



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG

Institut für Kernphysik

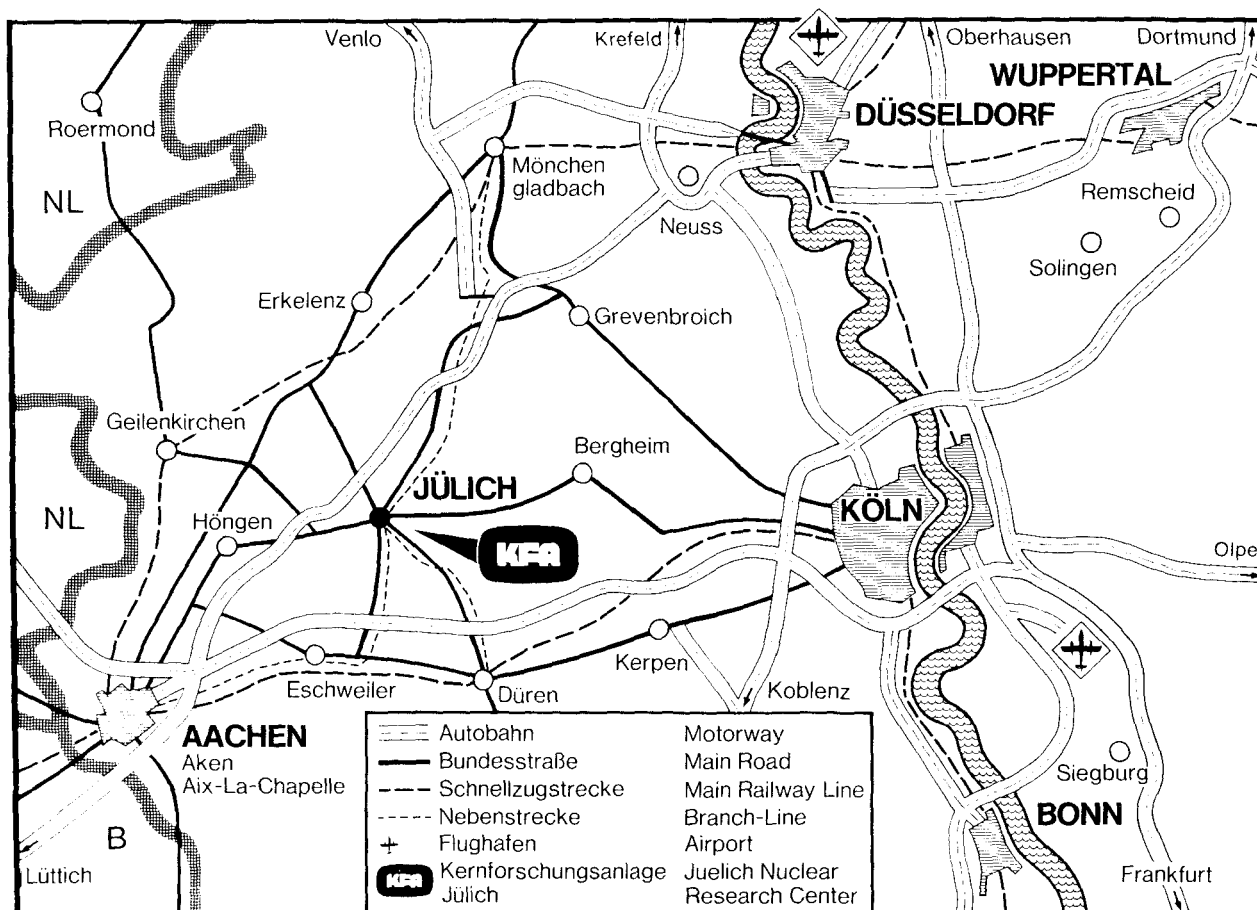
**Mikroskopische und selbstkonsistente
Beschreibung von Kerneigenschaften
im Rahmen einer
erweiterten Generatorkoordinatenmethode**

von

M. Didong

Jül - 1265
Januar 1976

Als Manuskript gedruckt



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 1265

Institut für Kernphysik Jül - 1265

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

**Mikroskopische und selbstkonsistente
Beschreibung von Kerneigenschaften
im Rahmen einer
erweiterten Generatorkoordinatenmethode**

von

M. Didong

V o r w o r t

Die vorliegende Arbeit verdankt ihr Zustandekommen der Anregung und Förderung durch Herrn Prof. Dr. A. Fäßler. Mein besonderer Dank gilt den Herren Dr. H. Müther und Dr. K. Goeke, durch deren Zusammenarbeit die Ausführung dieser Arbeit wesentlich erleichtert wurde. Die umfangreichen numerischen Rechnungen wurden mir durch die hervorragende Arbeit des Rechenzentrums der Kernforschungsanlage Jülich, sowie nützliche Hinweise von Herrn E. Brökel, ermöglicht. Mein herzlicher Dank gilt außerdem Frau D. Krüger für ihre Geduld und Sorgfalt beim Abfassen des Manuskripts.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Einleitung	1
<u>Kapitel I</u>	
EGCM, die erweiterte Generatorkoordinatenmethode	9
EGCM-Wellenfunktion und Lösungsverfahren	10
<u>Kapitel II</u>	
"Constrained Hartree-Fock-Bogoliubov" Theorie	19
1. Hartree-Fock-Bogoliubov Theorie (HFB)	20
2. Angeregte HFB-Zustände	24
<u>Kapitel III</u>	
Projektion: Symmetrien und Überlappe	27
1. Teilchenzahlprojektion	28
2. Drehimpulsprojektion	30
3. Überlappe	30
<u>Kapitel IV</u>	
Numerik	35
Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung	36
<u>Kapitel V</u>	
Diskussion der Resultate	39
1. ^{72}Ge	40
2. ^{70}Zn	49
3. ^{74}Ge	53
4. BE2-Werte	56
<u>Kapitel VI</u>	
Zusammenfassung	59
Referenzen	63
Figurenbeschreibung	67
Tabellenbeschreibung	71
Figuren	72
Tabellen	82

Einleitung

Aus vielen Experimenten ist bekannt, daß die Atomkerne aus Nukleonen aufgebaut sind, die durch starke Kräfte zusammengehalten werden. Die exakte Beschreibung des Kerns erfordert die Lösung der Schroedingergleichung für alle untereinander wechselwirkenden Teilchen. Ein solches n -Teilchenproblem ist jedoch im allgemeinen unlösbar. Deshalb ist man gezwungen, aus dem exakten n -Teilchen-Hamiltonoperator der Schroedingergleichung einen lösbaren Teil zu extrahieren und die Restwechselwirkung zu vernachlässigen oder störungstheoretisch zu behandeln.

Im Rahmen einer solchen Näherung beruht das Schalenmodell (SM)¹⁻⁴⁾ darauf, daß die Nukleonen des Kerns als ein System unabhängiger Teilchen angesehen werden, deren Energieniveaus in einer den Elektronen analogen Schalenstruktur angeordnet sind. Die Nukleonen werden auf die verschiedenen Einteilchenniveaus der Schalen verteilt und die entsprechende n -Teilchenwellenfunktion wegen der Fermioneneigenschaften von Nukleonen antisymmetrisiert. In diesem voll mikroskopischen Ansatz können durch Hinzunahme von Ein- oder Mehr-Teilchen-Loch-Anregungen, die zu einem vorgegebenen Spin koppeln, sämtliche Anregungsmechanismen beschrieben werden.

Wegen der unendlichen Dimension des Hilbertraumes und der damit verbundenen unendlichen Anzahl von Einteilchen-Niveaus ist das Schalenmodell numerisch nur dann lösbar, wenn der Hilbertraum auf einen dem betrachteten Problem angemessenen Teilraum reduziert wird. Dazu spaltet man vom Gesamtkern einen "inert core" ab und betrachtet bei der Diagonalisierung des Hamiltonoperators nur die übrigbleibenden Valenznukleonen in der Nähe der Fermikante. Um

den Einfluß des "Cores" auf die restlichen Nukleonen gering zu halten, beschränkt man sich zur Beschreibung kleiner Anregungsenergien meist auf Massenbereiche in der Umgebung magischer Kerne, weil einerseits der als "Core" abgespaltene magische Kern wegen seiner hohen Bindungsenergie besonders stabil ist, andererseits aber nur wenige freie Nukleonen übrigbleiben, so daß die Zahl und Dimension der die Wellenfunktion aufbauenden Slaterdeterminanten nicht allzu groß wird.

In der praktischen Anwendung hat sich dieses Konzept bis zur s-d-Schale bewährt, weil hier nur relativ wenige Nukleonen in Betracht gezogen werden müssen. Aber selbst dann sind Dimensionen der Hamiltonmatrix bis zu einigen tausend Einheiten keine Seltenheit. Zur Beschreibung schwerer Kerne ist das Schalenmodell im allgemeinen nicht mehr geeignet, da beim Übergang zu höheren Schalen die Teilchenniveau-Dichte derart zunimmt, daß selbst unter den oben angeführten Einschränkungen der Rechenaufwand nicht in vernünftigen Grenzen gehalten werden kann, ohne daß man willkürlich Art und Anzahl der Konfigurationen beschränkt. (Truncation scheme). Der Anwendung des Schalenmodells sind also numerisch bedingte Grenzen gesetzt. Es ist erforderlich, nach anderen mikroskopischen Modellen zu suchen, die auch dann, wenn das Schalenmodell zu große numerische Schwierigkeiten macht, noch einen Anwendungsbereich finden.

Es zeigt sich, daß man sich bei der Suche nach neuen Modellen gerade die phänomenologischen kollektiven Theorien, die sich über die ganze Nuklidkarte hin bei vielen Kernen bestens bewährt haben, zu Nutze machen kann. Diese phänomenologischen Modelle beschreiben unter Zuhilfenahme kollektiver Variablen solche Kern-

eigenschaften, an denen die Nukleonen kohärent beteiligt sind. Diese kohärente Bewegung drückt sich aus in großen Übergangswahrscheinlichkeiten, die durch inkohärente Einteilchen-Anregungen nicht mehr erklärt werden können.

Im Tröpfchenmodell^{2,3,5,6)} stellt man sich den Kern als einen homogenen strukturlosen Tropfen vor, der durch äußere Einwirkungen leicht verformt werden kann und zu Vibrationen angeregt wird. Diese Vibrationen werden durch kollektive Variablen beschrieben, welche in den bei deformierten Kernen winkelabhängigen Radius eingehen.

Kerne mit einer stabilen Gleichgewichtsdeformation drehen sich um eine vorgegebene Drehachse; sie weisen eine ausgeprägte Rotationsbande auf, die dem $J(J+1)$ -Gesetz gehorcht. Diese Banden werden durch das Rotationsmodell^{2,3,5,6,7)} erklärt.

Der Erfolg der phänomenologischen Modelle legt es nahe, mikroskopische Modelle zu konstruieren, die explizit die kollektiven Effekte miteinbeziehen.

In eine Klasse von Modellen, bei denen die kollektive Schroedingergleichung entlang eines mikroskopischen Weges aufgestellt wird, sind z.B. das selbstkonsistente "Cranking"-Modell, sowie das Adiabatische "Time Dependent" Hartree-Fock (ATDHF) einzuordnen.

Bezüglich des "Cranking"-Modells⁵⁾ hat Thouless (1960) mit Hilfe eines Variationsprinzips, bei dem die verwendeten selbstkonsistenten Wellenfunktionen über den Lagrangemultiplikator ω einen festvorgegebenen, kleinen mittleren Drehimpuls besitzen, einen Ausdruck für das Trägheitsmoment von Kernen hergeleitet. Die bei einer Rotation wegen der Corioliskraft und Zentrifugalstreckung bedingte Änderung des Potentials wird dabei in selbstkonsistenter Weise be-

rücksichtigt. Unter Vernachlässigung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung geht die Thouless-Formel in die von Inglis störungstheoretisch ermittelte Cranking-Formel^{2,3,5,7)} über.

Im adiabatischen "Time Dependent" Hartree Fock (ATDHF)⁸⁾ wird eine zeitabhängige Slaterdeterminante vorausgesetzt, die über die kollektiven Variablen β parametrisiert ist. Mit diesen Parametern wird eine klassische Bewegungsgleichung für die β hergeleitet und die Energie quantisiert.

Andere Modelle, welche die kollektive Bewegung in einer voll mikroskopischen Schroedingergleichung beschreiben, sind z.B. das zeitabhängige Hartree Fock (TDHF) und die "Resonating Group Method" (RGM).

Das TDHF^{5,9)} macht das Kernpotential zeitabhängig und man erhält im Falle kleiner harmonischer Vibrationen die RPA-Gleichungen. Bei Berücksichtigung von selbstkonsistenten Wellenfunktionen, die sich in einem rotierenden Bezugssystem befinden, kann die Thouless-Formel⁵⁾ für das Trägheitsmoment hergeleitet werden (Thouless-Valatin).

In der RGM¹⁰⁾ wird dem Kern eine molekülähnliche Struktur zugesprochen; die Nukleonen innerhalb eines "Molekülclusters" werden durch ihre Einteilchenkoordinaten relativ zum Clustermassenzentrum beschrieben, die Cluster selbst können sich als kollektive Einheit gegeneinander bewegen. Für die Kernstruktur ist die RGM vor allem im Bereich kleiner Anregungsenergien anwendbar, da bei zu großen Energien die Clusterverbände aufbrechen würden, eine Erscheinung, die sich die Kernreaktionstheorie zu Nutze macht. Wegen der zu antisymmetrisierenden Wellenfunktionen wird die RGM, ähnlich dem SM, vor allem auf leichte Kerne angewendet. Beim Über-

gang zu schwereren Kernen stellt sich neben einem erhöhten Rechenaufwand die Frage der Eindeutigkeit bei der Auswahl der Cluster.

Unter die oben beschriebenen voll mikroskopischen Verfahren ist ebenfalls die von Hill und Wheeler eingeführte Generatorkoordinaten-Methode (GCM)^{10,11,12)} einzureihen, die in dieser Arbeit verwendet wird. GCM ist eine Methode, welche die Kerneigenschaften, ausgehend von einem Vielteilchenhamiltonoperator, voll mikroskopisch, aber ohne Verlust phänomenologischer Anschaulichkeit beschreibt. Sie geht davon aus, daß kollektive Kerneigenschaften, wie z.B. die Deformation des Potentials, die Orientierung des Kerns, seine räumliche Lage oder auch Paarungsenergien durch äußere Parameter β festgelegt werden können. Eine Änderung der Parameter hat eine Änderung der Kerneigenschaften zur Folge. Das Ziel ist, durch Überlagerung von Wellenfunktionen mit verschiedenen Werten der Generatorkoordinaten β kollektive Freiheitsgrade mit einer mikroskopischen Wellenfunktion zu beschreiben, d.h. eine kollektive Bewegung zu erzeugen. Dabei bleibt zu beachten, daß im Gegensatz zu den phänomenologischen oder halbmikroskopischen Verfahren keine überzähligen kollektiven Variablen benötigt werden.

Der allgemeine Ansatz der GCM-Wellenfunktion $|\Psi(x)\rangle$ hat also die Gestalt:

$$|\Psi(x)\rangle = \int d\beta f(\beta) |\phi(\beta, x)\rangle \quad (1)$$

Die von β abhängige Funktion $|\phi(\beta, x)\rangle$ ist eine Basiswellenfunktion des GCM-Hilbertraumes, die ebenfalls von β abhängige Gewichtsfunktion $f(\beta)$ wird durch Minimisierung der Gesamtenergie ermittelt.

Abgesehen von der Drehimpulsprojektion^{7,10,13)} (Peierls, Joccoz), die für die Beschreibung von Rotationen als eine spezielle Anwendung der GCM verstanden wird, hat sich die GCM bei der Beschreibung von rotations- und vibrationsähnlichen Anregungen^{13-18,21,25)} des Kerns recht erfolgreich erwiesen. Auch Paarvibrationen¹⁹⁻²⁷⁾ bei Kernen nahe abgeschlossener Schalen konnten untersucht werden. Nicht kollektive Freiheitsgrade wurden nicht berücksichtigt.

Nun läßt sich aber der GCM-Ansatz (1) dahingehend erweitern, daß durch eine Erweiterung des Teilraums neben den kollektiven Freiheitsgraden ebenfalls die in RPA oder dem SM üblichen Teilchenanregungen mitgenommen werden können. Die erweiterte GCM-Wellenfunktion $|\Psi'(x)\rangle$ hat die Gestalt:

$$|\Psi'(x)\rangle = \int d\beta f(\beta) |\phi(\beta,x)\rangle + \sum_i \int d\beta f^i(\beta) |\phi^i(\beta,x)\rangle \quad (2)$$

Der in diesem Ansatz stehende Zusatzterm enthält Komponenten $|\phi^i(\beta,x)\rangle$, die Ein- bzw. Mehr-Teilchen-Loch-Anregungen relativ zu $|\phi(\beta,x)\rangle$ enthalten. Dadurch wird es möglich, im Rahmen der GCM die Struktur auch solcher Kerne zu berechnen, die sowohl kollektive als auch Einteilchen-Freiheitsgrade besitzen²⁸⁾.

Die Vorteile der EGCM liegen also besonders in der weitreichenden Anwendungsmöglichkeit. Sie sollte eine gute Approximation ans SM sein für solche Kerne, bei denen Schalenmodellrechnungen noch durchführbar sind, und eine hilfreiche Ergänzung in allen anderen Fällen. Ferner vereinigt sie alle Vorteile des bisher üblichen GCM-Verfahrens. Sie kann also prinzipiell mit jeder Art von Basiswellenfunktion und Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung

verwendet werden. Selbst auf dem Gebiet der Kernreaktionen²⁹⁾ hat sie sich als nützlich erwiesen. Vor allen Dingen vermittelt EGCM einen besonders anschaulichen Einblick in die Kerndynamik. Bei einer geschickten Wahl von Generatorpunkten kann der numerische Aufwand in Grenzen gehalten werden und nicht zuletzt zerstört die EGCM die Symmetrieeigenschaften der Generatorwellenfunktionen nicht.

In der vorliegenden Arbeit soll gezeigt werden, daß das oben formulierte Konzept der Ankopplung von Einteilchen-Freiheitsgraden an die kollektive Bewegung durchführbar ist. Dazu soll die EGCM auf solche Kerne angewendet werden, die sich einer vollständigen mikroskopischen Beschreibung (SM) entziehen und von ihrem Spektrum her ebenfalls von keinem rein kollektiven Modell beschrieben worden sind. Geeignete Anwendungsbeispiele gibt es z.B. bei den mittelschweren Kernen im Massenbereich $A \approx 70$. Hier bietet sich vor allem das ^{72}Ge -Isotop an, ein nicht magischer g-g-Kern, der neben ^{90}Zr einen sehr tiefliegenden ersten angeregten 0^+ -Zustand besitzt. Die Bedeutung der Einteilchenfreiheitsgrade gerade bei diesem Kern wurde von Castel, Micklinghoff und Johnston³⁰⁾ herausgestellt. Sie koppelten in einem halbmikroskopischen Modell zwei Valenzneutronen in der $p_{1/2}$ und $g_{9/2}$ -Schale an die kollektiven anharmonischen Anregungen des ^{70}Ge -Cores und berücksichtigten ebenfalls Anregungen in den $p_{3/2}$ und $f_{5/2}$ -Schalen des Cores. Mit einem 2-Parameterfit erreichten sie eine mit dem Experiment sehr gute Übereinstimmung.

Die bei ^{72}Ge gewonnenen Erfahrungen werden auf ^{74}Ge und ^{70}Zn angewendet; es soll festgestellt werden, inwieweit die Einteilchen-

freiheitsgrade der erweiterten GCM-Wellenfunktion in diesen Bereichen noch wichtig sind. Die Ergebnisse werden im Kapitel V diskutiert.

Im ersten Kapitel wird die erweiterte Generatorkoordinatenmethode behandelt und ein Lösungsverfahren der dem Variationsprinzip äquivalenten Hill-Wheeler Gleichung angegeben.

Die die GCM-Wellenfunktion aufbauenden Komponenten sind die selbstkonsistenten teilchenzahl- und drehimpulsprojizierten Hartree-Fock-Bogoliubov-Zustände (HFB), denn es zeigt sich, daß die Paarung bei den hier untersuchten Kernen nicht vernachlässigt werden darf. Die Kapitel II und III beschäftigen sich deshalb mit der HFB-Theorie und den zur Symmetrieherstellung nötigen Projektionen.

Kapitel IV erörtert kurz einige numerische Details und geht auf die bei allen drei untersuchten Kernen verwendete MSDI-Kraft, die in den Hamiltonoperator eingeht, ein.

Die sich in Kapitel V anschließende Diskussion der Resultate behandelt unter anderem auch BE2-Übergänge und das letzte Kapitel gibt eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse.

