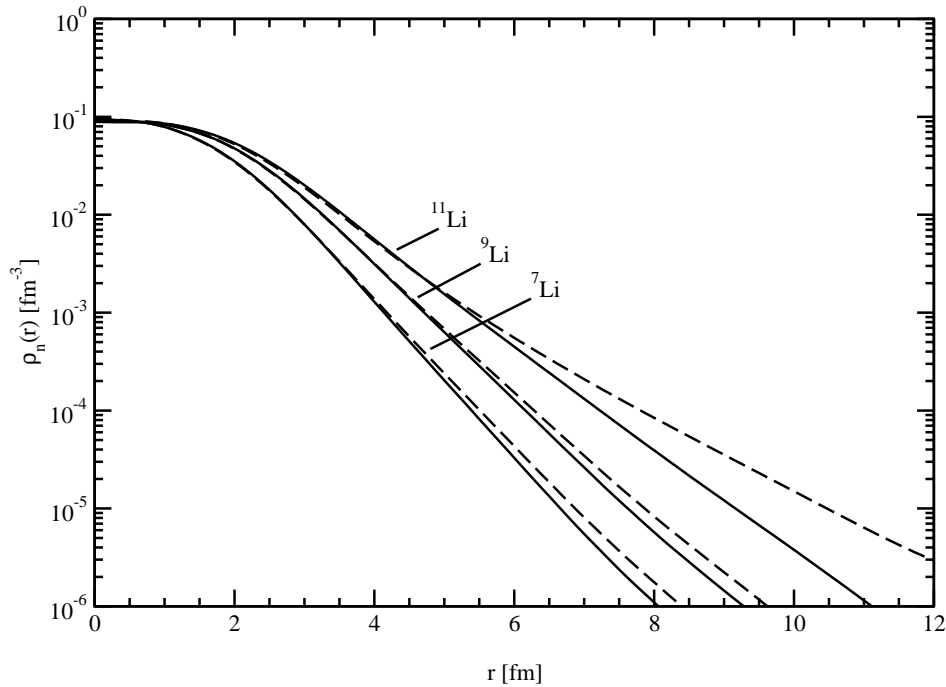


Abbildung 6.11: Neutronendichte als Funktion des Radius für Lithium-Isotope. Die gestrichelten Kurven bezeichnen unprojizierte Ergebnisse, projizierte sind durch durchgezogene Kurven gekennzeichnet.

wobei die sehr gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert verlorengeht. Dennoch liegt das Ergebnis für diesen Kern, sowohl im projizierten als auch im unprojizierten Fall, deutlich über der in der Abbildung eingezeichneten $A^{1/3}$ -Kurve, die an den Gesamtradius von ^7Li angepaßt wurde.

In Abbildung 6.11 wird die Neutronendichte für die Lithium-Isotope dargestellt. Im Kern ^{11}Li ist bei den unprojizierten Ergebnissen die Bildung eines Halo festzustellen, allerdings nicht so ausgeprägt wie bei den Ortsraumberechnungen in [MR96]. Bei dieser Untersuchung wurde eine δ -Kraft im Paarungskanal, deren Stärke durch Anpassung an die Paarungsenergie von ^7Li bestimmt wurde, verwendet. Wie schon bei den Ergebnissen für die Radien, verursacht die Teilchenzahlprojektion bei ^7Li und ^9Li nur eine leichte Verkleinerung der Einteilchendichte, während sich bei ^{11}Li ein drastisches Absenken der Neutronendichte ergibt. Bei diesen teilchenzahlprojizierten Berechnungen ergibt sich dem zufolge kein Halo für ^{11}Li .

In Abbildung 6.12 wird die Gesamtdichte für ^{11}Li mit der experimentellen Dichtverteilung aus [Sag92] verglichen. Die Bildung eines Halo bei den unprojizierten Berechnungen ist darin nochmals deutlich zu erkennen. Quantitativ ist die Beschreibung des Halo jedoch nicht vollkommen, obwohl der Wert für den Radius in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment steht. Bei dem projizierten Ergebnis ist kein Halo zu erkennen.

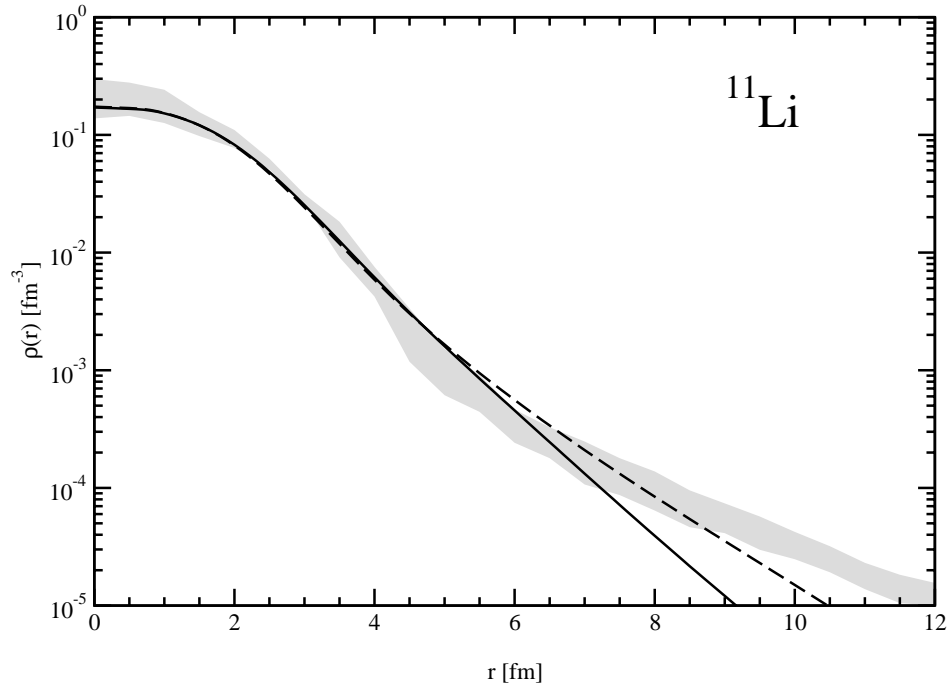


Abbildung 6.12: Gesamtdichte für ^{11}Li als Funktion des Radius verglichen mit der experimentellen Dichtverteilung aus [Sag92]. Die gestrichelte Kurve bezeichnet das unprojizierte Ergebnis, das projizierte ist durch die durchgezogene Kurve gekennzeichnet. Der graue Bereich bezeichnet die experimentell ermittelte Dichte mit Fehlerbalken.

Der diagonale Anteil des Neutronenpaarungstensors für die Lithium-Isotope wird in Abbildung 6.13 dargestellt. Hier führt die Teilchenzahlprojektion, außer bei ^7Li , zu einem Anstieg des Diagonalwertes des Paarungstensors. Ähnlich wie bei den Neon-Kernen konzentriert sich auch hier die Paarwechselwirkung an der Kernoberfläche. Ferner ist zu beobachten, wie sich der Paarungstensor bei ^{11}Li im unprojizierten Fall weit über den eigentlichen Kernradius hinaus streckt. Dies weist auf die entscheidende Rolle der Paarungskorrelationen in der Halo-Bildung hin.

Bei der Entstehung des Halo im Kern ^{11}Li sind die Einteilchenniveaus $1p_{1/2}$, $1p_{3/2}$ und besonders $2s_{1/2}$ beteiligt [MR96]. In Abbildung 6.14 werden die Beiträge der entsprechenden Spin-Parität-Kanäle zum Neutronenradius sowie die Besetzungswahrscheinlichkeiten dieser Orbitale als Funktion der Massenzahl für die Lithium-Isotope dargestellt. Sowohl im unprojizierten als auch im projizierten Fall steigt der Beitrag der $p_{1/2}$ - und $p_{3/2}$ -Kanäle kontinuierlich mit der Massenzahl. Trotz schwacher Besetzung des Orbitals $2s_{1/2}$ tragen bei ^9Li die Kanäle $s_{1/2}$ und $p_{1/2}$ in beiden Fällen praktisch gleichermassen zum Kernradius bei. Am Übergang von ^9Li zu ^{11}Li nähert sich das Niveau $2s_{1/2}$ der Fermi-Kante und wird stärker besetzt. Infolge seiner geringeren Zentrifugalbarriere steigt der Beitrag vom $s_{1/2}$ -Kanal zum Kernradius. Im unprojizierten Fall führt dies zur Bildung eines Halo, wie in Abbildung 6.11 festzustellen ist.

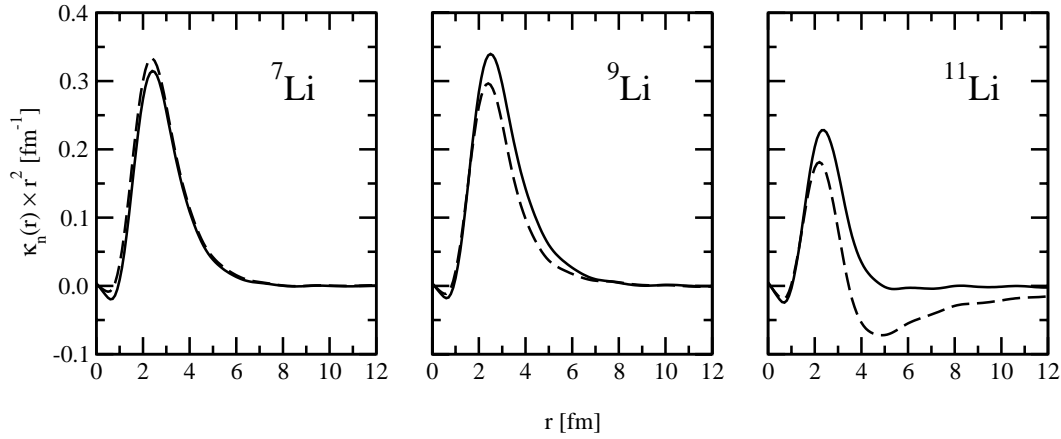


Abbildung 6.13: Diagonaler Anteil des Neutronenpaarungstensors als Funktion des Radius für Lithium-Isotope. Die Legenden sind die gleichen, wie sie in der Abbildung 6.12 verwendet wurden.

Nach der Teilchenzahlprojektion führen die Änderungen im Mittelfeld dazu, daß die Energie des Zustandes $2s_{1/2}$ leicht nach oben verschoben wird. Trotz erhöhter Paarung kann dieses Niveau im projizierten Fall nicht stark genug besetzt werden. Dadurch senkt sein Beitrag zum Kernradius und somit der Gesamtradius von ^{11}Li .

Die Abhängigkeit von der exakten Position des $2s_{1/2}$ -Zustandes im Energiespektrum macht den Mechanismus der Halo-Bildung im Kern ^{11}Li besonders anfällig gegen kleine Verschiebungen der Einteilchenniveaus. Dies trifft nicht nur im Fall einer Teilchenzahlprojektion zu, sondern auch bei der Verwendung anderer RMFT-Parametersätze. Aus diesem Grund soll dem Zusammenbruch des Halo nach der Teilchenzahlprojektion keine große physikalische Bedeutung beigemessen werden. Bei den Neon-Isotopen ist hingegen die Entartung der Orbitale nahe an der Fermi-Kante entscheidend für die Halo-Bildung. Dieser Mechanismus ist folglich stabiler gegen kleine Änderungen im Potential, wie man an den Ergebnissen zu diesen Isotopen feststellen konnte.

6.4 Das Divergenzproblem bei der Teilchenzahlprojektion

Im Abschnitt 3.3 wurde das erweiterte Wicksche Theorem benutzt, um Zweiteilchenmatrixelemente durch die generalisierten Dichten auszudrücken und somit den Ausdruck (3.37) für den Hamiltonoperatorsüberlapp abzuleiten. Daraus ergab sich Gleichung (3.64) für die projizierte Energie.

In der kanonischen Basis, hier durch die Operatoren a_n^+ und a_n gekennzeichnet, sind die

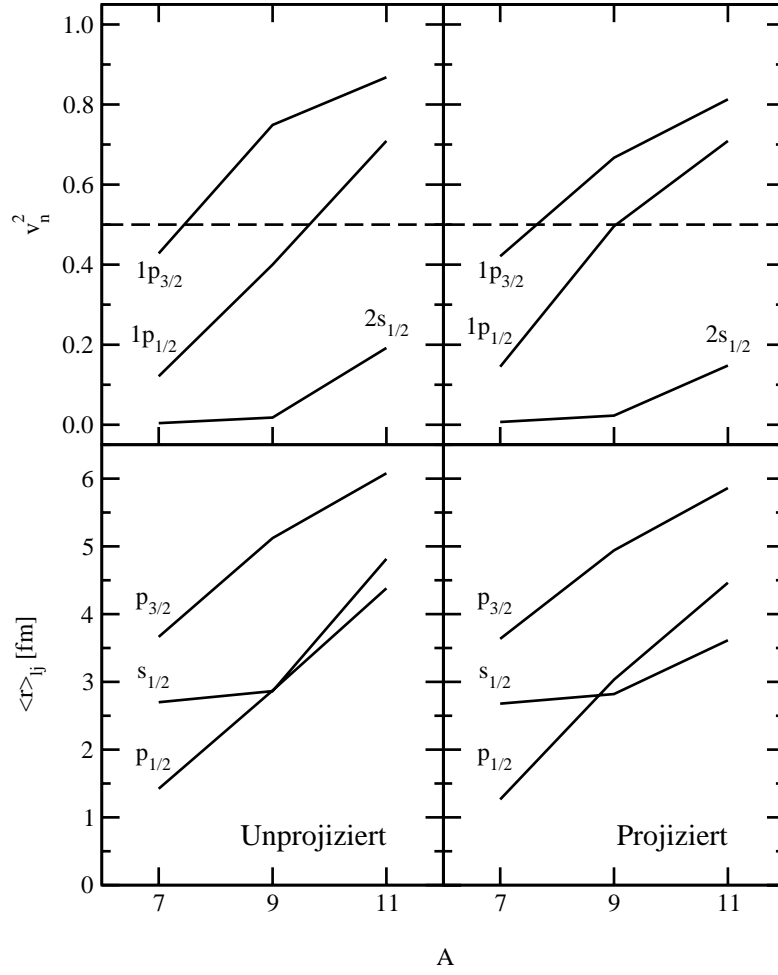


Abbildung 6.14: Beiträge der verschiedenen Spin-Parität-Kanäle zum Neutronenanteil des Kernradius bei den Lithium-Isotopen.