Kapitel I

EGCM, die erweiterte Generatorkoordinatenmethode

Ausgehend von einem Vielteilchen-Hamiltonoperator beschreibt die Generatorkoordinatenmethode (GCM)¹³⁻²⁷⁾ bei Verwendung mikroskopischer Wellenfunktionen die kollektiven Freiheitsgrade des Kerns auf einer rein mikroskopischen Ebene. In einer erweiterten GCM-Wellenfunktion (EGCM)²⁸⁾ werden an die kollektiven Bewegungen auch Ein- und Mehr-Teilchenfreiheitsgrade angekoppelt. Diese Erweiterung sollte die Anwendung der EGCM auch auf solche Kerne ermöglichen, deren Spektren der phänomenologischen Modellvorstellung nicht mehr entsprechen.

Im wesentlichen besteht das EGCM-Verfahren darin, durch Wahl geeigneter Basisvektoren mit verschiedenen physikalischen Eigenschaften aus dem unendlich dimensional Hilbertraum einen dem Problem angemessenen endlichen Teilraum auszuwählen, in dem durch Überlagerung der nicht notwendigerweise orthonormierten, diesen Teilraum aufspannenden Basiszustände eine Gesamtwellenfunktion erzeugt wird, die die Eigenschaften des Kerns möglichst gut approximiert.

Die Eigenschaften der einzelnen Generatorzustände werden durch die verschiedenen Werte der Generatorkoordinaten β beschrieben, deren Anzahl bei einer geschickten Basiswahl auf ein Minimum reduziert werden kann. Die Generatorkoordinaten sind z.B. das Quadrupolmoment Q , wobei durch Variation der Wellenfunktionen bezüglich Q die Vibrationsfreiheitsgrade¹⁴⁻¹⁷⁾ der Kernoberfläche beschrieben werden, die Orientierung Ω des deformierten Kerns, die die Rotationsfreiheitsgrade erfaßt, die Paarungsenergie zur

Beschreibung von Paarvibrationen^{19-21,23,24,26,27)}, sowie der mittlere Abstand von Clusterzuständen¹⁰⁾ bei der Streutheorie.

In der EGCM werden neben den bei GCM gebräuchlichen Konfigurationsmischungen zusätzlich angeregte Konfigurationen berücksichtigt²⁸⁾. Solche für diese Arbeit besonders wichtigen Einteilchen- oder Quasiteilchenfreiheitsgrade dienen zur Ankopplung von Teilchen-Anregungen an die kollektive Bewegung.

EGCM-Wellenfunktion und Lösungsverfahren

Der Ansatz der EGCM-Wellenfunktion $|\Psi(x)\rangle$ lautet:

$$|\Psi(x)\rangle = \int d\beta f(\beta) |\phi(\beta, x)\rangle + \sum_i \int d\beta f^i(\beta) |\phi^i(\beta, x)\rangle \quad (3)$$

$|\phi(\beta, x)\rangle$ im ersten Term der Summe ist eine von einem Satz von Variationsparametern $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3, \dots)$ abhängige Basiswellenfunktion des GCM-Teilraumes.

x faßt alle Einteilchenkoordinaten dieser mikroskopischen Wellenfunktion zusammen.

Die vom gleichen Parametersatz β abhängige Wellenfunktion $|\phi^i(\beta, x)\rangle$ ist ein bezüglich $|\phi(\beta, x)\rangle$ ein- oder mehrteilchenangeregter Zustand, der durch den Index i charakterisiert wird. Durch die Summe über i im zweiten Term werden alle möglichen angeregten Zustände berücksichtigt. Der durch den ersten Term definierte bisherige GCM-Raum wird somit durch den Zusatzterm erweitert (EGCM).

$|\phi(\beta, x)\rangle$ und $|\phi^i(\beta, x)\rangle$ sind über die ebenfalls von β abhängigen Funktionen $f(\beta)$ und $f^i(\beta)$ gewichtet.

Im folgenden beschränken wir uns ohne Beschränkung der Allgemein-

heit nur auf einen Satz von Parametern, den wir mit β bezeichnen. Die Einteilchenkoordinaten x werden nicht mehr explizit angegeben.

Die Gewichtsfunktionen $f(\beta)$ und $f^i(\beta)$ geben darüber Aufschluß, in welchem Maße die verschiedenen Generatorwellenfunktionen $|\phi(\beta)\rangle$ und $|\phi^i(\beta)\rangle$ an der Gesamtwellenfunktion $|\Psi\rangle$ beteiligt sind. Da die Basiszustände im allgemeinen nicht orthonormiert sind, sind $f(\beta)$ und $f^i(\beta)$ selbst noch kein absolutes Maß für den Anteil der einzelnen Komponenten an der Gesamtwellenfunktion $|\Psi\rangle$. Hierzu bildet man die Überlappe $\langle\phi(\beta)|\Psi\rangle$ und $\langle\phi^j(\beta)|\Psi\rangle$. Die sich hieraus ergebenden Wahrscheinlichkeitsamplituden lauten:

$$\langle\phi(\beta)|\Psi\rangle = \int d\beta_1 f(\beta_1) \langle\phi(\beta)|\phi(\beta_1)\rangle + \sum_i \int d\beta_1 f^i(\beta_1) \langle\phi(\beta)|\phi^i(\beta_1)\rangle \quad (4)$$

$$\langle\phi^j(\beta)|\Psi\rangle = \int d\beta_1 f(\beta_1) \langle\phi^j(\beta)|\phi(\beta_1)\rangle + \sum_i \int d\beta_1 f^i(\beta_1) \langle\phi^j(\beta)|\phi^i(\beta_1)\rangle \quad (5)$$

Die Quadrate dieser beiden Überlappe sind nun ein Maß für die Beimischung der einzelnen Generatorwellenfunktionen und erlauben somit eine detailliertere Analyse des gesamten EGCM-Zustandes.

In den Gleichungen (3), (4) und (5) verbleiben als einzige unbekannte Größen die Gewichtsfunktionen $f(\beta)$ und $f^i(\beta)$. Sie werden ermittelt, indem der Erwartungswert des Hamiltonoperators $\hat{H}$ bezüglich der EGCM-Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ minimisiert wird. Das Variationsprinzip hat die Form:

$$\delta \frac{\langle\Psi|\hat{H}-E|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = 0 \quad (6)$$

Mit (3) lauten die Norm $\langle\Psi|\Psi\rangle$ und der Hamiltonüberlapp $\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle$ explizit:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \Psi \rangle &= \iint d\beta_1 d\beta_2 f^*(\beta_1) f(\beta_2) \langle \phi(\beta_2) | \phi(\beta_1) \rangle \\
 &+ \sum_i \iint d\beta_1 d\beta_2 f^{i*}(\beta_1) f(\beta_2) \langle \phi(\beta_2) | \phi^i(\beta_1) \rangle \\
 &+ \sum_j \iint d\beta_1 d\beta_2 f^*(\beta_1) f^j(\beta_2) \langle \phi^j(\beta_2) | \phi(\beta_1) \rangle \\
 &+ \sum_{ij} \iint d\beta_1 d\beta_2 f^{i*}(\beta_1) f^j(\beta_2) \langle \phi^j(\beta_2) | \phi^i(\beta_1) \rangle
 \end{aligned} \tag{7}$$

und

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \iint d\beta_1 d\beta_2 f^*(\beta_1) f(\beta_2) \langle \phi(\beta_2) | \hat{H} | \phi(\beta_1) \rangle \\
 &+ \sum_i \iint d\beta_1 d\beta_2 f^{i*}(\beta_1) f(\beta_2) \langle \phi(\beta_2) | \hat{H} | \phi^i(\beta_1) \rangle \\
 &+ \sum_j \iint d\beta_1 d\beta_2 f^*(\beta_1) f^j(\beta_2) \langle \phi^j(\beta_2) | \hat{H} | \phi(\beta_1) \rangle \\
 &+ \sum_{ij} \iint d\beta_1 d\beta_2 f^{i*}(\beta_1) f^j(\beta_2) \langle \phi^j(\beta_2) | \hat{H} | \phi^i(\beta_1) \rangle
 \end{aligned} \tag{8}$$

Variation von $\langle \Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle$ nach $f^*(\beta_1)$ und $f^{i*}(\beta_1)$ führt zu den gekoppelten Gleichungssystemen:

$$\begin{aligned}
 \int d\beta_2 f(\beta_2) (H(\beta_1, \beta_2) - E N(\beta_1, \beta_2)) + \sum_j \int d\beta_2 f^j(\beta_2) \\
 (H^j(\beta_1, \beta_2) - E N^j(\beta_1, \beta_2)) = 0
 \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
 \int d\beta_2 f(\beta_2) (H^i(\beta_1, \beta_2) - E N^i(\beta_1, \beta_2)) + \sum_j \int d\beta_2 f^j(\beta_2) \\
 (H^{ij}(\beta_1, \beta_2) - E N^{ij}(\beta_1, \beta_2)) = 0
 \end{aligned} \tag{10}$$

mit

$$\begin{aligned}
 H(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi(\beta_2) | \hat{H} | \phi(\beta_1) \rangle \\
 N(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi(\beta_2) | \phi(\beta_1) \rangle \\
 H^i(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi(\beta_2) | \hat{H} | \phi^i(\beta_1) \rangle \\
 H^j(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi^j(\beta_2) | \hat{H} | \phi(\beta_1) \rangle \\
 N^i(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi(\beta_2) | \phi^i(\beta_1) \rangle \\
 N^j(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi^j(\beta_2) | \phi(\beta_1) \rangle \\
 H^{ij}(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi^j(\beta_2) | \hat{H} | \phi^i(\beta_1) \rangle \\
 N^{ij}(\beta_1, \beta_2) &= \langle \phi^j(\beta_2) | \phi^i(\beta_1) \rangle
 \end{aligned} \tag{11}$$

Variation nach $f(\beta_2)$ und $f^j(\beta_2)$ ergibt die zu (9) und (10) komplex konjugierten Gleichungen.

Gleichung (9) steht für alle möglichen Zustände $|\phi(\beta_1)\rangle$ in den Hamilton- und Norm-Matrixelementen, während Gleichung (10) in gleicher Weise für alle $|\phi^i(\beta_1)\rangle$ gilt. Gemeinsam ergeben (9) und (10) ein lineares Lösungssystem für alle $f(\beta)$ und $f^j(\beta)$. Dieses System muß zur praktischen Berechnung diskretisiert werden. Zu diesem Zwecke wird die Integralform der EGCM-Wellenfunktion (3) als diskrete Summe über eine endliche Zahl von Parameterwerten der β geschrieben. Dies hat zur Folge, daß sich die Gleichungen (9) und (10) nun ebenfalls zu einer endlichen Summe reduzieren.

Das resultierende Gleichungssystem hat jetzt in Matrixschreibweise folgende Gestalt:

$$\mathring{H} F = E \mathring{N} F \tag{12}$$

wobei $\mathring{H}$ alle Hamiltonmatrixelemente umfaßt:

$$\mathring{H} = \begin{pmatrix} H(\beta_1, \beta_2) & H^j(\beta_1, \beta_2) \\ H^i(\beta_1, \beta_2) & H^{ij}(\beta_1, \beta_2) \end{pmatrix} \quad (12a)$$

Desgleichen steht $\mathring{N}$ für alle Normmatrixelemente:

$$\mathring{N} = \begin{pmatrix} N(\beta_1, \beta_2) & N^j(\beta_1, \beta_2) \\ N^i(\beta_1, \beta_2) & N^{ij}(\beta_1, \beta_2) \end{pmatrix} \quad (12b)$$

Die Matrix F faßt alle Komponenten $f(\beta_2)$ und $f^j(\beta_2)$ zusammen:

$$F = \begin{pmatrix} f(\beta_2) \\ f^j(\beta_2) \end{pmatrix} \quad (12c)$$

Die Matrizen (12a), (12b) und (12c) gelten für alle Werte der β_1 und β_2 , sowie für alle Indizes i und j .

In der oben angegebenen Form entspricht (12) einer Gleichung für die Diagonalisierung des Hamiltonoperators in einer nicht ortho-normierten Basis. Durch Transformation in eine orthogonale Basis kann die Matrixgleichung (12) auf ein gewöhnliches Eigenwertproblem vereinfacht werden. Ein hierzu gebräuchliches Lösungsverfahren²⁷⁾ ist wie folgt:

Die hermitesche Überlapp-Matrix $\mathring{N}$ wird mit Hilfe einer Ähnlichkeitstransformation A diagonalisiert. Aus Normierungsgründen ist $\mathring{N}$ positiv semi-definit; daher sind alle Eigenwerte von $\mathring{N}$ nicht negativ.

$$A^+ \mathring{N} A = \hat{N}^2 \quad \text{mit} \quad A^+ A = 1 \quad (13)$$

Die Ermittlung der Eigenwerte der Überlapp-Matrix $\overset{\circ}{N}$ gibt uns die Möglichkeit, festzustellen, ob die Anzahl der Generatorpunkte größer ist als der Rang der Matrix $\overset{\circ}{N}$. Falls der Rang einer $(n+1)$ -dimensionalen Matrix gleich n ist, wird zwar der $(n+1)$ -te Zustand wegen der Transformation A orthogonal zu allen übrigen Zuständen sein, jedoch wird seine Norm wegen der Forderung nach genau n linear unabhängigen Vektoren gleich null sein. Praktisch äußert sich dies in einem durch die numerischen Ungenauigkeiten begründeten nicht verschwindenden, jedoch sehr kleinen $(n+1)$ -ten Eigenwert der Normmatrix. Das Problem der sich in kleinen Eigenwerten äußernden "Übervollständigkeit" der gewählten Basis kann behoben werden, indem man die Dimension der Basis derart reduziert, daß alle kleinen Eigenwerte von $\overset{\circ}{N}$ wegfallen. Dadurch wird verhindert, daß die linear abhängigen Zustände negativ auf die Energieeigenwerte E einwirken.

Die in den Raum orthogonaler Basisvektoren transformierende Transformation A wird nun ebenfalls auf die gesamte Gleichung (12) angewendet:

$$\overset{\circ}{H} F = E \overset{\circ}{N} F \quad (12)$$

$$\begin{aligned} (A^+ \overset{\circ}{H} A) A^+ F &= (E A^+ \overset{\circ}{N} A) A^+ F \\ &= (E \tilde{N}^2) A^+ F; \quad \tilde{N}^2 = A^+ \overset{\circ}{N} A \end{aligned}$$

$$(A^+ \overset{\circ}{H} A - E \tilde{N}^2) A^+ F = 0$$

$$(\tilde{N}^{-1} A^+ \overset{\circ}{H} A - E \tilde{N}^{-1} \tilde{N} \tilde{N}) \tilde{N}^{-1} \tilde{N} A^+ F = 0$$

$$(\tilde{N}^{-1} A^+ \overset{\circ}{H} A \tilde{N}^{-1} - E) \tilde{N} A^+ F = 0 \quad (14)$$

Dies ist das gewünschte normale Eigenwertproblem bezüglich der Eigenvektormatrix $F' = \hat{N} A^\dagger F$. Aus der berechneten Matrix F' kann man auf die Matrix F umrechnen und erhält somit die benötigten Werte für alle $f(\beta_2)$ und $f^j(\beta_2)$.

Bisher wurde das EGCM-Verfahren ganz allgemein und ohne Berücksichtigung spezieller Generatorwellenfunktionen behandelt. Deshalb wurde noch keine Aussage über die als bekannt vorausgesetzten Matrizen H , H^i , H^j , H^{ij} , sowie die entsprechenden Normmatrizen N , N^i , N^j , N^{ij} (Gleichung 11) und den Hamiltonoperator $\hat{H}$ gemacht.

Unter den möglichen mikroskopischen Wellenfunktionen (z.B. HF, BCS, HFB ...) fiel die Wahl auf die HFB-Zustände, weil sie einerseits das Kernpotential in selbstkonsistenter Weise berücksichtigen und weil sie zum anderen, im Gegensatz zu HF, Paarkorrelationen miteinbeziehen, ein bei den hier betrachteten Kernen (^{72}Ge , ^{74}Ge , ^{70}Zn) nicht zu vernachlässigender Faktor.

Im nächsten Kapitel wird deshalb die "Constrained HFB"-Theorie (CHFB), die zur Lösung der CHFB-Gleichungen führt, näher behandelt.

Da die HFB-Wellenfunktionen selbst keinen scharfen Drehimpuls J und eine gute Teilchenzahl N besitzen, werden sie auf Komponenten mit den entsprechenden Symmetrieeigenschaften projiziert. Solche Symmetrien werden bei der Diagonalisierung des Hamiltonoperators im EGCM-Raum nicht zerstört. Daher ist es sinnvoll, die EGCM-Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ nun nach solchen projizierten Zuständen zu entwickeln. Sie trägt die gleichen Symmetrieeigenschaften wie die einzelnen Komponenten und lautet:

$$|\Psi_{JN}\rangle = \int d\beta f_{JN}(\beta) |\phi_{JN}(\beta)\rangle + \sum_i \int d\beta f_{JN}^i(\beta) |\phi_{JN}^i(\beta)\rangle \quad (15)$$

wobei $|\phi_{JN}(\beta)\rangle$ und $|\phi_{JN}^i(\beta)\rangle$ die auf J projizierten HFB-Komponenten $\hat{P}_J(\hat{P}_N|\text{HFB}\rangle)$ und $\hat{P}_J(\hat{P}_N|\text{HFB}^i\rangle)$ mit scharfer Teilchenzahl N sind. Das Variationsprinzip (6) kann für jeden Drehimpuls J getrennt gelöst werden. Die bezüglich der projizierten HFB-Zustände resultierenden Überlappe (11) beziehen sich dann ebenfalls nur auf Komponenten mit vorgegebenem Drehimpuls J. Ihre Berechnung erfolgt im Rahmen der in Kapitel III behandelten Projektionstheorie.

Die mittels der EGC-Methode zu untersuchenden Kerneigenschaften sind die Grundzustandsenergie, niedrigliegende Anregungsenergien und BE2-Übergänge, die darüber Aufschluß geben, inwiefern die Nukleonen kohärent zur Anregung beitragen. Die BE2-Werte sind im wesentlichen durch die Kenntnis des reduzierten Matrixelements eines Übergangsoperators $\hat{T}$ zwischen Zuständen gegebenen Drehimpulses J bestimmt. Ein solches Matrixelement hat im Raume der EGCM-Wellenfunktionen die Gestalt:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{JN} | \hat{T} | \Psi'_{J,N} \rangle = & \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{JN}^*(\beta_1) f_{J',N}(\beta_2) \langle \phi_{JN}(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J',N}(\beta_2) \rangle \\ & + \sum_i \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{JN}^{i*}(\beta_1) f_{J',N}(\beta_2) \langle \phi_{JN}^i(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J',N}(\beta_2) \rangle \\ & + \sum_j \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{JN}^*(\beta_1) f_{J',N}^j(\beta_2) \langle \phi_{JN}(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J',N}^j(\beta_2) \rangle \\ & + \sum_{ij} \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{JN}^{i*}(\beta_1) f_{J',N}^j(\beta_2) \langle \phi_{JN}^i(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J',N}^j(\beta_2) \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

In diesem Integral müssen insbesondere die Überlappe

$$\langle \phi_{JN}(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J,N}(\beta_2) \rangle, \quad \langle \phi_{JN}^i(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J,N}(\beta_2) \rangle$$

$$\langle \phi_{JN}(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J,N}^j(\beta_2) \rangle \text{ und } \langle \phi_{JN}^i(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J,N}^j(\beta_2) \rangle$$

berechnet werden. Dies ist Gegenstand der Projektionstheorie.

Eine genauere Definition der BE2-Übergänge erfolgt im Kapitel V.

Kapitel II

"Constrained Hartree-Fock-Bogoliubov" Theorie

In der Atomphysik hat sich das selbstkonsistente Hartree-Fock-Verfahren (HF)⁵⁾ zur Berechnung der Einteilchen-Energien für Elektronen im Felde des Zentralkerns bestens bewährt. Dieses Verfahren setzt ein gemeinsames Potential für alle Teilchen voraus, was im Falle des Atomkerns keineswegs von vornherein gegeben ist. Viele experimentelle Daten (magische Zahlen, $J=0$ für den Grundzustand von g-g Kernen ...) weisen jedoch auf eine der Atomhülle ähnliche Schalenstruktur hin^{2,3)}, so daß man annehmen kann, daß ein wesentlicher Teil der Kernkräfte ein gemeinsames Potential verursacht, während der verbleibende Teil als Störung behandelt werden kann. Ein wesentlicher Effekt der Restwechselwirkung besteht darin, daß Nukleonen unter Energiegewinn paarweise zum Gesamtspin $J=0$ gekoppelt werden. Solche Paarungskräfte werden in der BCS-Theorie^{2,3,5,9)} behandelt.