generalisierten Dichten gegeben durch:

$$\rho_{nn'}(\phi) = \frac{\langle \Phi | a_{n'}^+ a_n e^{i\phi \hat{N}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | e^{i\phi \hat{N}} | \Phi \rangle}, \quad (6.3a)$$

$$\kappa_{nn'}(\phi) = \frac{\langle \Phi | a_{n'} a_n e^{i\phi \hat{N}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | e^{i\phi \hat{N}} | \Phi \rangle}, \quad (6.3b)$$

$$-\bar{\kappa}_{nn'}^*(\phi) = \frac{\langle \Phi | a_{n'}^+ a_n^+ e^{i\phi \hat{N}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | e^{i\phi \hat{N}} | \Phi \rangle}. \quad (6.3c)$$

Obige Matrixelemente lassen sich leicht berechnen und man erhält folgende Ausdrücke für

die generalisierten Dichten [AER01]:

$$\rho_{nn'}(\phi) = \frac{v_n^2 e^{2i\phi}}{u_n^2 + v_n^2 e^{2i\phi}} \delta_{nn'} , \quad (6.4a)$$

$$\kappa_{n\bar{n}}(\phi) = \frac{u_n v_n e^{2i\phi}}{u_n^2 + v_n^2 e^{2i\phi}} , \quad (6.4b)$$

$$-\bar{\kappa}_{n\bar{n}}^*(\phi) = \frac{u_n v_n}{u_n^2 + v_n^2 e^{2i\phi}} . \quad (6.4c)$$

Aus den obigen Gleichungen ist es ersichtlich, daß die generalisierten Dichten divergieren, wenn $u_n = v_n$ und $\phi = \pi/2$. Insbesondere ist die projizierte Paarungsenergie gegeben durch

$$\begin{aligned} E_{\text{pair}}^N &= \frac{1}{4} \int d\phi y(\phi) \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} \bar{\kappa}_{n_1 n_2}^*(\phi) \bar{v}_{n_1 n_2 n_3 n_4} \kappa_{n_3 n_4}(\phi) \\ &= \frac{1}{4} \int d\phi y(\phi) \sum_{nn'>0} [\bar{v}_{n\bar{n}\bar{n}'n'} \bar{\kappa}_{\bar{n}\bar{n}}^*(\phi) \kappa_{\bar{n}'n'}(\phi) + \bar{v}_{n\bar{n}\bar{n}'n'} \bar{\kappa}_{n\bar{n}}^*(\phi) \kappa_{\bar{n}'n'}(\phi) \\ &\quad + \bar{v}_{n\bar{n}\bar{n}'\bar{n}'} \bar{\kappa}_{\bar{n}\bar{n}}^*(\phi) \kappa_{n'\bar{n}'}(\phi) + \bar{v}_{n\bar{n}\bar{n}'\bar{n}'} \bar{\kappa}_{n\bar{n}}^*(\phi) \kappa_{n'\bar{n}'}(\phi)] \\ &= \int d\phi y(\phi) \sum_{nn'>0} \bar{v}_{n\bar{n}\bar{n}'\bar{n}'} \bar{\kappa}_{n\bar{n}}^*(\phi) \kappa_{n'\bar{n}'}(\phi) . \end{aligned} \quad (6.5)$$

Für $n \neq n'$ beseitigt $y(\phi) \sim \langle \Phi | e^{i\phi \hat{N}} | \Phi \rangle = \prod_{n>0} (u_n^2 + v_n^2 e^{2i\phi})$ die Nullstellen im Nenner von $\kappa(\phi)$ und $\bar{\kappa}^*(\phi)$. Für $n = n'$ ist dagegen nur eine Nullstelle durch einen ähnlichen Faktor in $y(\phi)$ zu beseitigen. Der Beitrag dieses Terms zur Paarungsenergie lautet in diesem Fall

$$\begin{aligned} E_{\text{pair}}^N \Big|_{\text{Pol}} &= \int d\phi y(\phi) \sum_{n>0} \bar{v}_{n\bar{n}\bar{n}\bar{n}} \frac{u_n^2 v_n^2 e^{2i\phi}}{(u_n^2 + v_n^2 e^{2i\phi})^2} \\ &\propto \int d\phi \sum_{n>0} \bar{v}_{n\bar{n}\bar{n}\bar{n}} \frac{u_n^2 v_n^2 e^{2i\phi}}{u_n^2 + v_n^2 e^{2i\phi}} \prod_{m>0, m \neq n} (u_m^2 + v_m^2 e^{2i\phi}) \end{aligned} \quad (6.6)$$

und divergiert für $u_n = v_n$ und $\phi = \pi/2$.

Für schwerere Kerne ist der Beitrag des Bereiches $\phi \sim \pi/2$ zur Paarungsenergie aufgrund des Faktors $e^{-i\phi N}$ in der Gleichung (3.63) sehr gering, sodaß sich eventuelle Divergenzen nicht bemerkbar machen. Dies ist in Abbildung 6.15 ersichtlich, in der der Betrag der Funktion $x(\phi)$ (siehe Gleichung (3.63)) für drei in dieser Arbeit untersuchte Kernsysteme dargestellt wird. Wie ausgeprägt der Abfall dieser Funktion im Bereich $\phi \sim \pi/2$ ist, hängt zudem von der Stärke der Paarungskorrelationen ab. Insbesondere hängt die starke Absenkung der Kurve in keiner Weise mit Divergenzen zusammen. Nur in seltenem Fall, daß der Pol mit großer numerischer Genauigkeit getroffen wird, können also die Singularitäten zu Problemen führen, wie man später sehen wird. In Abbildung 6.16 wird die Paarungsenergie für dieselben Kerne der Abbildung 6.15 als Funktion der oberen Grenze des Integrationswinkels ϕ in Gleichung (6.5) getragen. Während für die schwereren Neon- und Zinn-Kerne der Bereich ab

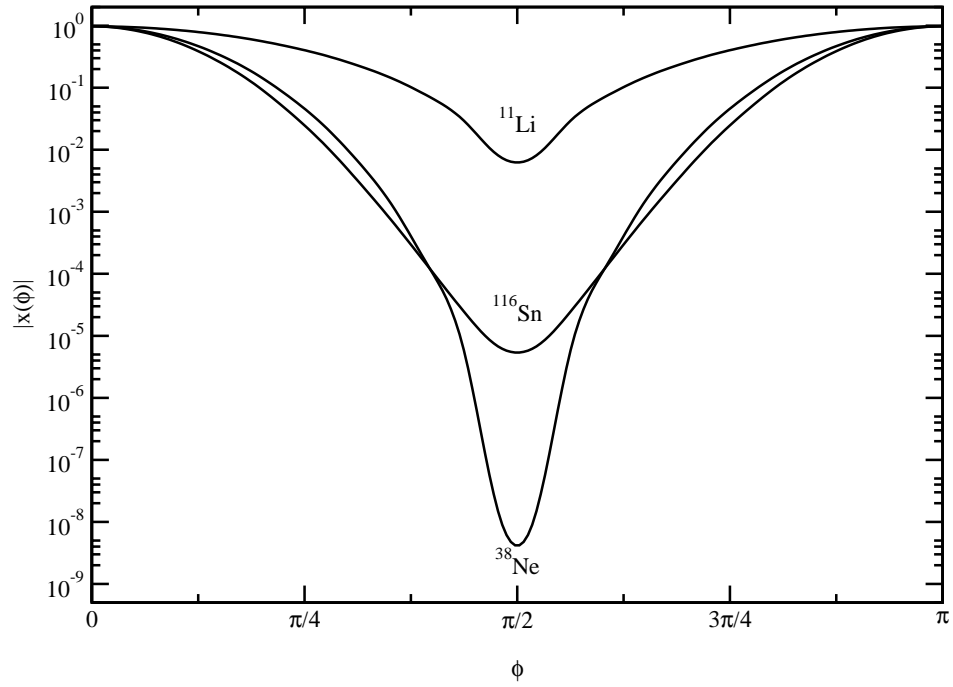


Abbildung 6.15: Betrag der Funktion $x(\phi)$ als Funktion des Eichwinkels ϕ aus PAV-Rechnungen für drei hier untersuchte Kernsysteme.

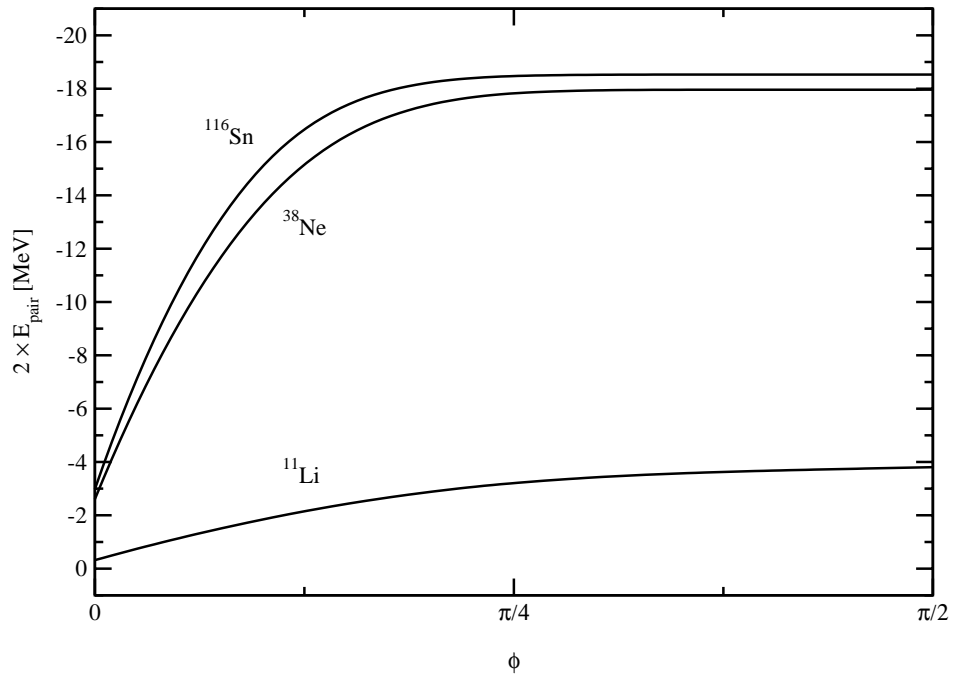


Abbildung 6.16: Projizierte Paarungsenergie als Funktion der oberen Grenze des Integrationswinkels ϕ . Da diese Funktion symmetrisch um $\pi/2$ ist, wird lediglich der Bereich $[0, \pi/2]$ dargestellt.

	^{11}Li			^{38}Ne			^{116}Sn		
	f_σ	$x(\pi/2)$	E_{pair}^N	f_σ	$x(\pi/2)$	E_{pair}^N	f_σ	$x(\pi/2)$	E_{pair}^N
G0	1.	$1.88 \cdot 10^{-2}$	-2.46	1.	$7.78 \cdot 10^{-4}$	-17.43	1.	$-2.83 \cdot 10^{-5}$	-17.12
G3	0.987	$-2.08 \cdot 10^{-4}$	-8.76	0.991	$8.26 \cdot 10^{-11}$	-16.21	0.994	$-3.70 \cdot 10^{-7}$	-18.99
G6	0.987110	$1.49 \cdot 10^{-7}$	6781.50	0.990767	$5.04 \cdot 10^{-23}$	-16.18	0.993566	$1.05 \cdot 10^{-19}$	-19.29
G8	0.98710992	$-2.22 \cdot 10^{-9}$	-454687.78	0.99076679	$2.33 \cdot 10^{-31}$	-16.18	0.99356603	$-3.63 \cdot 10^{-23}$	-19.29

Tabelle 6.1: Projizierte Paarungsenergie (in MeV) in der Nähe eines Pols für drei verschiedene Kernsysteme.

$\phi = \pi/4$ kaum zur Paarungsenergie beiträgt, ist die Kurve bei dem Lithium-Kern hingegen stets ansteigend.

Um ihren Effekt besser zu untersuchen, kann man explizit nach solchen Polen suchen. Durch Multiplikation des σ -Feldes mit einem Faktor f_σ kann das mittlere Potential beliebig verschoben werden, bis ein bestimmtes Niveau k eine Besetzungswahrscheinlichkeit $v_k^2 = 0.5$ aufweist und somit $u_k = v_k$ erfüllt. Bei einer selbstkonsistenten Lösung des Problems können jedoch die Divergenzen im Verlauf der Iterationen durch andere Effekte aufgehoben werden. Um die Auswirkung der Pole eindeutig zu isolieren, werden aus diesem Grund die Untersuchungen bei PAV-Berechnungen durchgeführt. Dabei erfolgt die Teilchenzahlprojektion erst nach Konvergenz der Hartree-Bogoliubov-Iteration. In Abbildung 6.17 wird der Betrag der Überlappfunktion $x(\phi)$ für drei hier untersuchte Kerne dargestellt, jeweils für drei Werte von f_σ , die den Pol mit steigender Genauigkeit darstellen. Die entsprechenden Zahlen sowie die Paarungsenergie dieser Konfigurationen sind in Tabelle 6.1 gefaßt. Erwartungsgemäß divergiert die Paarungsenergie für ^{11}Li , während die Variationen bei den schwereren Kernen eher auf die Verschiebung des σ -Potentials zurückzuführen sind. Abbildung 6.18 zeigt das Verhalten der Paarungsenergie für ^{11}Li in der Nähe des Pols. Man sieht deutlich, daß es sich dabei um einen extrem schmalen Pol handelt.

In praktischen Berechnungen kann der Effekt des Pols auch für leichtere Kerne vermieden werden, indem eine gerade Anzahl von Punkten in der Fomenko-Entwicklung (5.21) genommen und somit der Punkt $\phi = \pi/2$ vermieden wird. Allerdings löst dieses einfache Rezept das Problem nicht vollständig, denn bei einer höheren Anzahl von Stützstellen liegen die mittleren Integrationspunkte sehr nahe an kritischem Punkt $\phi = \pi/2$ und können dennoch zu Divergenzen in der Paarungsenergie führen. Eine Überprüfung der Konvergenz der Fomenko-Entwicklung bezüglich der Anzahl der Stützstellen ist besonderes für leichte Kerne notwendig.