Eine Theorie, welche sowohl die HF-Freiheitsgrade, als auch die BCS-Freiheitsgrade berücksichtigt, ist die Hartree-Fock-Bogoliubov Theorie (HFB)^{1-3,5,9,34)}, eine Verallgemeinerung der HF-Theorie. Durch Anwendung des Variationsprinzips minimisiert sie den Energieerwartungswert des Grundzustandes und bestimmt in selbstkonsistenter Weise die Grundzustandswellenfunktion.

Diese Variation kann auch in einem Teilraum des HFB-Raums, in dem die Wellenfunktionen z.B. eine bestimmte Deformation haben, durchgeführt werden. Die Bedeutung dieser "Constrained"-HFB-Theorie (CHFB) für GCM beruht auf der Tatsache, daß man sich mikroskopische Wellenfunktionen mit bekannten Werten für die

Generatorkoordinaten konstruieren kann, wobei die für den Massenbereich $A \approx 70$ wichtigen Paarungskorrelationen voll berücksichtigt werden.

1. Hartree-Fock-Bogoliubov Theorie (HFB)

Der allgemeine Hamiltonoperator für ein Mehrteilchensystem lautet unter Annahme einer bisher noch nicht definierten Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\gamma} T_{\alpha\gamma} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (17)$$

Die frei zu wählende Basis wird durch die Fermionen-Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren $c_{\alpha}^{\dagger}$, c_{α} festgelegt.

$T_{\alpha\gamma} = \langle \alpha | \hat{T} | \gamma \rangle$ ist ein Einteilchen-Matrixelement der kinetischen Energie. $V_{\alpha\beta\gamma\delta}$ ist ein antisymmetrisiertes Zweiteilchen-Matrixelement der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung. Es hat die Antisymmetrieeigenschaften:

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta} = -V_{\beta\alpha\gamma\delta} = -V_{\alpha\beta\delta\gamma} = V_{\gamma\delta\alpha\beta}^*$$

Um nun die Freiheitsgrade der HF-Theorie und der BCS-Theorie gleichzeitig zu erfassen, werden mittels der allgemeinen Bogoliubov-Transformation³⁴⁾ Quasiteilchenoperatoren erzeugt:

$$\begin{aligned} a_i^{\dagger} &= \sum_{\alpha} (A_{\alpha i} c_{\alpha}^{\dagger} + B_{\alpha i} c_{\alpha}) \\ a_i &= \sum_{\alpha} (B_{\alpha i}^* c_{\alpha}^{\dagger} + A_{\alpha i}^* c_{\alpha}) \end{aligned} \quad (18)$$

Diese Quasiteilchen müssen ebenfalls Fermionen sein, weshalb die

Quasiteilchenoperatoren den Fermionen-Vertauschungsregeln gehorchen:

$$\begin{aligned} a_i a_j^+ + a_j^+ a_i &= \{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij} \\ a_i a_j + a_j a_i &= \{a_i, a_j\} = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Daraus ergeben sich für die Entwicklungskoeffizienten A und B folgende einschränkende Orthogonalitätsrelationen:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} (A_{\alpha i} A_{\alpha j}^* + B_{\alpha i} B_{\alpha j}^*) &= \delta_{ij} \\ \sum_{\alpha} (A_{\alpha i} B_{\alpha j} + B_{\alpha i} A_{\alpha j}) &= 0 \\ \sum_i (A_{\alpha i} A_{\beta i}^* + B_{\alpha i}^* B_{\beta i}) &= \delta_{\alpha\beta} \\ \sum_i (A_{\alpha i} B_{\beta i}^* + B_{\alpha i}^* A_{\beta i}) &= 0 \end{aligned} \quad (20)$$

Die zu (18) umgekehrten Transformationen lauten:

$$\begin{aligned} c_{\alpha} &= \sum_i (A_{\alpha i} a_i + B_{\alpha i}^* a_i^+) \\ c_{\alpha}^+ &= \sum_i (B_{\alpha i} a_i + A_{\alpha i}^* a_i^+) \end{aligned} \quad (21)$$

Mit den so definierten Quasiteilchen wird der HFB-Grundzustand $|\phi\rangle$ als das Quasiteilchenvakuum definiert, d.h. es soll gelten:

$$a_i |\phi\rangle = 0 \quad \text{für alle } i$$

$$|\phi\rangle = \prod_i (a_i) |0\rangle \quad (22)$$

genügt dieser Bedingung.

Die Lösung des HFB-Problems besteht nun darin, den Energieerwartungswert des Hamiltonoperators im Raume der normierten HFB-Zustände zu minimisieren. Dies geschieht durch Anwendung des Variationsprinzips:

$$\delta \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = 0 \quad (23)$$

Bei Beschränkung auf den Teilraum der Wellenfunktionen mit vorgegebener Deformation und scharfer mittlerer Teilchenzahl gilt das Variationsprinzip mit einem modifizierten Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H} - \lambda \hat{N} - \mu \hat{Q}$:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\gamma} (T_{\alpha\gamma} - \lambda \delta_{\alpha\gamma} - \mu Q_{\alpha\gamma}) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \times c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (24)$$

Die Lagrangeparameter λ und μ sorgen dafür, daß die HFB-Grundzustandswellenfunktion im Mittel eine scharfe Teilchenzahl und eine vorgegebene Deformation besitzt, wobei $Q_{\alpha\gamma}$ ein Matrixelement des Quadrupoloperators $\hat{Q}$ ist. $\hat{N}$ ist der Teilchenzahloperator $\sum_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}$. Mit $\hat{H}$ lautet nun das Variationsprinzip

$$\delta \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = 0 \quad (25)$$

Hieraus ergeben sich unter Entwicklung des Hamiltonoperators $\hat{H}$ nach Quasiteilchen, Anwendung des Wick'schen Theorems und Forderung nach unabhängigen Quasiteilchen, die CHFB-Gleichungen:

$$\begin{aligned} E_i A_{\alpha i} &= \sum_{\gamma} (T_{\alpha\gamma} - \lambda \delta_{\alpha\gamma} - \mu Q_{\alpha\gamma} + \Gamma_{\alpha\gamma}) A_{\gamma i} + \sum_{\beta} \Delta_{\alpha\beta} B_{\beta i} \\ E_i B_{\alpha i} &= -\sum_{\beta} \Delta_{\alpha\beta}^* A_{\beta i} - \sum_{\gamma} (T_{\alpha\gamma}^* - \lambda \delta_{\alpha\gamma} - \mu Q_{\alpha\gamma} + \Gamma_{\alpha\gamma}^*) B_{\gamma i} \end{aligned} \quad (26)$$

In diesen Gleichungen ist

$$\Delta_{\alpha\beta} = -\Delta_{\beta\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \kappa_{\delta\gamma}$$

$$\Gamma_{\alpha\gamma} = \Gamma_{\gamma\alpha} = \sum_{\beta\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\delta\beta}$$

mit

(27)

$$\rho_{\gamma\alpha} = \rho_{\alpha\gamma}^* = \langle \phi | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} | \phi \rangle = \sum_i B_{\alpha i} B_{\gamma i}^* \quad (\text{Dichtematrix})$$

$$\kappa_{\beta\alpha} = \kappa_{\alpha\beta} = \langle \phi | c_{\beta} c_{\alpha} | \phi \rangle = \sum_i A_{\beta i} B_{\alpha i}^* \quad (\text{Paarungstensor})$$

In diesem Eigenwertproblem werden die Feldeffekte (Γ) und die Paarungseffekte (Δ) selbstkonsistent und mit gleicher Priorität behandelt.

Da die HFB-Gleichungen (26) keine linearen Gleichungen sind, löst man sie iterativ. Man gibt sich gewisse Startwerte für A und B vor, berechnet Γ und Δ und erhält durch Diagonalisierung die Quasiteilchenenergien E_i und die neuen Eigenvektoren A und B. Dabei werden die Lagrangemultiplikatoren λ und μ in jedem Iterationsschritt immer derart angepaßt, daß eine gute Teilchenzahl und das gewünschte Quadrupolmoment folgt. Die Selbstkonsistenz ist erreicht, wenn im h-ten Iterationsschritt die Größe

$$S = \frac{\sum_{\alpha} |E_{\alpha}^{(h)} - E_{\alpha}^{(h-1)}|}{\sum_{\alpha} |E_{\alpha}^{(h)}|}$$

eine vorgegebene Schranke unterschreitet.

Im Hartree-Fock-Fall ist Δ gleich Null zu setzen und die HFB-Gleichungen entkoppeln. Dabei stehen die Koeffizienten A nur für

vollständig unbesetzte, die Koeffizienten B für vollständig besetzte Zustände.

Analogie zum BCS-Verfahren besteht insofern nur, daß auch hier Paarungskorrelationen berücksichtigt werden und es eine Darstellung gibt, in der die HFB-Zustände in die BCS-Form gebracht werden können (Bloch-Messiah)⁴¹⁾. In dieser Darstellung nehmen jedoch die Größen Γ und Δ keine einfache Gestalt an, d.h. es gibt neben $\Gamma_{\alpha\alpha}$ und $\Delta_{\alpha\alpha}$ auch nicht-diagonale Terme, die von Null verschieden sind.

2. Angeregte HFB-Zustände

Im Kapitel I (EGCM) wurde eine EGCM-Wellenfunktion beschrieben, die unter anderem auch von angeregten Basiszuständen aufgespannt wird. In Anlehnung an die 1-Teilchen-1-Loch-Anregungen bei ungepaarten Nukleonen besteht im HFB-Fall die einfachste Anregung in einer 2-Quasiteilchenanregung der Form

$$|\phi^{ij}(\beta)\rangle = a_i^+ a_j^+ |\phi(\beta)\rangle \quad (28)$$

In dieser Arbeit beschränken wir uns auf Anregungen von Quasiteilchen in zueinander zeitumgekehrten Zuständen.

$$|\phi^i(\beta)\rangle = a_i^+ a_{\bar{i}}^+ |\phi(\beta)\rangle \quad (29)$$

Dies hat den Vorteil, daß die Techniken der Symmetrieprojektionen für nicht angeregte HFB-Zustände unverändert übernommen werden können, weil der Operator $a_i^+ a_{\bar{i}}^+$ nur die Entwicklungskoeffizienten A und B beeinflusst, ohne die allgemeine Form des HFB-Grundzustandes zu ändern.

Zum Beweis der letzten Behauptung soll der Ausdruck

$$|\phi^i(\beta)\rangle = a_i^\dagger a_1^\dagger |\phi(\beta)\rangle$$

explizit ausgerechnet werden. Hierzu werden $|\phi(\beta)\rangle$ und $a_i^\dagger$ in die kanonische Basis transformiert. Dies geschieht mit Hilfe des Bloch-Messiah-Theorems⁴¹⁾, welches besagt, daß die allgemeine Hartree-Fock-Bogoliubov-Transformation (18) in drei Schritte zerlegt werden kann:

a) eine unitäre Transformation D der Teilchenoperatoren c_i , so daß ρ und κ in eine einfache kanonische Form gebracht werden können:

$$b_k = \sum_i D_{ik} c_i \quad (31)$$

b) eine BCS-Transformation der Teilchenoperatoren b_k und $b_k^\dagger$

$$\eta_k = u_k b_k - v_k b_k^\dagger \quad (32)$$

c) eine unitäre Transformation C der Quasiteilchen η_k

$$a_\alpha = \sum_k C_{k\alpha} \eta_k \quad (33)$$

Die Matrizen U und V sind definiert

$$U_{k\ell} = u_k \delta_{k\ell} \quad (34)$$

$$V_{k\ell} = -v_k \delta_{k\bar{\ell}}$$

Mit ihnen können A und B ausgedrückt werden:

$$A = (DUC)^* \quad (35)$$

$$B = (D^*VC)^*$$

In der kanonischen Basis hat dann der HFB-Zustand die Darstellung

$$|\phi\rangle = \prod_{\alpha>0} (u_{\alpha} + v_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) |0\rangle \quad (36)$$

Daraus folgt für den angeregten Zustand:

$$\begin{aligned} |\phi^i\rangle &= \eta_i^{\dagger} \eta_{\bar{i}}^{\dagger} |\phi\rangle \\ &= \prod_{\alpha \neq i} (u_{\alpha} + v_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) \eta_i^{\dagger} \eta_{\bar{i}}^{\dagger} (u_i + v_i b_i^{\dagger} b_{\bar{i}}^{\dagger}) |0\rangle \\ &= \prod_{\alpha \neq i} (u_{\alpha} + v_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) (u_i b_i^{\dagger} - v_i b_{\bar{i}}) (u_i^2 b_{\bar{i}}^{\dagger} + v_i^2 b_{\bar{i}}^{\dagger}) |0\rangle \\ &= \prod_{\alpha \neq i} (u_{\alpha} + v_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) (-v_i + u_i b_i^{\dagger} b_{\bar{i}}^{\dagger}) |0\rangle \end{aligned} \quad (37)$$

Mit (35) kann man zeigen, daß für die sich auf den Zustand i beziehenden Koeffizienten A_{ik} und B_{ik} gilt:

$$\begin{aligned} A_{ik} &\xrightarrow{\eta_i^{\dagger} \eta_{\bar{i}}^{\dagger}} - B_{ik} \\ B_{ik} &\xrightarrow{\eta_i^{\dagger} \eta_{\bar{i}}^{\dagger}} + A_{ik} \end{aligned} \quad (38)$$

Man kann sich also durch einfaches Vertauschen der betreffenden Koeffizienten A_{ik} und B_{ik} und unter Berücksichtigung der korrekten Phasenwahl aus einem bereits bestehenden HFB-Grundzustand einen bezüglich zueinander zeitumgekehrter Quasiteilchen angeregten Zustand leicht verschaffen.

Kapitel III

Projektion: Symmetrien und Überlappe

Die HFB-Theorie ist wegen der Vernachlässigung eines Teiles der Restwechselwirkung eine Näherung; der Rotationsoperator $\hat{R}(\Omega)$ kommutiert nicht mit dem HFB-Hamiltonoperator, so daß die HFB-Wellenfunktionen keinen scharfen Drehimpuls besitzen. Die bei deformierten Kernen vorgegebene körperfeste Symmetrieachse richtet den Kern räumlich aus, so daß mit der Unschärferelation $\Delta\Omega \cdot \Delta J \geq \hbar$ der Drehimpuls unbestimmt ist. Eine weitere Symmetrieverletzung ist die unscharfe Teilchenzahl, eine unmittelbare Folge des Ansatzes für den HFB-Grundzustand (36).

Um nun zu physikalisch sinnvollen Aussagen zu kommen, wird die HFB-Funktion $|\phi\rangle$ auf den Unterraum der Funktionen mit scharfen Quantenzahlen J, N_p und N_n projiziert. Im folgenden werden die Protonen- bzw. Neutronenzahl N_p und N_n nur noch mit N bezeichnet. Operatoren, welche die Symmetrien wiederherstellen, sind der idempotente Drehimpulsprojektionsoperator von Peierls und Yoccoz, $\hat{P}_{JM}^{7,13,19,36}$, und der ebenfalls idempotente Teilchenzahlprojektionsoperator $\hat{Q}_N^{19,36}$. Beide Operatoren kommutieren mit dem Hamiltonoperator.

Die projizierten HFB-Zustände definieren die für die EGCM benötigten Überlappe (11). Im Raume der projizierten Funktionen haben sie die Form:

$$H_{JN}(\beta_1, \beta_2) = \langle \phi(\beta_2) | \hat{H} \hat{P}_{JM} \hat{Q}_N | \phi(\beta_1) \rangle$$

$$N_{JN}(\beta_1, \beta_2) = \langle \phi(\beta_2) | \hat{P}_{JM} \hat{Q}_N | \phi(\beta_1) \rangle$$

$$H_{JN}^j(\beta_1, \beta_2) = \langle \phi(\beta_2) | a_j a_{\bar{j}} \hat{H} \hat{P}_{JM} \hat{Q}_N | \phi(\beta_1) \rangle \quad (39)$$

$$N_{JN}^j(\beta_1, \beta_2) = \langle \phi(\beta_2) | a_j a_{\bar{j}} \hat{P}_{JM} \hat{Q}_N | \phi(\beta_1) \rangle$$

$$H_{JN}^{ij}(\beta_1, \beta_2) = \langle \phi(\beta_2) | a_j a_{\bar{j}} \hat{H} \hat{P}_{JM} \hat{Q}_N a_i^+ a_{\bar{i}}^+ | \phi(\beta_1) \rangle$$

$$N_{JN}^{ij}(\beta_1, \beta_2) = \langle \phi(\beta_2) | a_j a_{\bar{j}} \hat{P}_{JM} \hat{Q}_N a_i^+ a_{\bar{i}}^+ | \phi(\beta_1) \rangle$$

Es ist die Aufgabe der Projektionstheorie, solche Überlappe zu berechnen.

1. Teilchenzahlprojektion

Der Teilchenzahlprojektionsoperator $\hat{Q}_N$

$$\hat{Q}_N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\vartheta \exp(-i \frac{N}{2} \vartheta) \hat{S}(\vartheta) \quad (40)$$

projiziert den HFB-Zustand auf Komponenten mit vorgegebener Teilchenzahl (Protonen oder Neutronen) N . Die Eichtransformation $\hat{S}(\vartheta)$ ist definiert durch:

$$\hat{S}(\vartheta) c_k^+ \hat{S}(\vartheta)^{-1} = \exp(i \frac{\vartheta}{2}) c_k^+ \quad (41)$$

$$\hat{S}(\vartheta) = \exp(\frac{i}{2} \hat{N} \vartheta)$$

$\hat{N}$ ist der Teilchenzahloperator.

Zur praktischen Berechnung wird das Integral in (40) diskretisiert³⁶⁾.

$$\hat{Q}_N \approx \frac{1}{2\pi} \sum_{k=0}^{L-1} (\Delta\vartheta) e^{\frac{ik(\Delta\vartheta)}{2}} (\hat{N}-N)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{L} \sum_{k=0}^{L-1} e^{\frac{i k \pi}{L} (\hat{N}-N)} \\
 &= \frac{1}{L} \sum_{k=0}^{L-1} e^{\frac{i k \pi}{L} (\hat{N}-N)} \quad (42)
 \end{aligned}$$

Für $L=2$ werden die Komponenten mit der Teilchenzahl $N\pm 2$, $N\pm 6$, $N\pm 10$, $N\pm 14$... eliminiert, für $L=4$ zusätzlich die Komponenten mit $N\pm 4$, $N\pm 12$, $N\pm 20$... usw.

Der Nachteil des in (42) definierten Operators liegt darin, daß die später definierte Matrix

$$X_{12}(\beta, \vartheta) = A_1^T R^*(\beta) A_2^* + B_1^T R(\beta) B_2^* \exp(i\vartheta)$$

für $k = \frac{1}{2} L$ (L gerade) singular werden kann. Der leicht modifizierte Projektionsoperator¹⁹⁾

$$\hat{Q}_N = \frac{1}{L} \sum_{k=0}^{L-1} \exp(i\pi \frac{k+1/2}{L} (\hat{N}-N)) \quad (43)$$

behebt diesen Nachteil. Er ist dem Operator (42) äquivalent bis auf die Tatsache, daß er das Vorzeichen einiger verbleibender spurioser Komponenten ändert.

In Verbindung mit der Drehimpulsprojektion ist die Teilchenzahlprojektion deswegen von Bedeutung, weil der Erwartungswert des Teilchenzahloperators $\hat{N}$, der für die HFB-Grundzustände scharf ist, für die quasiteilchenangeregten Zustände und insbesondere für auf den Drehimpuls J projizierte Zustände nicht mehr scharf ist.

Die Güte der Projektion erkennt man an der errechneten Teilchenzahlschwankung für projizierte Zustände.

2. Drehimpulsprojektion

Der HFB-Grundzustand $|\phi\rangle$ kann nach Zuständen entwickelt werden, die auf guten Drehimpuls J projiziert wurden.

$$|\phi\rangle = \sum_{JM} a_{JM} |\phi_{JM}\rangle \quad \text{mit der Normierung}$$

$$\sum_{JM} |a_{JM}|^2 = 1 \quad (44)$$

Die Zustände $|\phi_{JM}\rangle$ erhält man durch Anwendung des Projektionsoperators $\hat{P}_{JM}$ auf $|\phi\rangle$. Die von Peierls und Yoccoz¹³⁾ vorgeschlagene explizite Darstellung von $\hat{P}_{JM}$ lautet:

$$\hat{P}_{JM} = \frac{2J+1}{8\pi^2} \sum_K \int d\Omega D_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) \quad (45)$$

$D_{MK}^J(\Omega)$ ist die Wigner'sche D-Funktion. Ω beschreibt die drei Eulerwinkel α, β, γ .