Anguiano *et al.* [AER01] haben das Divergenzproblem im Rahmen teilchenzahlprojizierter Cranking-HFB-Rechnungen mit der endlich reichweitigen Gogny-Kraft eingehend untersucht. Sie stellen fest, daß solche Divergenzen durch die Vernachlässigung von Austausch-

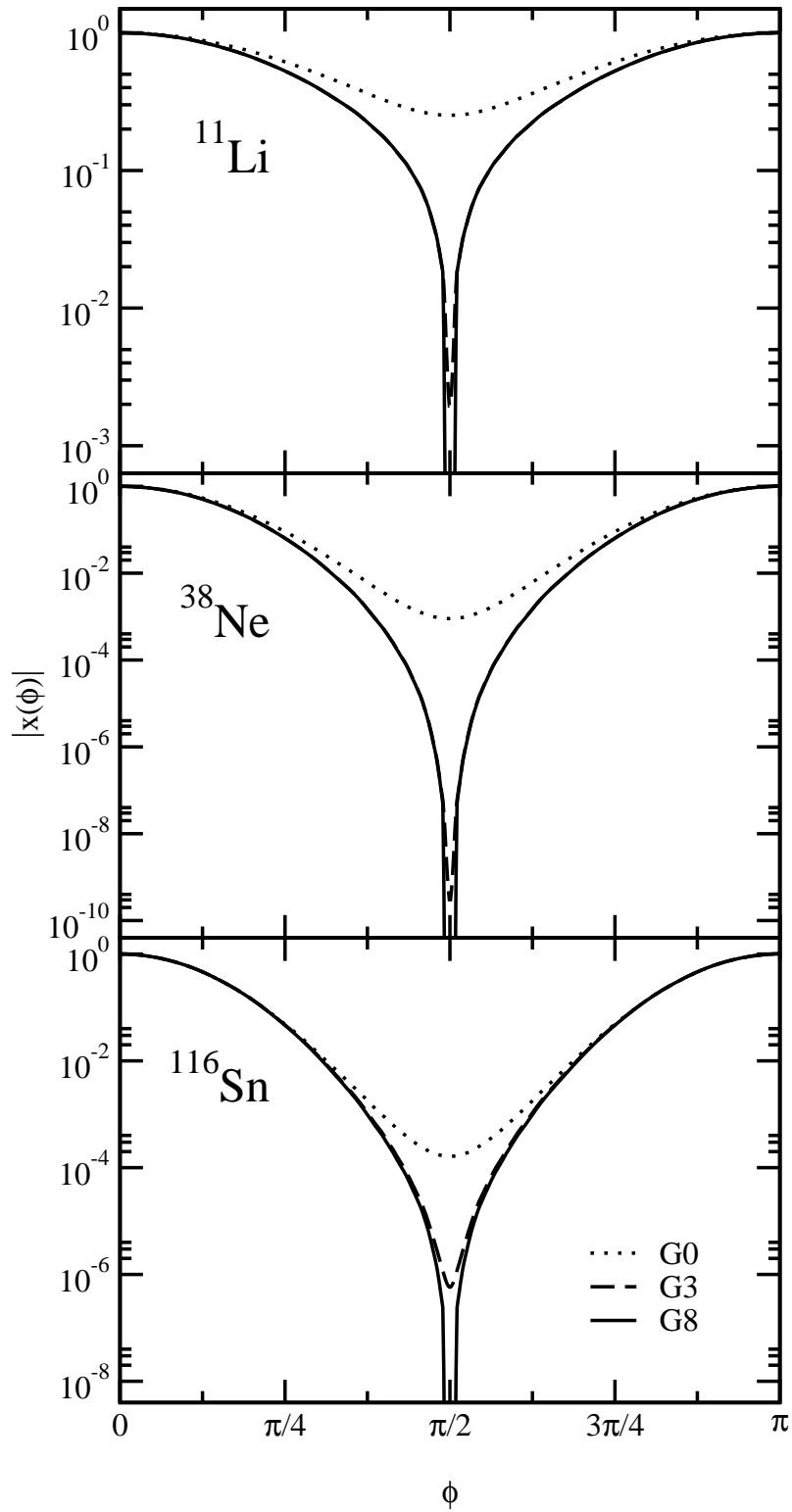


Abbildung 6.17: Betrag der Funktion $x(\phi)$ für ^{11}Li , ^{38}Ne und ^{116}Sn in der Nähe eines Pols. Hier entsprechen G0, G3 und G8 Werte von f_σ , die mit 0, 3 und 8 Nachkommastellen bestimmt wurden und somit den Pol mit steigender Genauigkeit darstellen.

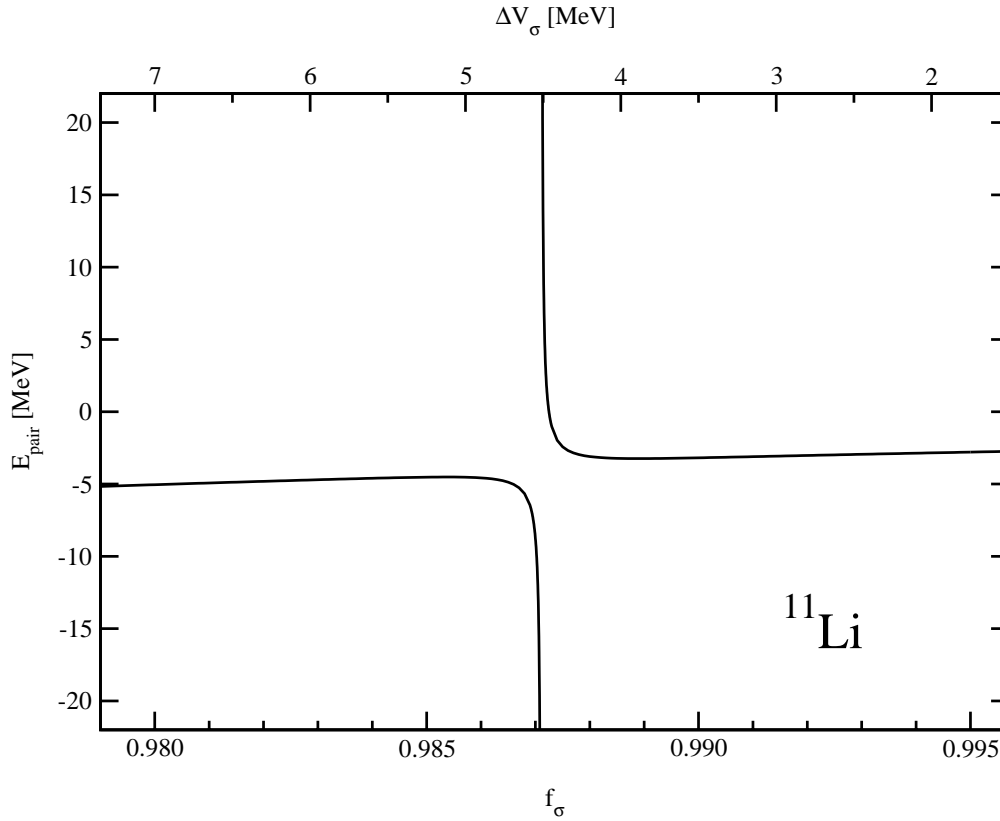


Abbildung 6.18: Neutronenpaarungsenergie für ^{11}Li als Funktion des Parameters f_σ in der Nähe eines Pols. Die obere Skala zeigt die entsprechende Verschiebung des σ -Potentials in MeV.

men hervorgerufen werden. Somit müßten im Prinzip alle Terme der Wechselwirkung in der Teilchenzahlprojektion berücksichtigt werden. Dies ist allerdings bei RMFT-Rechnungen, bei denen eine unterschiedliche Wechselwirkung im Teilchen–Teilchen-Kanal verwendet wird (siehe Kapitel 4), nicht möglich.

Interessanterweise stoßen die Autoren von Referenz [AER01] auch bei schwereren Kernen wie Chrom und Erbium auf Divergenzprobleme bei der Teilchenzahlprojektion. Dies widerspricht den hier dargestellten Ergebnissen. Eine Erklärung hierfür wäre ein möglicher zusätzlicher Effekt, der aus dem Zusammenspiel zwischen Rotation und Paarung resultiert. Desweiteren wird bei [AER01] das HFB-Problem durch direkte Minimierung der projizierten Energie gelöst. Bei der sogenannten Gradientenmethode [RS80] wird die Energieoberfläche in die Richtung des am stärksten abfallenden Gradienten abgesucht, bis ein Minimum erreicht ist. Im Fall eines Pols könnte diese Methode direkt zu einer divergierenden Lösung führen. In der vorliegenden Arbeit wird stattdessen die äquivalente Diagonalisationsaufgabe gelöst, wobei das Treffen eines Pols nur aus zufälligen Umständen resultieren kann.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zum ersten Mal teilchenzahlprojizierte relativistische Hartree–Bogoliubov–Gleichungen für endliche Kerne hergeleitet und gelöst. Ausgangspunkt hierfür war die Relativistische Mean–Field–Theorie (RMFT). Sie basiert auf einer lokalen, Lorentz–invarianten Lagrangedichte, die die Wechselwirkung von punktförmigen Dirac–Nukleonen durch den Austausch verschiedener Mesonen sowie des Photons beschreibt. Man schreibt die Energie des Systems als ein Funktional der Kerndichte, die Lösungen werden mittels Variation erhalten. Eine solche Dichtefunktionaltheorie war zuvor schon in der Festkörperphysik erfolgreich als Kohn–Sham–Theorie angewandt worden [KS65]. In der Kernphysik sind die nichtrelativistischen Skyrme– [Sky59] und Gognykräfte [DG80] weitere bekannte Beispiele. Durch den Euler–Lagrange–Formalismus ergeben sich als Bewegungsgleichungen die Diracgleichung für die Nukleonen und die Klein–Gordon–Gleichung für die Bosonen. Diese Gleichungen stellen ein gekoppeltes, nichtlineares Gleichungssystem dar. In der Mean–Field–Näherung werden die Bosonen durch klassische Felder beschrieben. Als Folge dessen ergibt sich, daß die Nukleonen ausschließlich durch die Mesonenfelder wechselwirken und sich somit frei in einem mittleren Potential bewegen. Als Dichtefunktionaltheorie enthält die Mean–Field–Theorie auf effektive Weise kompliziertere Korrelationen sowie Vielteilchen– und Vakuumpolarisationseffekte, die durch Anpassung der freien Parameter an experimentelle Daten auf phänomenologischem Niveau berücksichtigt werden.

Die RMFT wurde dann erweitert, um Paarungskorrelationen über den BCS–Formalismus hinaus berücksichtigen zu können. Dafür wurden die RMFT–Gleichungen zuerst durch die Einführung kanonischer Vertauschungsrelationen quantisiert. Nach Eliminierung der bosonischen Freiheitsgrade ist mit Hilfe der Gor’kov–Faktorisierung das relativistische Gegenstück zu den klassischen Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen entstanden, die sogenannten Dirac–Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen. Da eine quantitative Beschreibung von Paarungskorrelationen durch eine mesonische Wechselwirkung zur Zeit jedoch nicht möglich ist, wird im Paarungskanal die phänomenologische Gogny–Wechselwirkung eingesetzt.

Im Anschluß wurde eine Projektionsmethode entwickelt, mit deren Hilfe verletzte Symmetrien wiederhergestellt werden können. Insbesondere liegt das Interesse hier bei der Teilchenzahlsymmetrie, die bei der Ableitung der Dirac–Hartree–Fock–Bogoliubov–Gleichungen verletzt wurde. Das Ergebnis sind projizierte HFB–Gleichungen, die dieselbe algebraische

Struktur ihrer unprojizierten Kontrahenten aufweisen und sich somit durch dieselben bewährten numerischen Techniken behandeln lassen. Lediglich die Ausdrücke für das Hartree–Fock–Potential und das Paarungsfeld sind dabei aufwendiger.

Die RMFT–Gleichungen werden schließlich durch Entwicklung in einer Oszillatorbasis selbstkonsistent gelöst. Beabsichtigt man allerdings Halo–Kerne zu untersuchen, stößt man bei dieser Lösungsmethode auf Konvergenzprobleme. Eine große Anzahl von Schalen muß berücksichtigt werden, um die schwachabfallenden Nukleonverteilungen solcher Kerne beschreiben zu können. Um dieses Problem zu umgehen, wurden die Oszillatorbasisfunktionen mittels einer lokalen Skalierungstransformation so modifiziert, daß sie nun das gewünschte asymptotische Verhalten aufweisen.

Mit diesen Erweiterungen war es dann möglich, teilchenzahlprojizierte relativistische Untersuchungen exotischer Kerne im Rahmen der RMFT durchzuführen. Bei allen untersuchten Kernen führt die Teilchenzahlprojektion zu einer stärkeren Bindung, was auf eine bessere Beschreibung dieser Kernsysteme schließen läßt. Zusätzliche Korrelationen, die im Rahmen der teilchenzahlprojizierten Wellenfunktionen erfaßt werden, haben außerdem eine tiefere Paarungsenergie zur Folge. Insbesondere ergaben teilchenzahlprojizierte Berechnungen auch für Kerne mit abgeschlossener Hauptschale von Null verschiedene Paarungskorrelationen. Dies steht im Gegensatz zu reinen HFB–Rechnungen, bei denen in solchen Fällen die Paarung zusammenbricht.

Bei den neutronenreichen Zinn–Isotopen war die Bildung von Neutronenhäuten zu beobachten. Dabei konnte keine durch die Teilchenzahlprojektion bedingte Änderung festgestellt werden. Intuitiv ist es in der Tat zu erwarten, daß die Teilchenzahlprojektion bei der Beschreibung solcher schweren Systemen keine nennenswerte Rolle spielt.

Der Prozeß, der zur Halo–Bildung in leichten Kernen führt, wurde mikroskopisch untersucht, auch unter Berücksichtigung der Teilchenzahlprojektion. Bei den Neon–Kernen entsteht der Halo durch die näherungsweise Entartung der Niveaus $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ und $1f_{7/2}$ nahe an der Fermi–Kante. Diese Lage blieb im ganzen nach Teilchenzahlprojektion unverändert. Bei ^{32}Ne verursacht sie ein eindeutiges Absenken der Neutronendichte und führt somit zu einem stetigen Übergang von dem kompakten Kern ^{30}Ne zu den Halo–Kernen $^{32-40}\text{Ne}$.

Im Kern ^{11}Li führen die unprojizierten Rechnungen zu dem Ergebnis, daß ein Halo auftritt. Er ist allerdings nicht so ausgeprägt wie bei den Ortsraumberechnungen mit δ –Kraft in [MR96]. Der Halo in diesem Kern entsteht durch ein komplexes Zusammenspiel zwischen Mittelfeld und Paarungskorrelationen, wobei das Niveau $2s_{1/2}$ die entscheidende Rolle spielt. Nach der Teilchenzahlprojektion führen die Änderungen im Mittelfeld dazu, daß die Energie dieses Zustandes leicht nach oben verschoben wird. Trotz erhöhter Paarung kann das Niveau $2s_{1/2}$ im projizierten Fall nicht stark genug besetzt werden. Als Folge dessen senkt sein Beitrag zum Kernradius und somit der Gesamtradius von ^{11}Li nach der Teilchenzahlprojektion.