Der Rotationsoperator $\hat{R}(\Omega)$ und die Funktion $D_{MK}^J(\Omega)$ haben die Gestalt⁴²⁾:

$$\hat{R}(\Omega) = e^{i\alpha\hat{J}_z} e^{i\beta\hat{J}_y} e^{i\gamma\hat{J}_z} \quad (46)$$

$$D_{MK}^J(\Omega) = \langle JM | \hat{R}(\Omega) | JK \rangle \quad (47)$$

$\hat{P}_{JM}$ ist ein idempotenter, jedoch nicht hermitescher Operator.

Eine weitere Eigenschaft ist:

$$\hat{P}_{J'M'}^+ \hat{P}_{JM} = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \sum_K \hat{P}_{JK} \quad (48)$$

3. Überlapp

Die für die EGCM interessanten Funktionen sind solche, die gleich-

zeitig eine gute Teilchenzahl und einen guten Drehimpuls besitzen. Sie werden bezeichnet

$$|\phi_{JM}^N(\beta)\rangle = \hat{P}_{JM} \hat{Q}_N |\phi(\beta)\rangle \quad (49)$$

Diese Zustände gelten für verschiedene Werte von Generatorkoordinaten β_i (Deformation ...). Sie bilden die Basis des Raumes, in der die EGCM-Wellenfunktion $|\Psi_J\rangle$ aufgespannt wird.

Im folgenden beschränken wir uns auf axialsymmetrisch deformierte HFB-Zustände. Diese Einschränkung bewirkt, daß der Projektionsoperator $\hat{P}_{JM}$ eine einfache Form annimmt und hermitesch wird:

$$\hat{P}_{JM} \rightarrow \hat{P}_J = \frac{2J+1}{2} \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{00}^J(\beta) \hat{R}(\beta) \quad (50)$$

Außerdem sind dann die zueinander zeitumgekehrten Quasiteilchen-niveaus energetisch entartet und gleichermaßen besetzt.

Die Klein-d-Funktion $d_{00}^J(\beta)$ ist definiert:

$$d_{00}^J(\beta) = \langle J | e^{i\beta \hat{J}_y} | J \rangle \quad (51)$$

Mit diesen Vereinfachungen reduziert sich der Unterraum der drehimpulsprojizierten Funktionen auf den Teilraum der Zustände mit gradzahligem Spin und positiver Parität.

Mit $\hat{Q}_N$ und $\hat{P}_J$ kann man nun explizite Ausdrücke für die in (39) angegebenen Überlappmatrizen angeben. Für den Hamiltonüberlapp und die Normmatrix gilt:

$$\begin{aligned} & \langle \phi_{JM}^N(\beta_2) | \hat{H} | \phi_{JM}^N(\beta_1) \rangle \\ &= \int d\beta d_{00}^{J*}(\beta) \sin\vartheta \int d\vartheta \exp(-i \frac{N}{2} \vartheta) h_{12}(\beta, \vartheta) \end{aligned} \quad (52)$$

$$\langle \phi_{JM}^N(\beta_2) | \phi_{JM}^N(\beta_1) \rangle = \int d\beta d_{00}^{J*}(\beta) \sin\beta \int d\vartheta \exp(-i \frac{N}{2} \vartheta) n_{12}(\beta, \vartheta) \quad (53)$$

mit

$$h_{12}(\beta, \vartheta) = \langle \phi(\beta_2) | \hat{H} \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_1) \rangle \quad (54)$$

$$n_{12}(\beta, \vartheta) = \langle \phi(\beta_2) | \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_1) \rangle \quad (55)$$

Für $H^i(\beta_1, \beta_2)$, $N^i(\beta_1, \beta_2)$, $H^{ij}(\beta_1, \beta_2)$, $N^{ij}(\beta_1, \beta_2)$ gilt genau der gleiche Formalismus, so daß man sich ohne Einschränkung der Allgemeinheit nur auf die Ausdrücke (52) und (53) beschränken kann.

Ein expliziter Ausdruck für die unbekannten Größen $h_{12}(\beta, \vartheta)$ und $n_{12}(\beta, \vartheta)$ wird hergeleitet, indem man $|\phi(\beta_1)\rangle$ in BCS-Form schreibt und auf Teilchenoperatoren c_α^+ , c_α transformiert. Der gedrehte Zustand $\hat{R}(\beta)|\phi(\beta_1)\rangle$ soll dann die gleiche Form haben. Unter Einbeziehung der Eichtransformation und Anwendung der Transformationsgleichungen (35) folgt daraus³⁶⁾:

$$\begin{aligned} \frac{h_{12}(\beta, \vartheta)}{n_{12}(\beta, \vartheta)} &= \sum_{ik} T_{ik}(\rho_{12})_{ki} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ikmn} V_{imkn}(\rho_{12})_{nm} (\rho_{12})_{ki} \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{ikmn} V_{ikmn}(\kappa_{12})_{nm} (\sigma_{12})_{ki} \end{aligned} \quad (56)$$

mit

$$n_{12}(\beta, \vartheta) = [\det X_{12}(\beta, \vartheta)]^{1/2} \quad (57)$$

mit

$$(\rho_{12})_{ki} = \frac{\langle \phi(\beta_1) | c_i^\dagger c_k \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_2) \rangle}{\langle \phi(\beta_1) | \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_2) \rangle}$$

$$\rho_{12} = R(\beta) B_2^* \exp(i\vartheta) X_{12}^{-1}(\beta, \vartheta) B_1^T \quad (58)$$

$$(\kappa_{12})_{ki} = \frac{\langle \phi(\beta_1) | c_k c_i^\dagger \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_2) \rangle}{\langle \phi(\beta_1) | \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_2) \rangle}$$

$$\kappa_{12} = [R(\beta) B_2^* \exp(i\vartheta) X_{12}^{-1}(\beta, \vartheta) A_1^T]^T \quad (59)$$

$$(\sigma_{12})_{ki} = \frac{\langle \phi(\beta_1) | c_i^\dagger c_k^\dagger \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_2) \rangle}{\langle \phi(\beta_1) | \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_2) \rangle}$$

$$\sigma_{12} = R^*(\beta) A_2^* X_{12}^{-1}(\beta, \vartheta) B_1^T \quad (60)$$

und

$$X_{12}(\beta, \vartheta) = A_1^T R^*(\beta) A_2^* + B_1^T R(\beta) B_2^* \exp(i\vartheta) \quad (60)$$

Mit diesen Ausdrücken, die nur von den Entwicklungskoeffizienten A_{ik} und B_{ik} sowie von den Winkeln β und ϑ abhängen, können nun die Überlappmatrizen (52) und (53) berechnet werden.

Die einzige Schwierigkeit liegt noch in der Bestimmung des Vorzeichens der Wurzel in (57). Es wird festgelegt durch die Forderung, daß der Ausdruck

$$G(\beta, \vartheta) = \exp(-i \frac{N}{2} \vartheta) \langle \phi(\beta_1) | \hat{R}(\beta) \hat{S}(\vartheta) | \phi(\beta_2) \rangle \quad (62)$$

für $\beta = 0$ einen positiven Realteil besitzen soll, denn im HF-Fall wird der Ausdruck "+1".

Für $\beta \neq 0$ soll sich der Winkel zwischen $G(\beta, \vartheta)$ und der reellen Achse kontinuierlich ändern³⁶⁾.

Mit dem EGCM-Verfahren sollen auch Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen Zuständen mit vorgegebenem Drehimpuls berechnet werden. Dazu werden Matrixelemente der Form $\langle \phi_J^N(\beta_1) | \hat{T} | \phi_{J'}^N(\beta_2) \rangle$ benötigt. (siehe Gleichung (16)). Der Übergangsoperator $\hat{T}$ steht hier zwischen axialsymmetrischen drehimpuls- und teilchenzahlprojizierten HFB-Zuständen der Deformation β_1 und β_2 . Im Falle eines sphärischen Tensoroperators $\hat{T}(\lambda, \mu)$ lautet das reduzierte Matrixelement³⁶⁾:

$$\begin{aligned} T_{JJ'} &= \langle \phi_{J'}^N(\beta_1) | \hat{T}(\lambda) | \phi_J^N(\beta_2) \rangle \\ &= \frac{1}{N_{J'J}} \int_0^{2\pi} d\vartheta \exp(-i \frac{N}{2} \vartheta) \int_0^\pi d\beta \sin\beta \sum_{\mu} \begin{pmatrix} J' & \lambda & J \\ \mu & 0 & \mu - \mu \end{pmatrix} \\ &\quad d_{-\mu, 0}^J t_{\lambda\mu}(\beta, \vartheta) \end{aligned} \quad (63)$$

mit

$$\frac{1}{N_{J'J}} = \frac{(2J'+1)(2J+1)}{2(N_J N_{J'})^{1/2}} \quad (64)$$

$$N_J = \frac{2J+1}{2} \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{00}^J(\beta) \int_0^{2\pi} d\vartheta \exp(-i \frac{N}{2} \vartheta) n_{12}(\beta, \vartheta) \quad (65)$$

$$\frac{t_{\lambda\mu}(\beta, \vartheta)}{n_{12}(\beta, \vartheta)} = \sum_{ik} \langle i | \hat{T}(\lambda, \mu) | k \rangle (\rho_{12})_{ki}(\beta, \vartheta)$$

Kapitel IV

Numerik

Der Modellraum, in dem die HFB-Wellenfunktionen dargestellt werden, wird von den Eigenfunktionen des dreidimensionalen harmonischen Oszillators aufgespannt. Die Oszillatorlänge beträgt 2.08 fm für alle betrachteten Kerne. Da ^{56}Ni als Core abgespalten wurde, erstreckt sich der Basisraum über die $1p_{3/2}$, $0f_{5/2}$, $1p_{1/2}$ und $0g_{9/2}$ -Schalen. Da hier nur Kerne mit $N > Z$ behandelt werden sollen, ist es eine vernünftige Voraussetzung, nur $T=1$ Paarung jeweils für Protonen und Neutronen zuzulassen. Es hat sich nämlich gezeigt³³⁾, daß $T=0,1$ p-n-Paarung nur bei $N=Z$ und $N=Z+2$ Kernen einen wesentlichen Beitrag zur Bindungsenergie liefert und mit zunehmendem Neutronenüberschuß nur noch die $T=1$ n-n und p-p Paarung eine Rolle spielt. Ferner betrachten wir nur axialsymmetrisch deformierte HFB-Lösungen mit der Projektion $K=0$ auf die intrinsische Symmetrieachse. Bemerkenswert ist, daß die Axialsymmetrie der Startlösung bei der HFB-Iteration nicht zerstört wird. Den zu $|\phi_{JM}\rangle$ zeitumgekehrten Zustand definiert man als:

$$|\phi_{J\bar{M}}\rangle = \hat{T}|\phi_{JM}\rangle = (-)^{J-M} |\phi_{J-M}\rangle \quad (67)$$

Da die Parameter der hier verwendeten MSDI-Kraft³⁸⁾ von Glaudemans et al. ohne Berücksichtigung der Coulombeffekte an die Zn-Isotope angefitzt wurden⁴³⁾, lassen wir bei unseren Rechnungen diese Effekte ebenfalls außer Betracht. Weiterhin werden keine Schwerpunkt-Korrekturen durchgeführt, eine für den Massenbereich $A \approx 70$ sicherlich vernünftige Annahme.

In allen Rechnungen weicht der Isospinerwartungswert $\langle \phi_J^N | \hat{T}^2 | \phi_J^N \rangle$

bis auf höchstens 1 % vom Wert $T_z(T_z+1)$ ab, so daß ebenfalls auf eine Isospinprojektion verzichtet werden konnte.

Mit der Zeitumkehrsymmetrie, welche bewirkt, daß für die Dichtematrizen gilt³⁶⁾:

$$\rho_{\bar{i}\bar{k}}(\beta) = \rho_{ik}^*(\beta)$$

$$\rho_{i\bar{k}}(\beta) = -\rho_{\bar{i}k}^*(\beta) \quad (68)$$

$$\rho_{\bar{k}\bar{i}}(\beta, \vartheta) = \rho_{ki}(\beta, \vartheta) \quad (\text{für reelle Matrizen A und B})$$

und allen anderen erwähnten Einschränkungen wird der Rechenaufwand wesentlich vereinfacht.

Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung

Für die Verwendung einer reinen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung muß die Schroedingergleichung im gesamten Hilbertraum gelöst werden. Da man sich aber bei den verschiedenen Kernmodellen auf einen Teilraum beschränkt, muß die Wechselwirkung diesen veränderten Verhältnissen angepaßt werden. Man behilft sich mit der Konstruktion effektiver Wechselwirkungen, die den experimentellen Daten angepaßt werden. Eine solche effektive Wechselwirkung ist die relativ einfach strukturierte "Modified Surface Delta Interaction" (MSDI)³⁸⁾.

Die von Glaudemans et al. für die Zn-Isotope angefitzten Parameter sowie die Einteilchenenergien haben wir unverändert übernommen⁴³⁾.

Der Aufbau der MSDI mag durch folgende Überlegungen gerechtfertigt sein.

- a) Die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen soll ausschließlich an der Kernoberfläche stattfinden, da sie für die Nukleonen an der Kernoberfläche wegen der kleineren Relativgeschwindigkeit größer ist als für Nukleonen mit einer größeren Relativgeschwindigkeit im Inneren des Potentialtopfes.
- b) Wegen der sehr kurzen Reichweite der Restwechselwirkung wird die Wechselwirkung durch eine δ -Kraft approximiert.
- c) Einige experimentelle Daten (z.B. Bindungsenergie) können besser beschrieben werden, wenn ein isospinabhängiger Term hinzugefügt wird. Wegen der Ladungssymmetrie von Kernkräften muß dieser Term von t_z unabhängig sein und ist demzufolge ein Skalar.

Mit diesen Annahmen hat die MSDI folgende Form:

$$V_{ij} = -4\pi A_T \delta(\Omega_{ij}) \delta(r_i - R) \delta(r_j - R) + B (\tau_i \cdot \tau_j) \quad (69)$$

R ist der mittlere Kernradius

In Matrixdarstellung schreibt sich V_{ij} :

$$\begin{aligned} & \langle n_a l_a j_a n_b l_b j_b | v | n_c l_c j_c n_d l_d j_d \rangle_{JT} = \\ & = (-)^{j_a + j_b + j_c + j_d + n_a + n_b + n_c + n_d} \frac{A_T}{2(2J+1)} \left\{ \frac{(2j_a+1)(2j_b+1)(2j_c+1)(2j_d+1)}{(1+\delta_{ab})(1+\delta_{cd})} \right\}^{1/2} \\ & \times [(-)^{l_a + l_c + j_b + j_d} \langle j_a \frac{1}{2} j_b - \frac{1}{2} | J0 \rangle \langle j_c \frac{1}{2} j_d - \frac{1}{2} | J0 \rangle \\ & \times \{ 1 - (-)^{l_c + l_d + J + T} \} - \langle j_a \frac{1}{2} j_b \frac{1}{2} | J1 \rangle \langle j_c \frac{1}{2} j_d \frac{1}{2} | J1 \rangle \\ & \times \{ 1 + (-)^T \}] + [2T(T+1) - 3] B \delta_{ac} \delta_{bd} \end{aligned} \quad (70)$$

Die Stärke der Wechselwirkung wird durch die Parameter A_T und B

festgelegt, wobei A_T vom Gesamtisospin T abhängig ist. Diese Isospinabhängigkeit beschreibt indirekt die Abhängigkeit der Kernkräfte vom Gesamtspin S , denn bei einer δ -Kraft gibt der L -abhängige Term der Gesamtwellenfunktion nur Beiträge für symmetrische L -abhängige Komponenten. Somit ist die totale Wellenfunktion antisymmetrisch für einen antisymmetrischen $S=0$ -abhängigen Term in Verbindung mit einem symmetrischen $T=1$ -abhängigen Term, und umgekehrt ($\Psi_{\text{total}} = \Psi_L \otimes \Psi_S \otimes \Psi_T$). Für (S,T) sind also nur die Kombinationen $(0,1)$ oder $(1,0)$ möglich.

A_T und B haben die Werte⁴³⁾:

$$A_1 = 0.35$$

$$A_0 = 0.43$$

$$B = 0.33$$

Die Einteilchen-Energien lauten für die $1p_{3/2}$, $0p_{1/2}$, $1f_{5/2}$, $0g_{9/2}$ -Schalen: 0.0; 1.75; 2.20; 3.39 [MeV].

Kapitel V

Diskussion der Resultate

Wie in der Einleitung bereits erwähnt wurde, soll in dieser Arbeit die "Extended Generator Coordinate Method" (EGCM) insbesondere auf ^{72}Ge angewendet werden. Das Spektrum von ^{72}Ge weist keine ausgesprochenen phänomenologischen Züge auf, obwohl einige BE2-Übergänge von ihrer Größe her einen beträchtlichen Teil an kollektiver Anregung vermuten lassen. Vor allem zeichnet sich das Anregungsspektrum durch einen ungewöhnlich tief liegenden 0^+ -Zustand aus. Ein solcher 0^+ -Zustand liegt auch bei ^{90}Zr vor. Die beiden letzten Valenzprotonen von ^{90}Zr liegen auf den gleichen $p_{1/2}$ und $g_{9/2}$ -Niveaus wie die beiden letzten Valenzneutronen von ^{72}Ge . Bayman et al. (1959)⁴⁴⁾ haben bezüglich ^{90}Zr Schalenmodell-Rechnungen mit den Valenzprotonen durchgeführt. Ähnliche Rechnungen bezüglich der Neutronen für ^{72}Ge konnten jedoch die großen BE2-Übergänge nicht reproduzieren. Dies weist darauf hin, daß kollektive Anregungseffekte eben nicht vernachlässigt werden dürfen. Sie wurden von Castel et al. (1973)³⁰⁾ in einem halb-mikroskopischen Modell berücksichtigt. Er koppelte die beiden Valenzneutronen an die kollektiven Anregungen des ^{70}Ge -Cores und bezog ebenfalls Anregungen von den $p_{3/2}$ und $f_{5/2}$ -Schalen ein. Mit einem Zweiparameter-Fit konnte er das Kernspektrum und die Übergangsraten in guter Einstimmung mit dem Experiment berechnen. Die Bedeutung der Einteilchenfreiheitsgrade bei ^{72}Ge zusammen mit den kollektiven Anregungen legte es nahe, diesen Kern voll-mikroskopisch in einem EGCM-Verfahren durch Ankopplung von Quasiteilchenanregungen an die kollektive Bewegung zu beschreiben.

Die Basis unseres EGCM-Raumes wird von den auf guten Drehimpuls und scharfe Teilchenzahl projizierten HFB-Wellenfunktionen mit vorgegebener Deformation, sowie den ebenfalls symmetrieprojetzierten quasiteilchenangeregten HFB-Funktionen aufgespannt. In diesem Raum werden mittels Minimisierung des Energieerwartungswertes für jeden Drehimpuls mehrere Sätze von Entwicklungsparametern $f_{JN}(\beta)$ und $f_{JN}^i(\beta)$ (siehe Gl. (15)) ermittelt, die für jeden Energieerwartungswert des EGCM-Eigenwertproblems eine optimale Wellenfunktion liefern. Mit diesen Parametern ist die gesamte Wellenfunktion bestimmt.

Das EGCM-Verfahren wird ebenfalls bei den Kernen ^{74}Ge und ^{70}Zn angewendet; es soll untersucht werden, inwieweit die Ankopplung von Quasiteilchenfreiheitsgraden an die kollektive Bewegung für Kerne in der näheren Umgebung von ^{72}Ge noch von Bedeutung ist. Die gewonnenen Ergebnisse werden im folgenden referiert. Im wesentlichen sollen Bindungs- und Paarungsenergien der CHF-B-Zustände, quasiteilchenangeregte CHF-B-Zustände, die projizierten Bindungsenergien dieser Zustände, die EGCM-Anregungsspektren, die einzelnen Komponenten der gesamten EGCM-Wellenfunktion, sowie BE2-Werte für die niedrigsten Übergänge behandelt werden.

1. ^{72}Ge

Um eine Aussage über die Vibrationsfreiheitsgrade von ^{72}Ge zu machen, ist es zunächst erforderlich, die Abhängigkeit der gesamten Bindungsenergie von der Deformation β zu untersuchen. Zu diesem Zwecke wurden die CHF-B-Gleichungen (26) für einen gegebenen Satz von Deformationen im relevanten Bereich des Deformationsparameters $-0.1 \leq \beta \leq +0.1$ gelöst. Mit den hieraus für die verschie-

denen Werte β folgenden intrinsischen Bindungsenergien $\langle \phi(\beta) | \hat{H} | \phi(\beta) \rangle$ ist in Fig. 1 die intrinsische Energieoberfläche aufgetragen. Die Kurve weist ein ausgedehntes und sehr flaches Tal auf, das bei $\beta \approx \pm 0.07$ stark ansteigt. Um den Kern bis in den Bereich der Talflanken zu deformieren ist ein erheblicher Energieaufwand erforderlich, so daß der reelle Grundzustand weitgehend als eine Überlagerung von Zuständen in der Talsohle selbst zu beschreiben sein sollte; diese Zustände sind um das sphärische Minimum gelagert. Wegen des flachen Tales läßt sich der Kern hier nahezu ohne Energieverlust in die prolate und oblate Richtung deformieren, so daß es von dieser Kurve her nicht möglich ist, einen Zustand einer bestimmten Deformation zu bestimmen, der die wesentlichen Eigenschaften des Kerns erfaßt.