Während die Teilchenzahlprojektion qualitativ zu einer physikalisch besseren Beschreibung

der hier untersuchten Kernsysteme führt, sind ihre Ergebnisse generell, wenn von den unprojizierten Werten unterschiedlich, nicht in guter Übereinstimmung mit den Experimenten. Dies hat seine Ursache darin, daß die Anpassung der freien Parameter der Theorie an experimentelle Daten ausschließlich mittels unprojizierten Rechnungen erfolgte. In praktischen Anwendungen kann dieses Problem umgangen werden, indem durch die Teilchenzahlprojektion hervorgebrachte Beiträge, die offensichtlich mit keinem neuen physikalischen Inhalt zusammenhängen, abgezogen werden. Dies kann beispielsweise durch Anpassung der Paarungskraft bei projizierten Berechnungen bewerkstelligt werden.

Das Divergenzproblem bei der Teilchenzahlprojektion wurde diskutiert. Dies hat seine Ursache in einer Singularität der projizierten Zweiteilchenmatrixelemente bei einem Integrationswinkel gleich $\pi/2$. Solche Divergenzen treten immer auf, wenn zwei Einteilchenniveaus gleichzeitig eine Besetzungswahrscheinlichkeit $v^2 = 0.5$ aufweisen. Dies kann erhebliche Folgen zur teilchenzahlprojizierten Beschreibung von Halo-Kernen haben, denn die näherungsweise Entartung zweier oder mehrerer Einteilchenniveaus nahe an der Fermi-Kante ist eine wesentliche Voraussetzung für die Entstehung von Halos. Dieses Problem ist jedoch nur bei sehr leichten Kernen von Bedeutung, da die divergierenden Terme exponentiell mit der Teilchenzahl absinken. Aber auch für leichte Kerne kann der Effekt des Pols stark vermindert werden, indem man die Integrationsstützstellen geeignet wählt.

Eine interessante zukünftige Anwendung der in dieser Arbeit vorgestellten Projektionsmethode wäre ihr Einsatz bei der Beschreibung von rotierenden Kernen, insbesondere im Bereich des durch den Paarungszusammenbruch bedingten Phasenübergangs bei hohen Drehimpulsen. Es ist seit langem bekannt, daß hier Teilchenzahlprojektion notwendig ist [ER82]. Es wird aber meist die Lipkin–Nogami–Näherung benutzt, die das Variationsprinzip verletzt [FO97]. Desweiteren kann die Methode auch für die Drehimpulsprojektion, zunächst für den Fall axialer Symmetrie, angewandt werden.

Für vorhersagefähige realistische Untersuchungen von Halo-Kernen wäre die Entwicklung einer geeigneten numerischen Methode wichtig, die eine Lösung des Hartree–Bogoliubov-Problems auch unter Verwendung von teilchenzahlprojizierten Potentialen in der Praxis erlaubt. Die in dieser Arbeit verwendete Methode der Entwicklung der Wellenfunktionen in einer LST-Basis hat den Nachteil eines zusätzlichen Parameters, der für jeden Kern neu angepaßt werden muß. Dies vermindert die Vorhersagekraft der Berechnungen. Der Einsatz einer in [NS02] vorgestellten Kamimura–Gauß-Basis birgt das gleiche Problem. Zur Lösung der DHB-Gleichungen im Ortsraum bietet sich die Methode der Finiten Elemente an. Der Einsatz von teilchenzahlprojizierten Potentialen führt jedoch zu vollbesetzten Steifigkeitsmatrizen, was die Verwendung dieser Methode für die Lösung des projizierten Problems nicht praktikabel macht.

Ein weiterer bedeutender Punkt wäre die Untersuchung realistischer Mesonenaustauschpotentiale zur Beschreibung von Paarung im Rahmen einer relativistischen Theorie. Serra hat

sich in [Ser01] mit diesem Thema beschäftigt und gute Ergebnisse für die Kernmaterie erhalten können. Es wäre sicherlich aufschlußreich zu untersuchen, inwiefern sich die gewonnenen Kenntnisse über die Paarwechselwirkung in Kernmaterie auf endliche Kerne übertragen lassen.

Literaturverzeichnis

- [AER01] M. Anguiano, J. L. Egido, L. M. Robledo. Particle Number Projection with Effective Forces. Nucl. Phys. **A696** (2001) 467
- [AW95] G. Audi, A. H. Wapstra. The 1995 Update to the Atomic Mass Evaluation. Nucl. Phys. **A595** (1995) 409
- [BBD95] J. P. Blaizot, J. F. Berger, J. Dechargé, M. Girod. Microscopic and Macroscopic Determinations of Nuclear Compressibility. Nucl. Phys. **A591** (1995) 435
- [BB77] J. Boguta, A. R. Bodmer. Relativistic Calculation of Nuclear Matter and the Nuclear Surface. Nucl. Phys. **A292** (1977) 413
- [Bod91] A. R. Bodmer. Relativistic Mean Field Theory of Nuclei with a Vector Meson Self-Interaction. Nucl. Phys. **A526** (1991) 703
- [BT92] R. Brockmann, H. Toki. Relativistic Density-Dependent Hartree Approach for Finite Nuclei. Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 3408
- [CCD70] F. Coester, S. Cohen, B. Day, C. M. Vincent. Variation in Nuclear-Matter Binding Energies with Phase-Shift-Equivalent Two-Body Potentials. Phys. Rev. **C1** (1970) 769
- [DG80] J. Dechargé, D. Gogny. Hartree-Fock-Bogoliubov Calculations with the D1 Effective Interaction on Spherical Nuclei. Phys. Rev. **C21** (1980) 1568
- [DMP64] K. Dietrich, H. J. Mang, J. H. Pradal. Conservation of Particle Number in the Nuclear Pairing Model. Phys. Rev. **B135** (1964) 22
- [DP97] K. Dietrich, K. Pomorski. On the Shell Structure of Nuclear Bubbles. Nucl. Phys. **A627** (1997) 175
- [ER82] J. L. Egido, P. Ring. Symmetry Conserving HFB-Theory (II). Nucl. Phys. **A388** (1982) 19
- [ER93] J. L. Egido, L. M. Robledo. High-Spin States in Heavy Nuclei with the Density Dependent Gogny Force. Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 2876