In Fig. 2 sind die Protonenpaarungsenergie, die Neutronenpaarungsenergie und die gesamte Paarungsenergie in Abhängigkeit von der Deformation β aufgetragen. Hier kann man feststellen, daß die Neutronenpaarung praktisch unabhängig ist von kleinen Deformationen, die Protonenpaarung hingegen mit zunehmender Deformation zunimmt. Diese Abhängigkeit von β schlägt sich dann ebenfalls in der gesamten Paarungsenergie nieder. Bei größeren Deformationen ($\beta \approx 0.05$) nimmt die Paarungsenergie stark ab. Diese ganze Abhängigkeit der Paarung von der Deformation ist eine Folge der Selbstkonsistenz der CHF-B-Lösungen, bei denen die Paarung (Δ) und die Deformation (β) keine unabhängigen Größen sind, sondern in selbstkonsistenter Weise korreliert sind.

Die Größe der berechneten Paarungsenergien (≈ -7 MeV) zeigt, daß es unbedingt erforderlich ist, mittels des HFB-Verfahrens auch Paarungsfreiheitsgrade mitzunehmen. Diese Voraussetzung wird von

den ebenfalls durchgeführten Hartree-Fock Rechnungen unterstützt, bei denen die gesamte Bindungsenergie durchwegs um 1 bis 3 MeV niedriger ist. Solch große Paarkorrelationen könnten allenfalls durch Überlagerung einer sehr großen Anzahl von 2Teilchen-2Loch angeregten HF-Slaterdeterminanten beschrieben werden, jedoch hat ein solches Vorgehen den Nachteil, daß der Rechenaufwand divergiert.

Die Energieoberfläche für die intrinsische Energie (Fig. 1) vermittelt einen ersten groben Überblick über das Verhältnis von Energie und Deformation, ist aber für eine eingehendere Besprechung ungeeignet, weil die HFB-Zustände der Forderung nach gutem Drehimpuls J und scharfer Teilchenzahl N nicht genügen. Deshalb werden die HFB-Wellenfunktionen auf Komponenten mit den entsprechenden Symmetrieeigenschaften projiziert. Die Bindungsenergien der projizierten Zustände $\langle \phi_{JN}(\beta) | \hat{H} | \phi_{JN}(\beta) \rangle$ sind ebenfalls in Fig. 1 aufgetragen. Sie wurden, genau wie die intrinsischen Energien, in Abhängigkeit von der Deformation β berechnet und zeigen zwei deutliche Minima, die für alle Spins bei $\beta \approx \pm 0.07$ liegen. Die projizierte $J=0$ Energieoberfläche geht durch das sphärische Minimum, da ein nicht deformierter Kern einen Spin $J=0$ hat. Die Energiekurven für $J>0$ zeigen für abnehmende Deformation ein divergierendes Verhalten. Dies rührt von dem bei $\beta=0$ verschwindenden Trägheitsmoment $\Theta_{\beta=0}$ her.

Die für eine bestimmte Deformation β gegebene intrinsische Energie ist wegen $|\phi(\beta)\rangle = \sum_{JN} a_{\beta}^{JN} |\phi_{JN}(\beta)\rangle$ gleich der Summe der über a_{β}^{JN} gewichteten projizierten Energien.

$$\langle \phi(\beta) | \hat{H} | \phi(\beta) \rangle = \sum_{JN} |a_{\beta}^{JN}|^2 \langle \phi_{JN}(\beta) | \hat{H} | \phi_{JN}(\beta) \rangle \quad (71)$$

$|\phi(\beta)\rangle$ sind die CHFB-Zustände, $|\phi_{JN}(\beta)\rangle$ sind die für die gleiche Deformation β auf Spin und Teilchenzahl projizierten CHFB-Funktionen.

Da die Koeffizienten a_{β}^{JN} insbesondere bei kleinen Deformationen stark von β abhängen, wird klar, daß die Minima der projizierten Energieoberflächen sich bei einer bestimmten Deformation einstellen, während die intrinsische Energieoberfläche kein ausgesprochenes Minimum aufweist. Insbesondere weicht die intrinsische Energie an der Stelle des prolaten projizierten Minimums bereits um etwa 0.4 MeV vom sphärischen Minimum im körperfesten System ab. Dies zeigt, daß im Falle ^{72}Ge eine Projektion nach der Variation zu keinen brauchbaren Ergebnissen führen würde, weil kein deutliches intrinsisches Energieminimum angegeben werden kann. Die in den projizierten Energiekurven enthaltene minimisierte Rotationsbande ist im ersten Spektrum (PHFB) der Fig. 4 aufgezichnet. Aus den Energieniveaus geht hervor, daß das projizierte Spektrum dem $J(J+1)$ -Gesetz des reinen Rotators nicht folgt. Der Grund dafür ist, daß ^{72}Ge nur sehr schwach deformiert ist (siehe Fig. 1).

Für das weitere Generatorkoordinaten-Verfahren ist es nun vernünftig und konsistent mit dem Minimierungsprinzip von solchen HFB-Zuständen auszugehen, deren projizierte Spektren ein energetisches Minimum aufweisen. Solche Minima liegen sowohl auf der prolaten als auch oblaten Seite vor (Fig. 1). Da die von einer GCM-Wellenfunktion, die viele Komponenten verschiedener Deformation enthält, beschriebenen Vibrationen bereits ausreichend gut durch eine Wellenfunktion, die eine Überlagerung nur eines prolaten und oblaten Zustandes ist, erfaßt werden²¹⁾, sollten auch

in diesem Fall die beiden projizierten Minima ausreichen, um die Vibrationsfreiheitsgrade zu erfassen.

Im zweiten Spektrum von Fig. 4 werden also die beiden durch die Projektion ausgezeichneten Punkte im GCM-Verfahren gemischt. Durch diese Vergrößerung des Raumes werden im Vergleich zum ersten Spektrum die ersten 0^+ und 2^+ Zustände bereits um etwa 0.15 bis 0.25 MeV abgesenkt, während die 4^+ und 6^+ Zustände kaum beeinflusst werden. Der erste angeregte 0^+ liegt im Vergleich zum Experiment^{45,46,47,48)} zu hoch. Da die beiden auf $J=0$ projizierten prolate/oblate-Zustände zu etwa 78 % überlappen, also sehr ähnliche Zustände sind, kann man nicht erwarten, einen tiefliegenden 0^+ zu erzeugen. Die Komponenten mit $J=2^+$ haben einen Überlapp von nur noch 45 %, so daß die beiden 2^+ -Zustände im Spektrum energetisch weniger weit auseinander liegen.

Die Hinzunahme von Punkten anderer Deformation verändert an den tiefliegenden Energien des bestehenden Spektrums (β -GCM) nichts, so daß im Rahmen der GCM die wesentlichen Vibrationsfreiheitsgrade für die Yrast-Zustände mit dem prolaten und oblaten Zustand weitgehend erfaßt sind.

Um den GCM-Raum weiter zu vergrößern, ist es also notwendig, andere Freiheitsgrade zu berücksichtigen. Dies geschieht durch Erzeugen von quasiteilchenangeregten HFB-Zuständen mittels des Operators $a_j^+ a_j^+$ auf die HFB-Zustände $\pi \prod_{i>0} a_i a_{\bar{i}} |0\rangle$. Auch hier sollte es eine gute Näherung sein, sich ausschließlich auf die beiden oben erwähnten Minima zu beschränken. Die Quasiteilchen-Niveaus für diese Zustände befinden sich in Fig. 3. Die Zahlen über den Niveaus geben an, mit wieviel Prozent Wahrscheinlichkeit der be-

treffende Zustand besetzt ist. Die Niveaus selbst wurden nur bis zur Energie 3 MeV eingezeichnet. Während bei den Protonen alle $g_{9/2}$ -Niveaus praktisch unbesetzt sind, kann man bei den Neutronen feststellen, daß die $g_{9/2}$ -Niveaus zum Teil erheblich bevölkert werden und teilweise unter den $f_{5/2}$ -Niveaus liegen. Dies ist keine besondere Eigenschaft der MSDI-Kraft, denn Rechnungen mit einer vom "Reid Soft Core" (RSC) und Yale-Potential hergeleiteten Wechselwirkung führen zu analogen Ergebnissen. Die MSDI-Kraft scheint allerdings eine vergleichsweise größere Quasiteilchen-Niveaudichte zu erzeugen. Die Einteilchenniveaus wurden nur qualitativ berechnet, jedoch scheint im Vergleich zum Nilsson-Modell sich die g-Schale schon bei sehr viel kleineren Deformationen mit den p-f-Schalen zu kreuzen.

Da wir uns nur für niedrigliegende Anregungsenergien interessieren, besteht ein erstes Auswahlkriterium für den Operator $a_j^+ a_{\bar{j}}^+$ darin, nur solche Zustände j und $\bar{j}$ zu betrachten, die in unmittelbarer Nähe der Fermikante E_F liegen. Die bezüglich dieser Niveaus angeregten Zustände werden auf den Drehimpuls J und Teilchenzahl N projiziert und die resultierenden Spektren verglichen. Dabei zeigt sich, daß einige Spektren in der Energie so hoch liegen, daß sie zur Beschreibung kleiner Anregungsenergien ausgeschlossen werden können. Die verbleibenden angeregten HFB-Zustände werden jeweils mit den beiden prol./obl.-deformierten Zuständen in einer EGCM-Wellenfunktion zusammengefaßt und der Hamiltonoperator diagonalisiert. Alle angeregten HFB-Funktionen, die die Energieniveaus der reinen prol./obl. Mischung nicht wesentlich absenken, können mit diesem weiteren Kriterium ebenfalls ausgeschlossen werden. Mit diesem Auswahlverfahren verblieben für die Niveaus j und $\bar{j}$

für die Protonen im prolaten Fall die $p_{3/2 \ 3/2}$ und $f_{5/2 \ 1/2}$, im oblaten Fall die $p_{3/2 \ 1/2}$ und $f_{5/2 \ 5/2}$ -Niveaus. Für die Neutronen war es nur das prolate $p_{1/2 \ 1/2}$ -Niveau, denn der betreffende Quasiteilchenzustand ist eigentlich eine Überlagerung der $p_{3/2 \ 1/2}$, $f_{5/2 \ 1/2}$ und $p_{1/2 \ 1/2}$ -Niveaus, so daß von einer Anregung dieses Zustandes ein größerer Einfluß auf die Anregungsenergien zu erwarten ist, als von den übrigen Quasiteilchenniveaus, die näher an der Fermikante liegen.

Insgesamt stehen nun mit den quasiteilchenangeregten Zuständen 7 Generatorpunkte zur Verfügung, die sukzessiv miteinander gemischt werden. Die Ergebnisse sind in Fig. 4 aufgetragen.

Die beiden ersten Spektren wurden bereits oben besprochen. Das dritte Spektrum ($2q_p(\text{oblate})$) entsteht durch Variation einer EGCM-Wellenfunktion, die ausschließlich aus Zuständen einer einzigen Deformation besteht. In diesem Falle handelt es sich um die oblate deformierten Zustände, weil hier bei der nicht angeregten Wellenfunktion die projizierten Minima im Vergleich zum prolaten Fall durchweg etwas tiefer liegen (siehe Fig. 1). Dennoch liegen im Verhältnis zur reinen prolate/oblate Mischung alle Energieniveaus höher, obwohl der Raum dieser Wellenfunktion von 3 Zuständen aufgespannt wird. Eine rein oblate Mischung, deren Komponenten sich auf den HFB-Zustand mit den absolut niedrigsten projizierten Energien beziehen, reicht somit nicht aus, um alle wichtigen Freiheitsgrade genügend zu beschreiben. Deshalb werden in einem nächsten Schritt zu den Protonen-Freiheitsgraden (prol. und obl.) die Vibrationsfreiheitsgrade durch Mitnahme der nicht angeregten prolate/oblate Minima hinzugefügt. Das sich ergebende Spektrum ist das 4. Spektrum der Fig. 4. Hier sieht man, daß im

Vergleich zu den vorherigen Spektren alle Energien abgesenkt werden und insbesondere liegt der zweite 0^+ -Zustand um etwa 1.3 MeV tiefer und in Einstimmung mit dem Experiment unter dem ersten 2^+ -Zustand. Das vorletzte Spektrum schließt zusätzlich den einzigen wegen des obigen Auswahlkriteriums wichtigen Neutronenfreiheitsgrad ein, der den dritten 0^+ -Zustand etwas absenkt, die übrigen Niveaus jedoch nahezu unverändert läßt. Dieses Spektrum wird durch die totale EGCM-Wellenfunktion (7 Generatorpunkte) bestimmt. Zu einer näheren Analyse dieser Wellenfunktion werden in der folgenden Tabelle für die zwei ersten 0^+ Zustände die Wahrscheinlichkeiten angegeben, mit der die einzelnen Komponenten beteiligt sind (siehe Gl. (4) und Gl. (5)).

	P	O	P(P1) ($p_{\frac{3}{2}} \frac{3}{2}$)	O(P1) ($p_{\frac{3}{2}} \frac{1}{2}$)	P(P2) ($f_{\frac{5}{2}} \frac{1}{2}$)	O(P2) ($f_{\frac{5}{2}} \frac{5}{2}$)	P(N5) ($p_{\frac{1}{2}} \frac{1}{2}$)
0_1^+ [%]	46.0	52.0	0.01	0.9	0.01	1.2	0.0
0_2^+ [%]	2.6	11.5	33.2	7.8	30.3	6.0	8.7

P = prolate

O = oblate

P1 = Protonen-Quasiteilchen-Niveau, das der Fermikante am nächsten liegt usw.

N1 = Neutronen-Quasiteilchen-Niveau, das der Fermikante am nächsten liegt usw.

Aus der Tabelle geht hervor, daß in der Grundzustandswellenfunktion $\Psi_{J=0_1^+}$ alle angeregten Komponenten $|\phi^j(\beta)\rangle$ mit weniger als 1.3 % enthalten sind. Insbesondere liefert der Neutronenzustand (N5), bei dem der Energiegap für die Quasiteilchen vergleichsweise

groß ist (Fig. 3), keinen Beitrag. Dieses Verhalten ändert sich für den tiefliegenden zweiten O^+ -Zustand. Hier verringert sich der Beitrag der einfachen prolatischen und oblaten Zustände zu Gunsten der angeregten Zustände. Der Hauptbeitrag kommt nun von den beiden protonenangeregten prolatischen Zuständen, die sich in den EGCM-Rechnungen als verantwortlich für den tiefliegenden zweiten O^+ -Zustand erwiesen haben.

Mit 8.7 % ist der Neutronenfreiheitsgrad für diesen O_2^+ -Zustand doch nicht ganz zu vernachlässigen und bei einem genaueren Vergleich der beiden letzten berechneten Spektren kann man feststellen, daß der O_2^+ -Zustand durch diesen Freiheitsgrad um einen, wenn auch geringen, so doch sichtbaren Betrag abgesenkt wird. Besondere Bedeutung kommt dem Neutronenfreiheitsgrad beim vierten O^+ -Zustand zu, wo er nicht weniger als 56 % der gesamten Wellenfunktion für sich beansprucht.

Als wichtigstes Ergebnis kann festgehalten werden:

- a) Die Yrast-Bande wird bereits weitgehend durch eine reine prolatische/oblate Mischung erzeugt; die wesentlichen Vibrationsfreiheitsgrade werden erfaßt.
 - b) Variation einer EGCM-Wellenfunktion, die nur von (angeregten und nicht angeregten) Zuständen einer Deformation aufgespannt wird, reicht nicht aus, die Yrast-Bande und den tiefliegenden angeregten O^+ -Zustand zu beschreiben.
 - c) Der tiefliegende angeregte O^+ -Zustand wird gleichzeitig durch die Vibrationsfreiheitsgrade und die Proton-Quasiteilchen-Freiheitsgrade in der Nähe der Fermikante beschrieben.
- Die Neutronenfreiheitsgrade sind für die niedrigen Anregungsenergien von geringerer Bedeutung.

d) Vergleicht man das Spektrum der totalen EGCM-Wellenfunktion mit dem experimentellen Spektrum (letzte Spalte der Fig. 4), so kann man feststellen, daß im wesentlichen alle Energieniveaus in der richtigen Reihenfolge berechnet wurden. Für die niedrigen Energien weichen sie zwischen 25 bis 33 % von den gemessenen Werten ab, bei den höheren Energien ist die Übereinstimmung besser. Durch Multiplikation mit einem gemeinsamen Faktor könnte die allgemeine Übereinstimmung für niedrige Energien wesentlich verbessert werden.

Die Diskrepanz der absoluten Anregungsenergien mit dem Experiment mag von der Wahl des effektiven Hamiltonoperators herrühren. Für eine parameterfreie mikroskopische Beschreibung, deren Bestreben in erster Linie das Erlangen eines allgemeinen Verständnisses der Vorgänge im Kerninneren ist, kann die Übereinstimmung dennoch als recht gut angesehen werden. So liegt der Schwerpunkt unserer Berechnungen vor allem darauf, zu verstehen, inwieweit die Vibrationsfreiheitsgrade für die kollektiven Anregungen wichtig sind und durch welche Prozesse ein solch tiefliegender 0^+ -Zustand, wie ihn ^{72}Ge aufweist, zustande kommt.

2. ^{70}Zn

Wegen der Vergleichsmöglichkeiten mit Schalenmodellrechnungen⁴³⁾ soll nun ^{70}Zn behandelt werden. Die numerische Durchführung entspricht der für ^{72}Ge , so daß sich ihre detaillierte Besprechung erübrigt.

^{70}Zn weist genau wie ^{72}Ge ein sehr flaches intrinsisches Energietal auf (Fig. 5), das allerdings schon bei $\beta \approx \pm 0.05$ stark ansteigt,

so daß ^{70}Zn insgesamt etwas weniger stark "deformiert" ist als ^{72}Ge . Die weitgehende Unabhängigkeit der intrinsischen Bindungsenergien von kleinen Deformationen macht auch hier das Verfahren der Projektion vor der Variation unbedingt notwendig.

Der Verlauf der intrinsischen Paarungsenergien in Abhängigkeit von der Deformation β ist in Figur 6 dargestellt. Die Protonen sind besonders stark bei verschwindender Deformation gepaart, die Neutronenpaarung wiederum ist praktisch unabhängig von kleinen Deformationen, so daß sich für die gesamte Paarungsenergie ein durch die Protonen bedingtes ausgeprägtes Maximum bei $\beta=0$ ergibt. Bei großen oblaten Deformationen nimmt die Protonenpaarung wegen der größeren Quasiteilchen-Niveaudichte wieder etwas zu.

Die Spin- und Teilchenzahlprojektion ergibt für die projizierten Energien (Fig. 5) zwei Minima, die für alle Spins bei $\beta \approx -0.04$ und $\beta \approx +0.06$ liegen. Das minimisierte projizierte Rotationsspektrum (PHFB) ist das erste Spektrum der Figur 7. Die Energieverhältnisse des 4^+ zum 2^+ und des 6^+ zum 2^+ zeigen, daß das projizierte Spektrum dieses schwach deformierten Kerns nicht vom phänomenologischen Rotationsmodell reproduziert werden kann.

Das bei ^{72}Ge beschriebene Auswahlverfahren zur Bestimmung der wichtigsten quasiteilchenangeregten HFB-Zustände zeigt, daß in den Quasiteilchenspektren der durch die projizierten Minima ausgezeichneten CHFb-Wellenfunktionen vier Quasiteilchen-Niveaus wichtig sind. Das projizierte Spektrum eines relevanten Neutronen-Quasiteilchen angeregten CHFb-Zustandes befindet sich in der zweiten Spalte der Figur 7 (P2qp). Es ist bemerkenswert, daß bei

diesem Quasiteilchen-Zustand die Energieniveaus nicht nach ansteigenden J-Werten geordnet sind und daß insbesondere alle niedrigen Drehimpulse relativ hoch liegen, während die hohen Spins (6^+ , 8^+ , 10^+) relativ niedrig liegen. Der Einfluß besonders des sehr tiefliegenden 8^+ -Zustandes wird sich später im Spektrum der totalen EGCM-Wellenfunktion zeigen.

Mit insgesamt 6 Generatorpunkten wurden nun folgende GCM-Rechnungen durchgeführt:

Eine reine prolate/oblate Mischung, dessen Energiespektrum (β -GCM) sich in der 3. Spalte der Figur 7 befindet. Da eine zusätzliche Generatorfunktion anderer Deformation die niedrigen Energien des bestehenden Spektrums (β -GCM) kaum verändert, kann man sich zur Beschreibung der Vibrationsfreiheitsgrade in guter Näherung auf diese beiden prolate/oblate-deformierten Wellenfunktionen beschränken. In diesem Spektrum liegt der zweite 0^+ -Zustand energetisch noch sehr hoch. Der Grund hierfür kann darin bestehen, daß die auf $J=0^+$ projizierten HFB-Komponenten einen 90 %-Überlapp aufweisen, so daß im Vergleich zum minimisierten Spektrum (PHFB) für $J=0^+$ keine zusätzliche wichtige Information zu erwarten ist. Die Yrast-Bande selbst bleibt fast unberührt. Im folgenden Spektrum (Fig. 7, β -GCM+2qp (proton)) wurde die GCM-Wellenfunktion um zwei Protonen-Quasiteilchen-Wellenfunktionen erweitert. Diese zusätzlichen Freiheitsgrade ändern die allgemeine Form des vorherigen Spektrums (β -GCM) nicht, nur werden alle Niveaus um einen geringen Energiebetrag abgesenkt, weil die Dimension des GCM-Raums vergrößert wurde. Jedoch reichen die Vibrations- und Protonenfreiheitsgrade allein noch nicht aus, um insbesondere den zweiten 0^+ -Zustand (Exp) und den 8_1^+ -Zustand (SM),

der in unseren bisherigen Rechnungen noch bei 5.8 MeV liegt, an die richtigen Stellen zu bringen.

Ein tiefliegender 8^+ -Zustand lag aber bereits im projizierten Spektrum eines Neutronen-Quasiteilchen-Zustandes vor (Fig. 7, P2qp), so daß nun in die EGCM-Wellenfunktion mit diesem Zustand insgesamt zwei neutronenangeregte Wellenfunktionen einbezogen werden. Das Ergebnis dieser totalen EGCM-Rechnung zeigt sich im 5. Spektrum von Fig. 7 (β -GCM+2qp). Hier sind der erste angeregte 0^+ -Zustand um rund 1 MeV, der 8_1^+ -Zustand sogar um gut 2.5 MeV weiter abgesenkt worden. Dieses Verhalten spiegelt sich in der Analyse der totalen EGCM-Wellenfunktion wieder, denn für den zweiten 0^+ tragen die "Neutronen-Komponenten" etwa 75 % der gesamten Wellenfunktion, beim ersten 8^+ sind es praktisch 100 %.

In einem abschließenden Vergleich der drei letzten Spektren (Fig. 7) kann festgestellt werden, daß das EGCM-Spektrum qualitativ recht gut mit einer Schalenmodell-Rechnung⁴³⁾ für ^{70}Zn (SM) und dem Experiment⁴³⁾ (Exp) übereinstimmt. Sowohl der tiefliegende angeregte 0^+ -Zustand als auch der 8_1^+ -Zustand wurden im wesentlichen durch die Neutronenfreiheitsgrade beschrieben. Mit einem gemeinsamen "Scalingfaktor" könnte eine mit dem Experiment bis auf wenige % gute Übereinstimmung der Anregungsenergien erreicht werden; nur die angeregten 0^+ -Zustände liegen auch in diesem Fall durchweg um etwa 0.5 MeV zu hoch, so daß gerade für diese Zustände vermutlich noch nicht alle wichtigen Freiheitsgrade voll erfaßt sind.

3. ^{74}Ge

Die Untersuchung der intrinsischen Energieoberfläche (Fig. 8) und der Paarungsenergien (Fig. 9) in Abhängigkeit von der Deformation β führt zu ähnlichen Ergebnissen, wie bei ^{72}Ge und ^{70}Zn . ^{74}Ge erweist sich ebenfalls als ein sehr weicher, gegen Deformationen instabiler Kern, was in der flachen intrinsischen Energiekurve (Fig. 8) zum Ausdruck kommt. Die Abhängigkeit der Protonenpaarungsenergie und die Größe der gesamten Paarungsenergie zeigt wieder einmal, daß für diesen Massenbereich das selbstkonsistente HFB-Verfahren in jedem Falle notwendig ist; die HF-Näherung wäre hier nicht brauchbar.

In erster Linie interessieren uns wiederum die in Fig. 8 aufgetragenen projizierten Energieflächen. Die Minima für $J=0^+$ bei $\beta \approx -0.06$ und $\beta \approx +0.05$ zeichnen die beiden HFB-Zustände aus, welche in den folgenden GCM- und EGCM-Rechnungen benutzt werden sollen. Allerdings weichen die oblaten Minima für den 6^+ und 8^+ bereits um etwa 0.2 bis 0.5 MeV von den entsprechenden Energiewerten bei $\beta = -0.06$ ab, jedoch wird sich im folgenden herausstellen, daß dies keine allzu große Einschränkung des Auswahlverfahrens für den 6^+ und 8^+ -Zustand ist. Betrachtet man sich nämlich das projizierte Spektrum eines neutronangeregten Zustandes (Fig. 10, P2qp) so zeigt sich, daß zwar der 0^+ , 2^+ und 4^+ im Vergleich zum minimierten projizierten Spektrum (Fig. 10, PHFB) sehr viel höher liegen, so daß von diesem Quasiteilchenzustand kein Einfluß auf die niedrigen Drehimpulse zu erwarten ist, jedoch der 6^+ und 8^+ niedriger liegen als im minimierten Spektrum (PHFB), also eine EGCM-Wellenfunktion, die diesen Quasiteilchenzustand enthält, den 6^+ und 8^+ energetisch recht tief reproduzieren wird. Die minimierten

sierte Rotationsbande (Fig. 10, PHFB) selbst zeigt deutlich, daß ^{74}Ge ebenfalls nicht als reiner Rotator verstanden werden kann.

Die prolate/oblate GCM-Mischung (Fig. 10, β -GCM) ändert an diesem Spektrum nicht sehr viel. Da ein zusätzlicher Punkt anderer Deformation keine weitere Information liefert, sollen nun als weiterer Freiheitsgrad angeregte HFB-Zustände in die GCM-Wellenfunktion eingehen.

Das 4. Spektrum der Fig. 10 (β -GCM+2qp(proton)) enthält die Vibrationsfreiheitsgrade und alle wichtigen Protonen-Quasiteilchen-Freiheitsgrade. Hier sind für den zweiten 0^+ -Zustand, der um rund 1.2 MeV abgesenkt wurde, zu 99 % Komponenten mit den Protonen-Quasiteilchen verantwortlich. Das zweite 4^+ -Niveau wird nur um etwa 0.5 MeV nach unten geschoben. Alle übrigen Zustände bleiben weitgehend unverändert.

Im vorletzten Spektrum (Fig. 10, β -GCM+2qp) wurde zusätzlich eine neutronenangeregte Generatorwellenfunktion eingeschlossen (totale Wellenfunktion). Die niedrigsten Niveaus blieben dabei im Vergleich zum vorherigen Spektrum (β -GCM+2qp(proton)) praktisch unverändert; ein Einfluß machte sich nur noch beim dritten 0^+ und 4^+ , beim ersten 6^+ und beim vierten 0^+ bemerkbar. Für diese Zustände ist der Anteil der neutronenangeregten Komponenten verhältnismäßig groß.

Der Vergleich dieses Spektrums mit dem Experiment^{45,46,48)} (Fig. 10) sieht weniger gut aus, als es bei den beiden anderen Kernen der Fall war. Alle niedrigen Energien liegen im Mittel doppelt so hoch wie die experimentell gemessenen Werte. Außerdem wird die Reihenfolge der Niveaus nicht reproduziert. Dies läßt die Vermutung aufkommen, daß mit den gewählten Quasiteilchenfrei-

heitsgraden und Vibrationsfreiheitsgraden noch nicht alles getan ist, um den Kern vernünftig zu beschreiben. Eine plausible Möglichkeit jedoch besteht darin, daß die für die Zn-Isotope gefitteten MSDI-Parameter für diesen Massenbereich nicht mehr allzu gut sind. Diese Vermutung wird durch die Tatsache unterstützt, daß die "Scaling"-Faktoren mit wachsendem Abstand zur Massenzahl $A=70$ immer kleiner werden. Die "Scaling"-Faktoren sind so definiert, daß bei Multiplikation mit den errechneten niedrigliegenden Energieniveaus eine mit dem Experiment allgemein gute Übereinstimmung folgt. Für ^{70}Zn betrug der Faktor etwa 0.8, bei ^{72}Ge ist es bereits 0.7 und bei ^{74}Ge , wo nun die $g_{9/2}$ -Schale für die Besetzung der Neutronen unbedingt erforderlich ist, sogar 0.5. Während bei ^{70}Zn und ^{72}Ge die $g_{9/2}$ -Zustände weit von der Fermikante weitgehend unbesetzt sind, zeichnet sich bei ^{74}Ge bei diesen Zuständen eine erhöhte Besetzungswahrscheinlichkeit heraus. Gerade diese Effekte werden aber von den Parametern A_T und B der MSDI-Kraft wahrscheinlich nicht mehr berücksichtigt, wodurch sich auch der große Unterschied der "Scaling"-Faktoren für ^{70}Zn und ^{72}Ge einerseits und für ^{74}Ge andererseits erklärt.

Ferner unterliegen die HFB-Wellenfunktionen der Einschränkung auf Axialsymmetrie, die, selbst wenn sie für ^{72}Ge und ^{70}Zn gut war, für ^{74}Ge keine gute Approximation mehr sein muß. Triaxiale Deformationen sind möglich, konnten aber aus numerischen Gründen nicht berücksichtigt werden.

Ebenfalls nicht untersucht wurde der Einfluß von mehr als 2-Quasiteilchen-Anregungen.

Der Hauptanteil der Diskrepanz zwischen dem theoretischen und

experimentellen Spektrum wird vermutlich von den oben angeführten Unzulänglichkeiten des effektiven Hamiltonoperators getragen.

4. BE2-Werte

Die BE2-Werte sind über den Quadrupoloperator $\sum_i^Z r_i^2 Y_{2\mu}(\Omega_i)$ und mit Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems^{39,40)} definiert:

$$\begin{aligned} B(E2; J_i \rightarrow J_f) &= \frac{1}{2J_i+1} \sum_{M_i M_f} |\langle \Psi_{J_i M_i} | \sum_i^Z r_i^2 Y_{2\mu}(\Omega_i) | \Psi_{J_f M_f} \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{5} \frac{1}{2J_i+1} |\langle \Psi_{J_i} || \sum_i^Z r_i^2 Y_{20}(\Omega_i) || \Psi_{J_f} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (72)$$

$|\Psi_{J_i}\rangle$ sind die EGCM-Wellenfunktionen mit vorgegebenem Drehimpuls J_i . $\langle \Psi_{J_i} || \sum_i^Z r_i^2 Y_{20}(\Omega_i) || \Psi_{J_f} \rangle$ ist das nach Edmonds⁴⁰⁾ definierte reduzierte Matrixelement.

Einsetzen der EGCM-Wellenfunktion (15) gibt für dieses reduzierte Matrixelement:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{J_i} || \hat{Q}_2 || \Psi_{J_f} \rangle &= \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{J_i N}^*(\beta_1) f_{J_f N}(\beta_2) \langle \phi_{J_i N}(\beta_1) | \hat{Q}_2 | \phi_{J_f N}(\beta_2) \rangle \\ &+ \sum_i \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{J_i N}^{i*}(\beta_1) f_{J_f N}(\beta_2) \langle \phi_{J_i N}^i(\beta_1) | \hat{Q}_2 | \phi_{J_f N}(\beta_2) \rangle \\ &+ \sum_j \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{J_i N}^*(\beta_1) f_{J_f N}^j(\beta_2) \langle \phi_{J_i N}(\beta_1) | \hat{Q}_2 | \phi_{J_f N}^j(\beta_2) \rangle \\ &+ \sum_{ij} \iint d\beta_1 d\beta_2 f_{J_i N}^{i*}(\beta_1) f_{J_f N}^j(\beta_2) \langle \phi_{J_i N}^i(\beta_1) | \hat{Q}_2 | \phi_{J_f N}^j(\beta_2) \rangle \end{aligned} \quad (73)$$

Dabei ist $\hat{Q}_2 = \sum_i^Z r_i^2 Y_{20}(\Omega_i)$.

Mit dem expliziten Ausdruck für die einzelnen Überlappfunktionen (Gl. (63)) kann der BE2-Wert in Abhängigkeit von den Koeffizien-

ten $f_{JN}(\beta)$, $f_{JN}^i(\beta)$ ausgerechnet werden.

Um nun aber die experimentellen Ergebnisse in einem endlich dimensionalen Modellraum reproduzieren zu können, ist es erforderlich, einen effektiven Übergangsoperator zu wählen, d.h. man führt einen Satz von effektiven Ladungen⁴⁹⁾ Δe_n und Δe_p ein, die so gewählt werden, daß der errechnete BE2-Wert für alle Übergänge möglichst gut mit dem Experiment übereinstimmt. Mit diesen effektiven Ladungen lautet der Operator:

$$\hat{Q}_2^{\text{eff}} = (1 + \Delta e_p) \sum_i^P r_i^2 Y_{20}(\Omega_i) + \Delta e_n \sum_i^N r_i^2 Y_{20}(\Omega_i) \quad (74)$$

Der erste Term summiert über alle Protonen, der zweite Term über alle Neutronen.

Die effektiven Ladungen sowie die sich hieraus ergebenden BE2-Übergänge sind für ^{72}Ge in Tabelle 1 aufgelistet. Δe_p und Δe_n wurden derart angepaßt, daß gleichzeitig die Übergänge $2_1^+ \rightarrow 0_1^+$, $2_2^+ \rightarrow 0_1^+$ und $2_2^+ \rightarrow 2_1^+$ für ^{72}Ge sowie der einzige uns bekannte Übergang BE2 ($2_1^+ \rightarrow 0_1^+$) = $320 \pm 28 \text{ e}^2 \text{ fm}^4$ von ^{70}Zn in weitgehender Übereinstimmung mit dem Experiment liegen. Die ermittelten Werte für die effektiven Ladungen lauten $\Delta e_p = 0.8$ und $\Delta e_n = 0.9$.

Besonders auffällig ist bei ^{72}Ge der $2_1^+ \rightarrow 0_2^+$ -Übergang. Obwohl ihm in verschiedenen Messungen noch kein einheitlicher Wert zugeordnet werden konnte, scheint er von merklich kollektivem Charakter zu sein. In unseren Rechnungen konnten wir diese Kollektivität unter Annahme vernünftiger effektiver Ladungen nicht reproduzieren.

Eine genauere Analyse der einzelnen Komponenten in (73) für den $2_1^+ \rightarrow 0_2^+$ Übergang zeigt, daß die größten absoluten Werte durch die

β -Freiheitsgrade bestimmt werden, diese sich jedoch wegen der verschiedenen Vorzeichen größtenteils gegeneinander wegheben. Nur die Quasiteilchenkomponenten scheinen sich kohärenter zu überlagern, allerdings sind hier die absoluten Werte um einen Faktor 0.1 bis 0.01 kleiner als bei den β -Komponenten.

Die Bedeutung der Quasiteilchenfreiheitsgrade kommt ebenfalls zum Ausdruck bei einer Stabilitätsuntersuchung aller BE2-Werte durch sukzessive Vergrößerung des EGCM-Raums. Das Ergebnis ist, daß bis auf den $2_1^+ \rightarrow 0_2^+$ -Übergang alle Werte weitgehend stabil bleiben und nahezu unabhängig von den Quasiteilchenkomponenten sind. So ändern sich z.B. die Werte für den $2_1^+ \rightarrow 0_1^+$ Übergang nur um etwa 1 %, da sich hier die β -Komponenten in (73), die alle absolut relativ groß sind, kohärent überlagern, während die Quasiteilchenkomponenten klein sind und sich gegeneinander wegheben. Nur beim $2_1^+ \rightarrow 0_2^+$ Übergang macht sich ein Trend zu langsam anwachsenden Werten mit zunehmenden Quasiteilchentermen in der EGCM-Wellenfunktion bemerkbar. Die Änderung betrug bis zu etwa 300 %.

Ein weiterer Vergleich aller BE2-Werte sowohl für ^{70}Zn (Tabelle 2) als auch ^{72}Ge (Tabelle 1) zeigt, daß allgemein die Intrabanden-Übergänge $J_\alpha \rightarrow (J-2)_\alpha$ wesentlich kollektiver sind als die Interbanden-Übergänge $J_\alpha \rightarrow (J-2)_{\alpha'}$; ($\alpha \neq \alpha'$).

Kapitel VI

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde versucht, in einer mikroskopischen Beschreibung Kerneigenschaften durch Ankoppeln von Einteilchenfreiheitsgraden an die kollektive Bewegung der Nukleonen zu untersuchen. Dabei sollte nicht wie etwa beim Schalenmodell allzu viel an Anschaulichkeit, wie sie bei phänomenologisch kollektiven Modellen vorliegt, eingebüßt werden, noch sollte die mikroskopische Betrachtungsweise eingeschränkt werden. Unter solchen Voraussetzungen sollte es dann möglich sein, aus den gewonnenen Ergebnissen Schlüsse bezüglich Kernstruktur und Kerndynamik zu ziehen, wobei die Kerndynamik nach kollektiven Prozessen und Einteilchenprozessen analysiert werden kann.

Zur mikroskopischen Beschreibung rein kollektiver Effekte wurde bereits vor längerer Zeit von Hill und Wheeler das Generator-Koordinaten-Verfahren (GCM) eingeführt, bei dem durch Überlagerung verschiedener mikroskopischer Wellenfunktionen eine kollektive Bewegung der Nukleonen erzeugt werden kann. Ein solches Verfahren beinhaltet bereits in erheblichem Maße die gewünschte Anschaulichkeit, jedoch werden die Einteilcheneffekte noch völlig außer Acht gelassen. Sie können durch eine Erweiterung des GCM-Ansatzes, d.h. durch Einbeziehen zusätzlicher Generatorfunktionen, die Ein- oder Mehrteilchen angeregte Zustände beschreiben, ohne Einschränkung des bisherigen GCM-Lösungsverfahrens in einem erweiterten GCM-Formalismus (EGCM) nun ebenfalls erfaßt werden. Die Wahl der einzelnen Generatorfunktionen hängt nach wie vor auch hier von den physikalischen Eigenschaften der Kerne ab. Die

Vorteile der EGCM bestehen darin, daß man sich durch die Art der Generatorkoordinaten gezielt verschiedene kollektive oder Einteilchen-Anregungstypen ansehen kann, daß der Rechenaufwand in Grenzen gehalten werden kann und nicht zuletzt, daß diese Methode einen sehr ausgedehnten Anwendungsbereich findet.

Kerne, die sich insbesondere dieser Betrachtungsweise anbieten könnten, sind solche, die von ihrer Nukleonenzahl her vom Schalenmodell nicht mehr ohne allzu große Einschränkung der Konfigurationen erfaßt werden können und die sich wegen ihrer Eigenschaften durch kollektive phänomenologische Modelle allein nicht mehr vernünftig beschreiben lassen.

Das Konzept der erweiterten GCM wurde deshalb auf ^{72}Ge und benachbarte Kerne (^{70}Zn , ^{74}Ge) angewandt; ^{72}Ge vor allem darum, weil dieser Kern einen ungewöhnlich tiefliegenden ersten angeregten 0^+ -Zustand besitzt und bisher noch von keinem voll mikroskopischen Modell befriedigend erklärt werden konnte. Jedoch ist in einem halbmikroskopischen Verfahren bereits die Bedeutung einer Synthese von kollektiven und Einteilchenfreiheitsgraden für ^{72}Ge herausgestellt worden.

In Anbetracht der hohen Paarungsenergien bei den untersuchten Kernen wurden selbstkonsistente axialsymmetrische HFB-Generatorfunktionen gegebener Deformation, die zur Wiederherstellung der Symmetrien auf guten Drehimpuls und Teilchenzahl projiziert wurden, für die EGCM-Wellenfunktion gewählt. Die angeregten HFB-Komponenten entstanden durch Erzeugen von zueinander zeitumgekehrten Quasiteilchen in der Nähe der Fermikante.

Alle Rechnungen benutzten die "Modified Surface Delta Interaction"

(MSDI) Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung. Die Basis des HFB-Raums sind nach Abseparieren eines ^{56}Ni -Cores die gesamten $1p_{3/2}$, $0f_{5/2}$, $1p_{1/2}$, $0g_{9/2}$ -Schalen und es wurde nur T=1 Paarung für jeweils Protonen und Neutronen zugelassen.

Die Untersuchung der intrinsischen Energieoberflächen ergab für alle Kerne eine weitgehende Unabhängigkeit von kleinen Deformationen. Die Energieoberflächen für die projizierten Wellenfunktionen hingegen wiesen ausgesprochene Minima sowohl auf der oblaten als auch prolaten Seite auf.