- [FO97] H. Flocard, N. Onishi. On the Restoration of Symmetry in Paired Fermion Systems. *Ann. Phys. (N.Y.)* **254** (1997) 275
- [Fom70] V. N. Fomenko. Projection in the Occupation–Number Space and the Canonical Transformation. *J. Phys. (GB)* **A3** (1970) 8
- [GDB94] M. Girod, J. P. Delaroche, J. F. Berger, J. Libert. Self–Consistent Cranking Hartree–Fock–Bogoliubov Description of Superdeformed Rotational States in ^{194}Hg with the Gogny Force. *Phys. Lett. B* **325** (1994) 1
- [GEL96] T. Gonzalez–Llarena, J. L. Egido, G. A. Lalazissis, P. Ring. Relativistic Hartree–Bogoliubov Calculations with Finite Range Pairing Forces. *Phys. Lett. B* **379** (1996) 13
- [Gor58] L. P. Gor’kov. On the Energy Spectrum of Superconductors. *Sov. Phys. JETP* **34** (1958) 505
- [GRT90] Y. K. Gambhir, P. Ring, A. Thimet. Relativistic Mean Field Theory for Finite Nuclei. *Ann. Phys. (N.Y.)* **198** (1990) 132
- [IZ80] C. Itzykson, J.–B. Zuber. *Quantum Field Theory*, McGraw–Hill, New York 1980
- [KR91] H. Kucharek, P. Ring. Relativistic Field Theory of Superfluidity in Nuclei. *Z. Phys.* **A339** (1991) 23
- [Kra99] A. Krasznahorkay *et al.* Excitation of Isovector Spin–Dipole Resonances and Neutron Skin of Nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 3216
- [KS65] W. Kohn, L. J. Sham. Quantum Density Oscillations in an Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* **137** (1965) 1697
- [Kuc89] H. Kucharek. Relativistische Feldtheorie Supraleitender Kerne. Dissertation, TU München 1989
- [Lac80] M. Lacombe *et al.* Parametrization of the Paris N–N Potential. *Phys. Rev.* **C21** (1980) 861
- [Lee86] S.–J. Lee *et al.* Relativistic Hartree Calculations for Axially Deformed Nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 2916
- [LKR97] G. A. Lalazissis, J. König, P. Ring. New Parametrization for the Lagrangian Density of Relativistic Mean Field Theory. *Phys. Rev.* **C55** (1997) 540
- [LVR98] G. A. Lalazissis, D. Vretenar, P. Ring. Relativistic Hartree–Bogoliubov Description of Ground–State Properties of Ni and Sn Isotopes. *Phys. Rev.* **C57** (1998) 2294
- [MĆD93] P. Magierski, S. Ćwiok, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz. Approximate Particle Number Projection for Rotating Nuclei. *Phys. Rev.* **C48** (1993) 1686

- [MHE87] R. Machleidt, K. Holinde, C. Elster. The Bonn Meson Exchange Model for the Nucleon–Nucleon Interaction. *Phys. Rept.* **149** (1987) 1
- [MR96] J. Meng, P. Ring. Relativistic Hartree–Bogoliubov Description of the Neutron Halo in ^{11}Li . *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3963
- [NRC87] R. S. Nikam, P. Ring, L. F. Canto. A Nuclear Squid: Diaboloic Pair Transfer in Rotating Nuclei. *Phys. Lett. B* **185** (1987) 269
- [NS02] H. Nakada, M. Sato. A Method of Implementing Hartree–Fock Calculations with Zero– and Finite–Range Interactions. *Nucl. Phys.* **A699** (2002) 511
- [NuP00] R. Bennett *et al.* (The NuPECC Working Group on Radioactive Nuclear Beams Facilities). *Radioactive Nuclear Beams Facilities*, NuPECC, April 2000.
- [PFT86] W. A. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling. *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, 1986
- [PVL97] W. Pöschl, D. Vretenar, G. A. Lalazissis, P. Ring. Relativistic Hartree–Bogoliubov Theory with Finite Range Pairing Forces in Coordinate Space: Neutron Halo in Light Nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 3841
- [PVR97] W. Pöschl, D. Vretenar, P. Ring. Relativistic Hartree–Bogoliubov Theory in Coordinate Space: Finite Element Solution for a Nuclear System with Spherical Symmetry. *Comput. Phys. Commun.* **103** (1997) 217
- [Rin96] P. Ring. Relativistic Mean Field Theory in Finite Nuclei. *Prog. Part. Nucl. Phys.* **37** (1996) 193
- [RS80] P. Ring, P. Schuck. *The Nuclear Many–Body Problem*, Springer–Verlag, Berlin 1980
- [SAF00] M. M. Sharma, A. R. Farhan, S. Mythili. Shell Effects in Nuclei with Vector Self–Coupling of the ω Meson in the Relativistic Hartree–Bogoliubov Theory. *Phys. Rev.* **C61** (2000) 054306
- [Sag92] H. Sagawa. Density Distribution of Halo Nuclei. *Phys. Lett. B* **286** (1992) 7
- [Ser92] B. D. Serot. Quantum Hadrodynamics. *Rep. Prog. Phys.* **55** (1992) 1855
- [Ser01] M. Serra. Field Theoretical Description of Exchange Terms and Pairing Correlations in Nuclear Systems. Dissertation, TU München 2001
- [Sky59] T. H. R. Skyrme. The Effective Nuclear Potential. *Nucl. Phys.* **9** (1959) 615
- [SLR01] J. A. Sheikh, E. Lopes, P. Ring. On the Solution of the Number–Projected Hartree–Fock–Bogoliubov Equations. *Phys. Atom. Nucl.* **64** (2001) 531
- [SNP98] M. V. Stoitsov, W. Nazarewicz, S. Pittel. New Discrete Basis for Nuclear Structure Studies. *Phys. Rev.* **C58** (1998) 2092

- [SR00] J. A. Sheikh, P. Ring. Symmetry–Projected Hartree–Fock–Bogoliubov Equations. Nucl. Phys. **A665** (2000) 71
- [SRV98] M. V. Stoitsov, P. Ring, D. Vretenar, G. A. Lalazissis. Solution of Relativistic Hartree–Fock–Bogoliubov Equations in Configurational Representation: Spherical Neutron Halo Nuclei. Phys. Rev. **C58** (1998) 2092
- [ST94] Y. Sugahara, H. Toki. Relativistic Mean–Field Theory for Unstable Nuclei with Non-Linear σ and ω Terms. Nucl. Phys. **A579** (1994) 557
- [SW86] B. D. Serot, J. D. Walecka. The Relativistic Nuclear Many–Body Problem. Adv. Nucl. Phys. **16** (1986) 1
- [Tan85] I. Tanihata *et al.* Measurements of Interaction Cross Sections and Nuclear Radii in the Light p–Shell Region. Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 2676
- [Tan88] I. Tanihata *et al.* Measurement of Interaction Cross Sections using Isotope Beams of Be and B and Isospin Dependence of the Nuclear Radii. Phys. Lett. **B206** (1988) 592
- [Trz01] A. Trzcińska *et al.* Neutron Density Distributions Deduced from Antiprotonic Atoms. Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 082501
- [TWH98] J. Terasaki, R. Wyss, P.–H. Heenen. Onset of $T = 0$ Pairing and Deformations in High Spin States of the $N = Z$ Nucleus ^{48}Cr . Phys. Lett. **B437** (1998) 1
- [Val61] J. G. Valatin. Generalized Hartree–Fock Method. Phys. Rev. **122** (1961) 1012
- [VER96] A. Valor, J. L. Egido, R. Robledo. Approximate Particle Number Projection for Finite Range Density Dependent Forces. Phys. Rev. **C53** (1996) 172
- [VJV87] H. de Vries, C. W. de Jager, C. de Vries. Nuclear Charge–Density–Distribution Parameters from Elastic Electron Scattering. At. Data Nucl. Data Tables **36** (1987) 495
- [WS01] R. Wyss, W. Satula. Rotating $N = Z$ Nuclei – A Probe to the $t = 0$ and $t = 1$ Pairing Correlations. Acta Phys. Pol. **B32** (2001) 2457
- [WSA84] R. B. Wiringa, R. A. Smith, T. L. Ainsworth. Nucleon–Nucleon Potentials with and without $\Delta(1232)$ Degrees of Freedom. Phys. Rev. **C53** (1996) 172