Wellenfunktionen verschiedener Deformation sowie Quasiteilchen angeregte Wellenfunktionen wurden in einer gemeinsamen EGCM-Wellenfunktion überlagert und der Energieerwartungswert des Hamiltonoperators minimisiert. Die sich ergebenden Anregungsspektren zeigten bei ^{72}Ge und ^{70}Zn eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Daher war es sinnvoll, den Einfluß der einzelnen Freiheitsgrade auf das Spektrum und die EGCM-Wellenfunktion näher zu studieren. Zum Beispiel ging aus den verschiedenen EGCM-Rechnungen hervor, daß sowohl die Vibrationsfreiheitsgrade als auch die Quasiteilchenfreiheitsgrade allein noch nicht ausreichen, die Kerneigenschaften befriedigend zu beschreiben. Erst eine Kopplung dieser beiden brachte den gewünschten Erfolg. Dabei wurde im allgemeinen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt. Vor allem konnte der viel diskutierte niedrigliegende angeregte 0^+ -Zustand in ^{72}Ge erklärt werden. Insbesondere dieser Zustand wurde im wesentlichen von den Quasiteilchenkomponenten erzeugt, die fast 90 % der gesamten Wellenfunktion ausmachen. Bei ^{72}Ge sind es vor allem die Protonenquasiteilchen, die wichtig sind, bei ^{70}Zn hingegen die Neutronenquasiteilchen.

Bei beiden Kernen wurde die Yrast-Bande bereits ausreichend gut durch eine reine prolate/oblate Mischung erzeugt.

Das Spektrum von ^{74}Ge konnte weniger gut reproduziert werden. Dies mag vor allem am effektiven Hamiltonoperator liegen, der für ^{70}Zn und leichtere Kerne gefittet wurde.

BE2-Werte wurden bei Verwendung eines gemeinsamen Satzes von effektiven Ladungen für ^{72}Ge und ^{70}Zn ausgerechnet. Auch hier gibt es eine allgemein gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Nur der $2_1^+ \rightarrow 0_2^+$ -Übergang in ^{72}Ge enthielt nicht die nötige Kollektivität. Eine Hinzunahme von weiteren Quasiteilchenkomponenten scheint notwendig zu sein, um diesen Übergang zu beschreiben, obwohl die Anregungsenergien bereits stabil sind.

Insgesamt erweist sich das Verfahren der Ankopplung von Einteilchenfreiheitsgraden an die kollektive Bewegung im Rahmen der EGCM als eine sehr gute Methode, die Struktur und Dynamik auch schwieriger Kerne mit hoher Nukleonenzahl mikroskopisch und parameterfrei befriedigend zu beschreiben.

Referenzen

- 1) A. DeShalit, H. Feshbach, Theoretical Nuclear Physics, Vol.1, John Wiley & Sons, Inc. (1974)
- 2) W. Donner, Einführung in die Theorie der Kernspektren I u. II, BI 473/473a BI 556a (1971)
- 3) G. Baumgärtner, P. Schuck, Kernmodelle, BI 203/203a (1967)
- 4) T. Mayer-Kuckuk, Physik der Atomkerne, B.G. Teubner, Stuttgart (1970)
- 5) D.J. Rowe, Nuclear Collective Motion, Methuen and Co. Ltd (1970)
- 6) J.M. Eisenberg, W. Greiner, Nuclear Models, Vol. 1, North-Holland (1970)
- 7) F. Villars, Rotational States and General Theory of Collective Motion, Proc. of the Int. School of Physics "Enrico Fermi", Course 36, Academic Press (1966)
- 8) M. Baranger, A Microscopic View of Nuclear Collective Properties, Journal de Physique, Colloque C5, Suppl. au no 8-9 Tome 33, Aout-Septembre 1972, C5-61
- 9) M. Baranger, Theory of Finite Nuclei, Cargèse Lectures in Theoretical Physics, W.A. Benjamin and Comp. (1963)
- 10) C.W. Wong, Physics Reports (Section C of Phys. Lett.), 15, no 5 (1975) 283
- 11) Generator Coordinate Method for Nuclear Bound States and Reactions, Ed. M.V. Mihailovic and M. Rosina, Fizika (Yugoslavia) Vol. 5 (1973) Suppl.
- 12) D.L. Hill, J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102
- 13) R.E. Peierls, J. Yoccoz, Proc. Phys. Soc. London A70 (1957) 381
- 14) E. Caurier, B. Bourotte-Bilwes, Y. Abgrall, Phys. Lett. 44B (1973) 411
- 15) N. Mankoc-Borstnik, Proc. Int. Conf. on Nuclear Structure and Spectroscopy, Amsterdam, 1974, Vol. 1, p. 42

- 16) S.B. Khadkikar, D.R. Kulkarni, Phys. Rev. C, Vol. 10, no 3 (1974) 1189
- 17) S. Krewald, J.E. Galonska, A. Faessler, Phys. Lett. 55B, no 3 (1975) 267
- 18) N. Mankoc-Borstnik, M.V. Mihailovic, M. Rosina, Nucl. Phys. A239 (1975) 321
- 19) K. Allaart, K. Goeke, A. Faessler, Z. Phys. 263 (1973) 407
- 20) K. Goeke, K. Allaart, H. Müther, A. Faessler, Z. Phys. 271 (1974) 377
- 21) H. Müther, K. Allaart, K. Goeke, A. Faessler, Nucl. Phys. A248 (1975) 451
- 22) D. Justin, M.V. Mihailovic, M. Rosina, Nucl. Phys. A182 (1972) 54
- 23) C.D. Siegal, R.A. Sorensen, Nucl. Phys. A184 (1972) 81
- 24) A. Faessler, F. Grümmer, A. Plastino, F. Krmpotic, Nucl. Phys. A217 (1973) 420
- 25) K. Goeke, M.V. Mihailovic, K. Allaart, A. Faessler, Nucl. Phys. A243 (1975) 440
- 26) K. Allaart, K. Goeke, H. Müther, A. Faessler, Phys. Rev. C9 (1974) 988
- 27) F. Grümmer, Dissertation, veröffentlicht als Report der KFA Jülich, Jül-1207, Juni 1975
- 28) H. Müther, K. Goeke, A. Faessler, K. Allaart, High Spin States in Doubly Even pf-Shell Nuclei, Preprint
- 29) R. Beck, M.V. Mihailovic, D.M. Brink, On calculating the Scattering Phase Shifts by the Generator Coordinate Method, Preprint
- 30) B. Castel, M. Micklinghoff, I.P. Johnstone, Canadian Journal of Phys. Vol. 51, no 23, Dec. 1 (1973) 2403
- 31) K. Goeke, Dissertation, veröffentlicht als Report der KFA Jülich, Jül-817-KP, Dez. 1971
- 32) K. Goeke, A. Faessler, H.H. Wolter, Nucl. Phys. A183 (1972) 352

- 33) H.H. Wolter, A. Faessler, P.U. Sauer, Nucl. Phys. A167 (1971) 108
- 34) N.N. Bogoliubov, Usp. Fiz. Nauk 67 (1959) 549
- 35) F. Grümmer, K. Goeke, K. Allaart, A. Faessler, Nucl. Phys. A225 (1974) 443
- 36) K. Goeke, J. Garcia, A. Faessler, Nucl. Phys. A208 (1973) 477
- 37) K. Goeke, J. Garcia, A. Faessler, Phys. Lett. 41B, no 5 (1972) 557
- 38) P.W.M. Glaudemans, Some Applications of the Nuclear Shell Model, Lectures presented at the Rudziska Summer School, Poland, Sept. 1-14, 1971
- 39) M.A. Preston, Physics of the Nucleus, Addison-Wesley Publ. Com., Inc. (1965)
- 40) A.R. Edmonds, Drehimpulse in der Quantenmechanik, BI 53/53a (1964)
- 41) C. Bloch, A. Messiah, Nucl. Phys. 39 (1962) 95
- 42) A. Messiah, Quantum Mechanics, Vol. 1 u. Vol. 2, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1970
- 43) P.W.M. Glaudemans, Fysisch Laboratorium, Rijksuniversiteit Utrecht, private Mitteilung
- 44) B.F. Bayman, A.S. Reiner, R.K. Sheline, Phys. Rev. 115 (1959) 1622
- 45) Y. Ishizaki, INS Univ. of Tokio, private Mitteilung
- 46) D.W. Grissmer, R. Beyer, R.P. Scharenberg, G. Schilling, J.A. Thomson, J.W. Tippie, Nucl. Phys. A196 (1972) 216
- 47) A.C. Rester, A.V. Ramayya, J.H. Hamilton, D. Krmpotic, Nucl. Phys. A162 (1971) 461
- 48) M. Kregar, B. Elbek, Nucl. Phys. A93 (1967) 49
- 49) P.J. Brussaard, Proc. Int. Conf. Amsterdam, Sept. 9-13 (1974) 489

- 50) A.C. Rester, J.H. Hamilton, A.V. Ramayya, Nucl. Phys. A162 (1971) 481
- 51) W.G. Monahan, R.G. Arns, Phys. Rev., Vol. 184, no 4 (1969) 1135
- 52) R.C. Haight, Phys. Rev. C, Vol. 5, no 6 (1972) 1984
- 53) Nuclear Data Sheets 65, sect. A, 1

Figurenbeschreibung

Figur 1

^{72}Ge : Aufgetragen sind die intrinsischen Bindungsenergien $\langle \phi(\beta) | \hat{H} | \phi(\beta) \rangle$ (gestrichelte Linie) und die Energien der auf Drehimpuls J und Teilchenzahl N projizierten Wellenfunktionen $\langle \phi_{JN}(\beta) | \hat{H} | \phi_{JN}(\beta) \rangle$ in Abhängigkeit von der Deformation β . $|\phi(\beta)\rangle$ ist ein axialsymmetrischer HFB-Zustand mit vorgegebener Deformation β , $|\phi_{JN}(\beta)\rangle$ ist ein auf scharfen Drehimpuls J und gute Teilchenzahl N projizierter HFB-Zustand der Deformation β . Im Hamiltonoperator $\hat{H}$ wurde eine für Zn-Isotope gefittete "Modified Surface Delta Interaction" (MSDI) Nukleon-Nukleon Wechselwirkung verwendet.

Figur 2

^{72}Ge : In Abhängigkeit von der Deformation β sind die Protonenpaarungsenergie (obere Kurve) von HFB-Zuständen, die Neutronenpaarungsenergie (mittlere Kurve) sowie die totale Paarungsenergie aufgetragen. Verwendet wurde die gleiche MSDI-Kraft wie in Figur 1.

Figur 3

^{72}Ge : Auf der linken Seite befinden sich die Quasiteilchenniveaus des prolates HFB-Zustandes, dessen projizierte intrinsische Energien ein prolates Minimum liefern ($\beta = 0.068$). Auf der rechten Seite befinden sich die Quasiteilchenniveaus des oblaten HFB-Zustandes, dessen proj-

zierte intrinsische Energien ein oblates Minimum liefern ($\beta = -0.068$). Die Basiszustände sind die eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators der Oszillatorlänge 2.08 fm. E_F ist die Fermikante. Die Zahlen über den Niveaus geben die Besetzungswahrscheinlichkeit des betreffenden Zustandes an. Die Niveaus sind bis zu etwa 3 MeV oberhalb und unterhalb der Fermikante aufgetragen.

Figur 4

^{72}Ge : Anregungspektren

PHFB ist das minimisierte projizierte Spektrum von HFB-Zuständen. Das nächste Spektrum (β -GCM) entsteht aus einer reinen prolate/oblate GCM-Mischung. Das Ergebnis einer Mischung aller angeregten und nicht angeregten Zustände oblater Deformation ($2qp(\text{oblate})$) befindet sich in der dritten Spalte. Das nächste Spektrum (β -GCM+ $2qp(\text{proton})$) ergibt sich aus einer prolate/oblate Mischung einschließlich aller Protonen-Quasiteilchen-angeregten Zustände. β -GCM+ $2qp$ enthält noch zusätzlich zum vorherigen Spektrum einen Neutronen-Quasiteilchen-angeregten Zustand (totale Wellenfunktion). Das letzte Spektrum (EXP) zeigt die experimentellen Werte.

Figur 5

^{70}Zn : Beschreibung wie bei Fig. 1.

Figur 6

^{70}Zn : Beschreibung wie bei Fig. 2.

Figur 7

^{70}Zn : Anregungsspektren

PHFB ist das minimisierte projizierte Spektrum von HFB-Zuständen. Das nächste Spektrum (P2qp) ist das projizierte Spektrum eines quasiteilchenangeregten HFB-Zustandes. In der dritten Spalte (β -GCM) werden die reinen prolate/oblate Zustände gemischt. Das folgende Spektrum (β -GCM+2qp(proton)) schließt den prolaten, den oblaten sowie alle Protonen-Quasiteilchen angeregten Zustände ein. β -GCM+2qp enthält zusätzlich zum vorherigen Spektrum Neutronen-Quasiteilchen angeregte Zustände (totale Wellenfunktion). Im vorletzten Spektrum (SM) befinden sich die Ergebnisse einer Schalenmodellrechnung⁴³⁾ und das letzte Spektrum (EXP) zeigt die experimentellen Daten.

Figur 8

^{74}Ge : Beschreibung wie bei Fig. 1.

Figur 9

^{74}Ge : Beschreibung wie bei Fig. 2.

Figur 10

^{74}Ge : Anregungsspektren

PHFB ist das minimisierte projizierte Spektrum von HFB-Zuständen. Das nächste Spektrum (P2qp) ist das projizierte Spektrum eines quasiteilchenangeregten HFB-Zustandes. In der dritten Spalte (β -GCM) werden die reinen prolate/

oblate Zustände gemischt. Das folgende Spektrum (β -GCM+2qp(proton)) schließt den prolaten, den oblaten sowie alle Protonen-Quasiteilchen angeregten Zustände ein. β -GCM+2qp enthält zusätzlich zum vorherigen Spektrum Neutronen-Quasiteilchen angeregte Zustände (totale Wellenfunktion). Das letzte Spektrum (EXP) zeigt die experimentellen Daten.

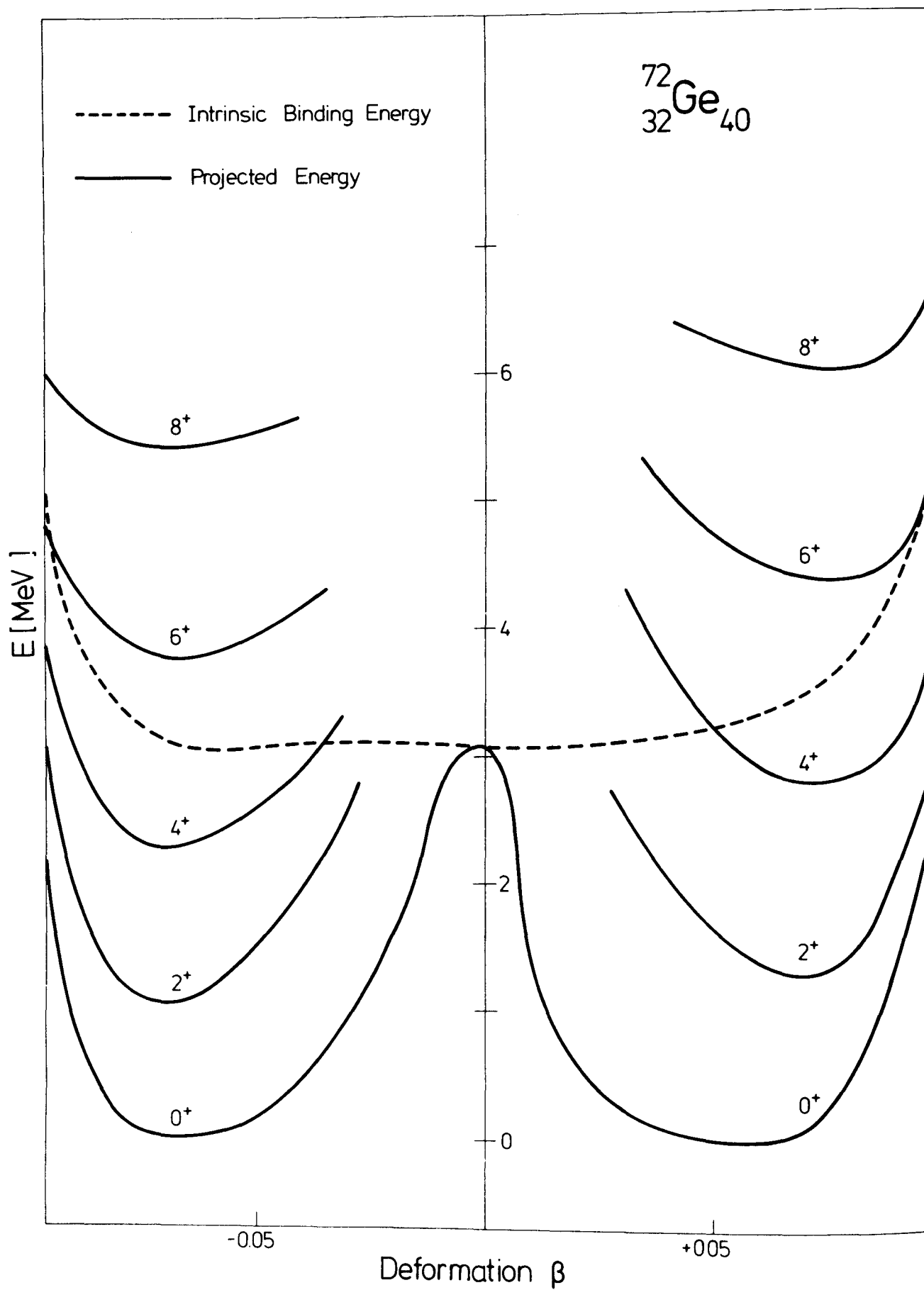
Tabellenbeschreibung

Tabelle 1

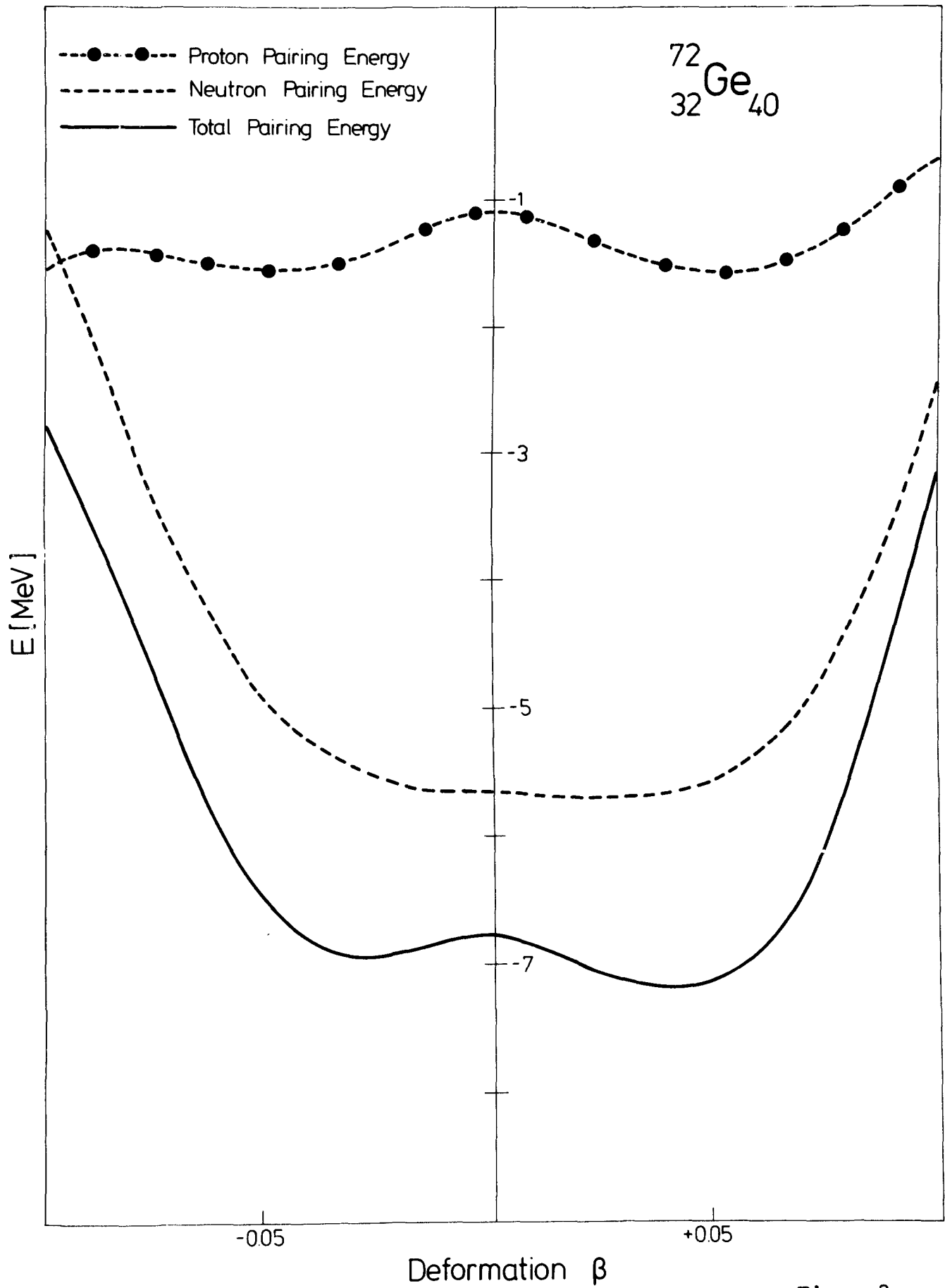
^{72}Ge : Die errechneten BE2-Übergänge werden mit den von Castel et al. ermittelten Werten und mit experimentellen Werten verglichen. Anfangsdrehimpuls J_i und Enddrehimpuls J_f beziehen sich in unseren Rechnungen jeweils auf die totale EGCM-Wellenfunktion. $|E_f - E_i|$ ist der Energieabstand zwischen Anfangs- und Endzustand. Die effektiven Ladungen Δe_p und Δe_n gelten für alle Übergänge (auch für ^{70}Zn).

Tabelle 2

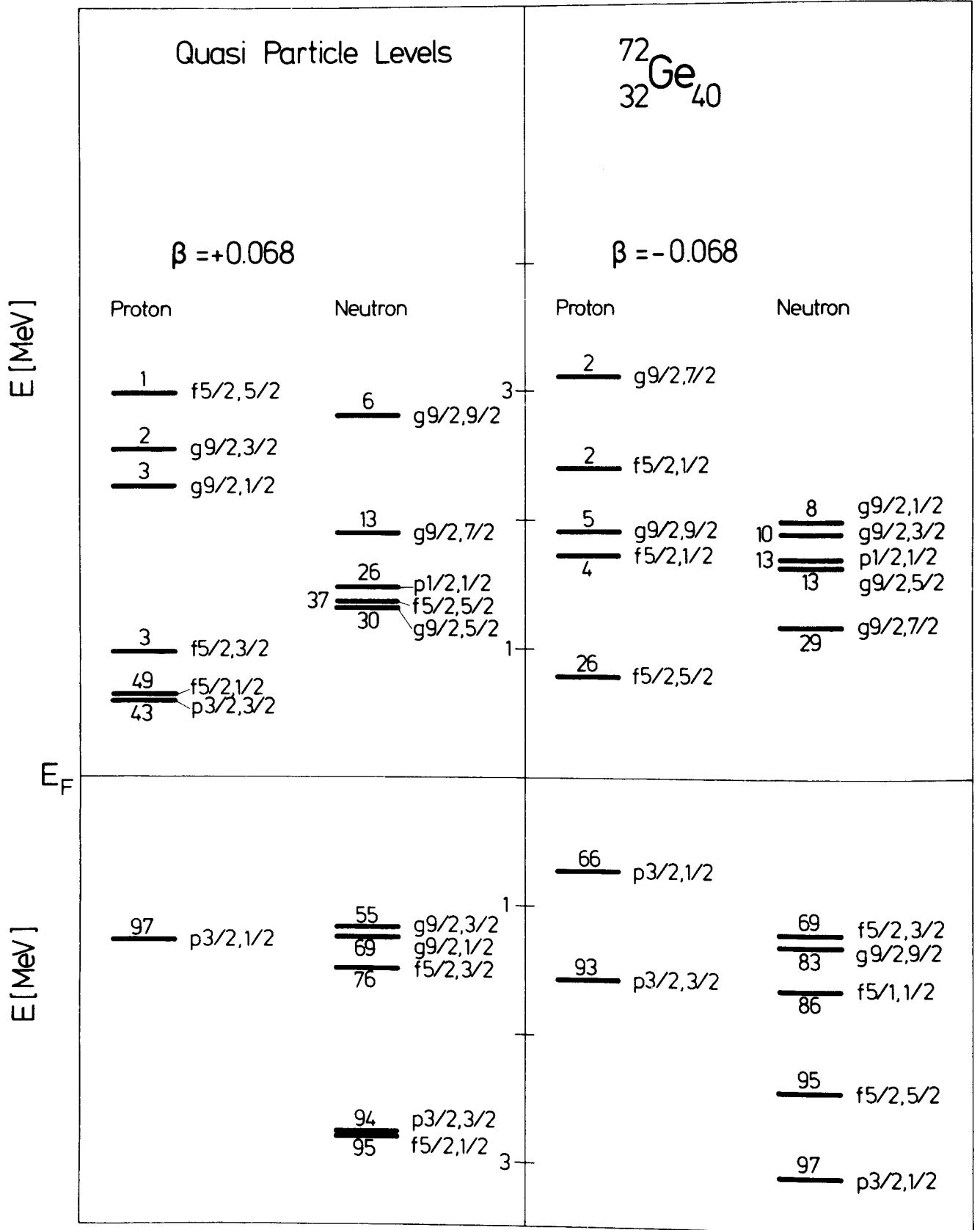
^{70}Zn : Vergleich der errechneten BE2-Übergänge mit dem Experiment. Die effektiven Ladungen Δe_p und Δe_n sind die gleichen wie bei ^{72}Ge . Der Anfangszustand wird durch J_i , der Endzustand durch J_f charakterisiert. $|E_f - E_i|$ gibt den Energieabstand zwischen Anfangs- und Endzustand an.



Figur 1

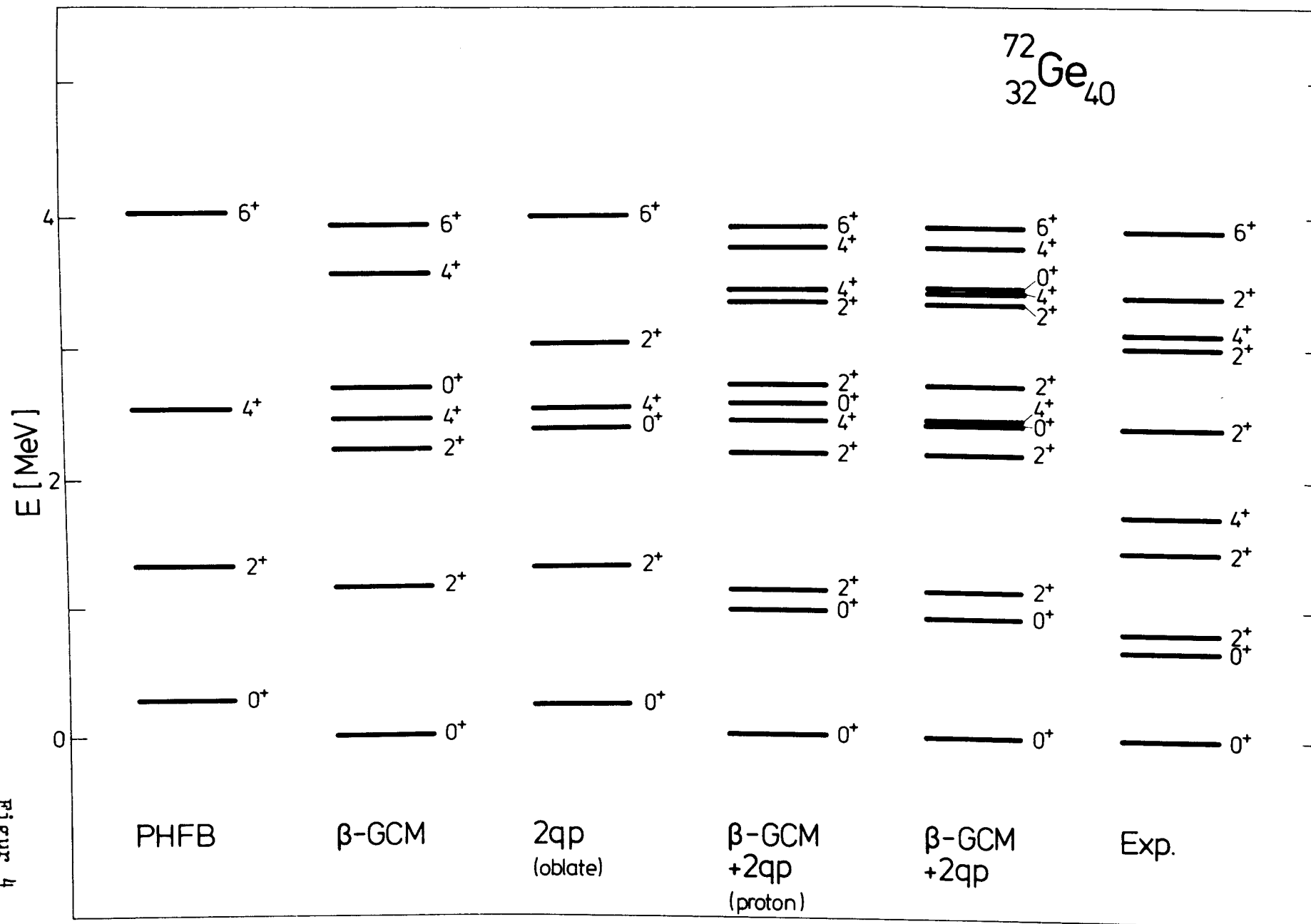


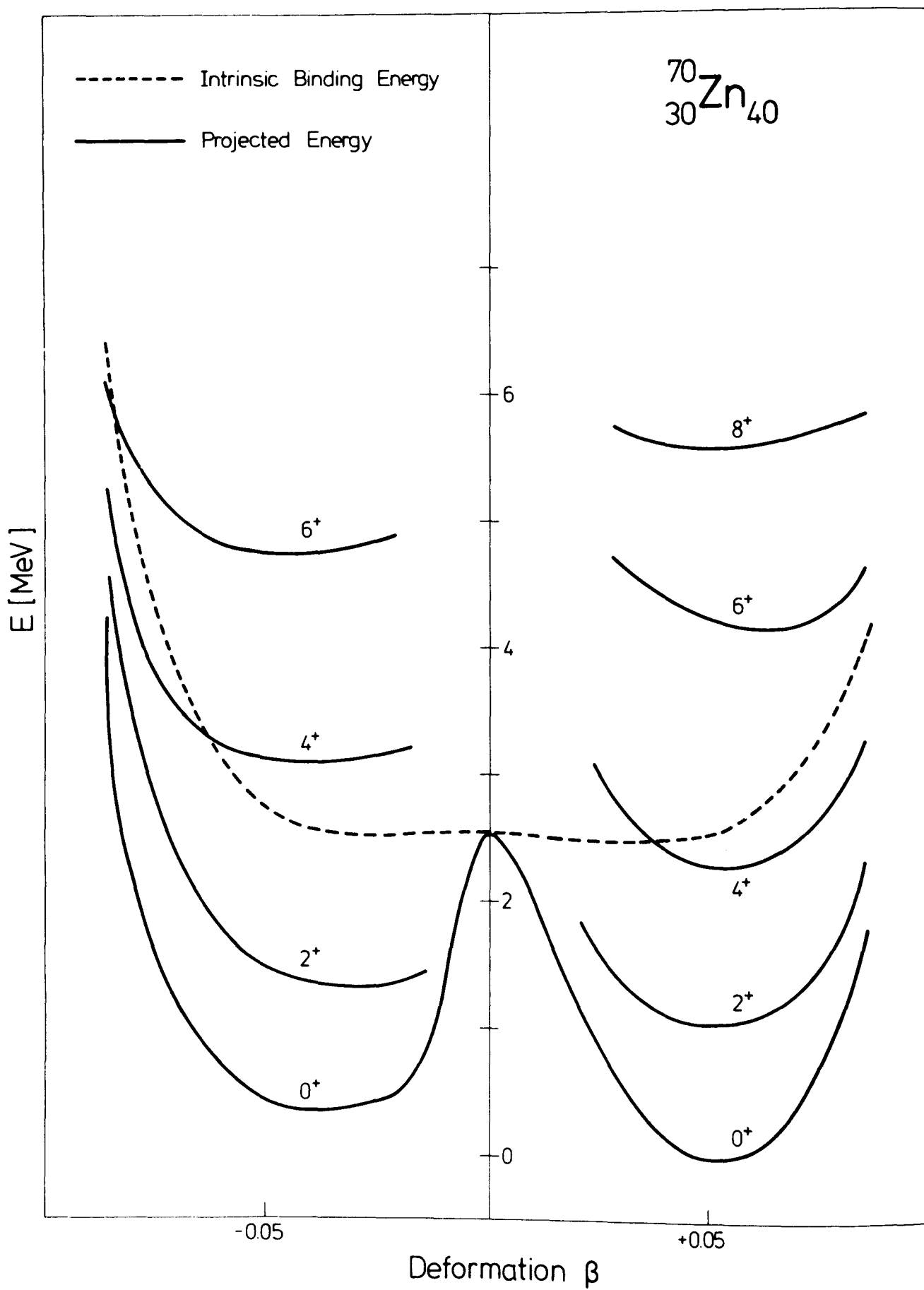
Figur 2



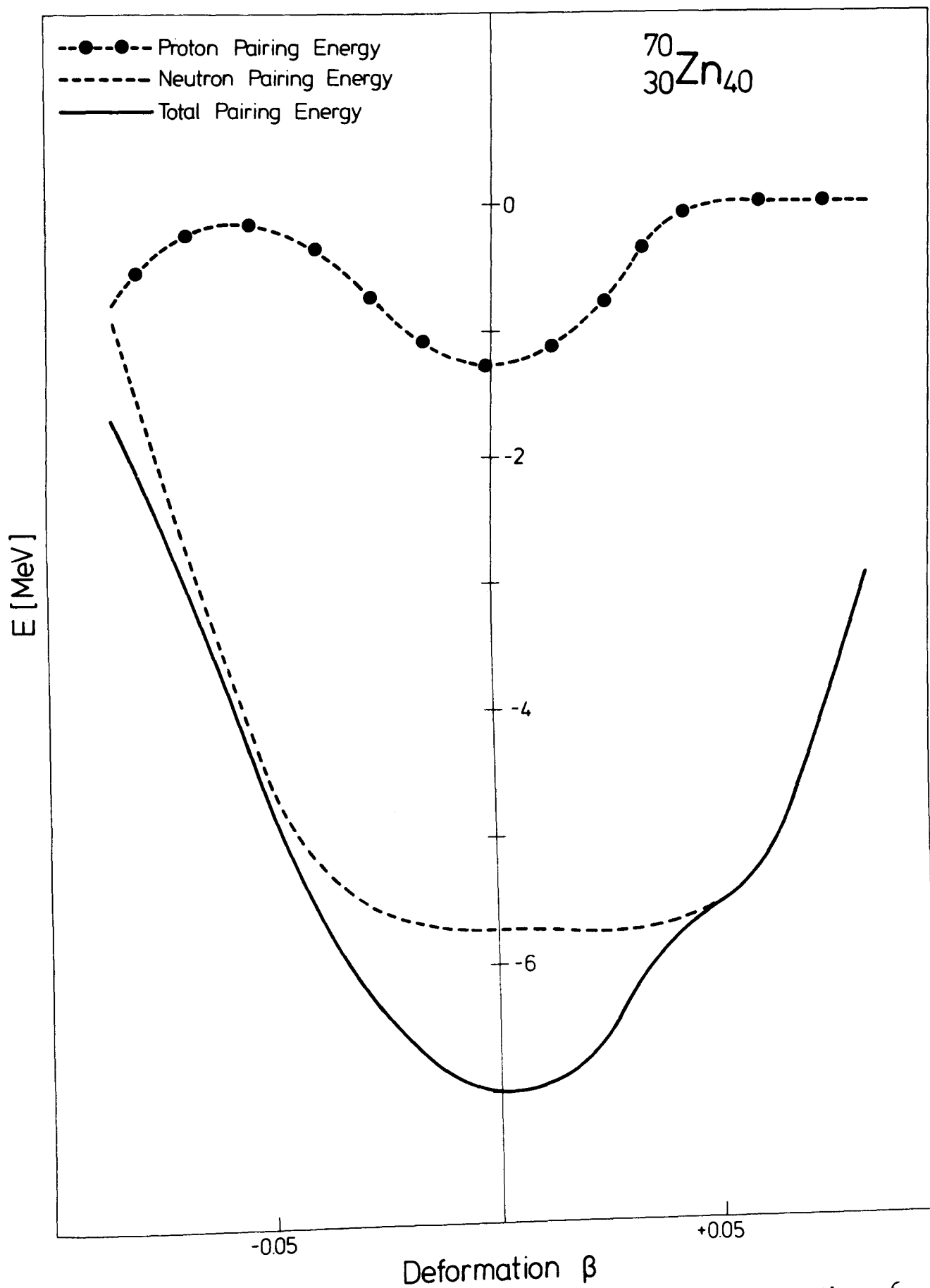
Figur 3

Figure 4



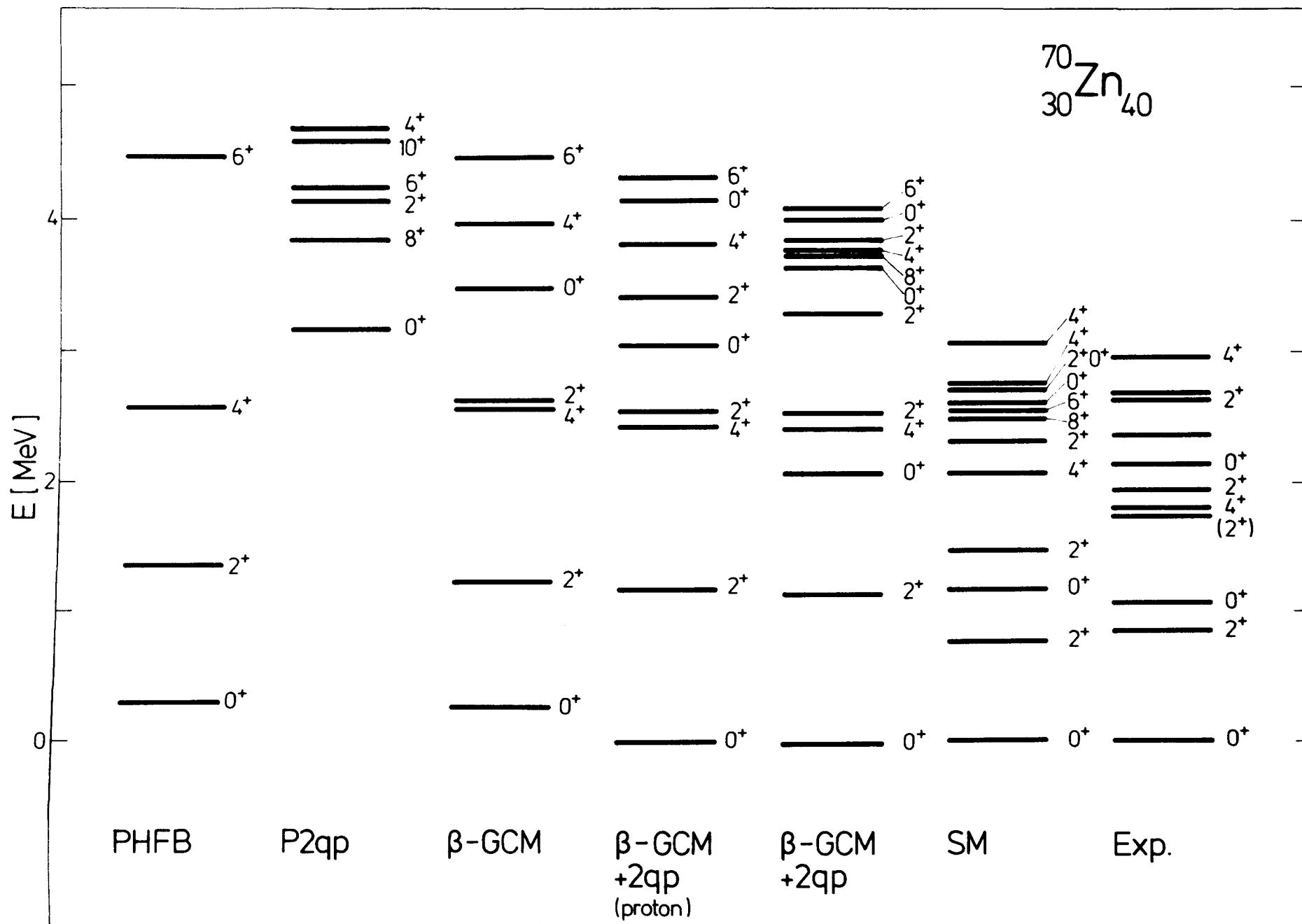


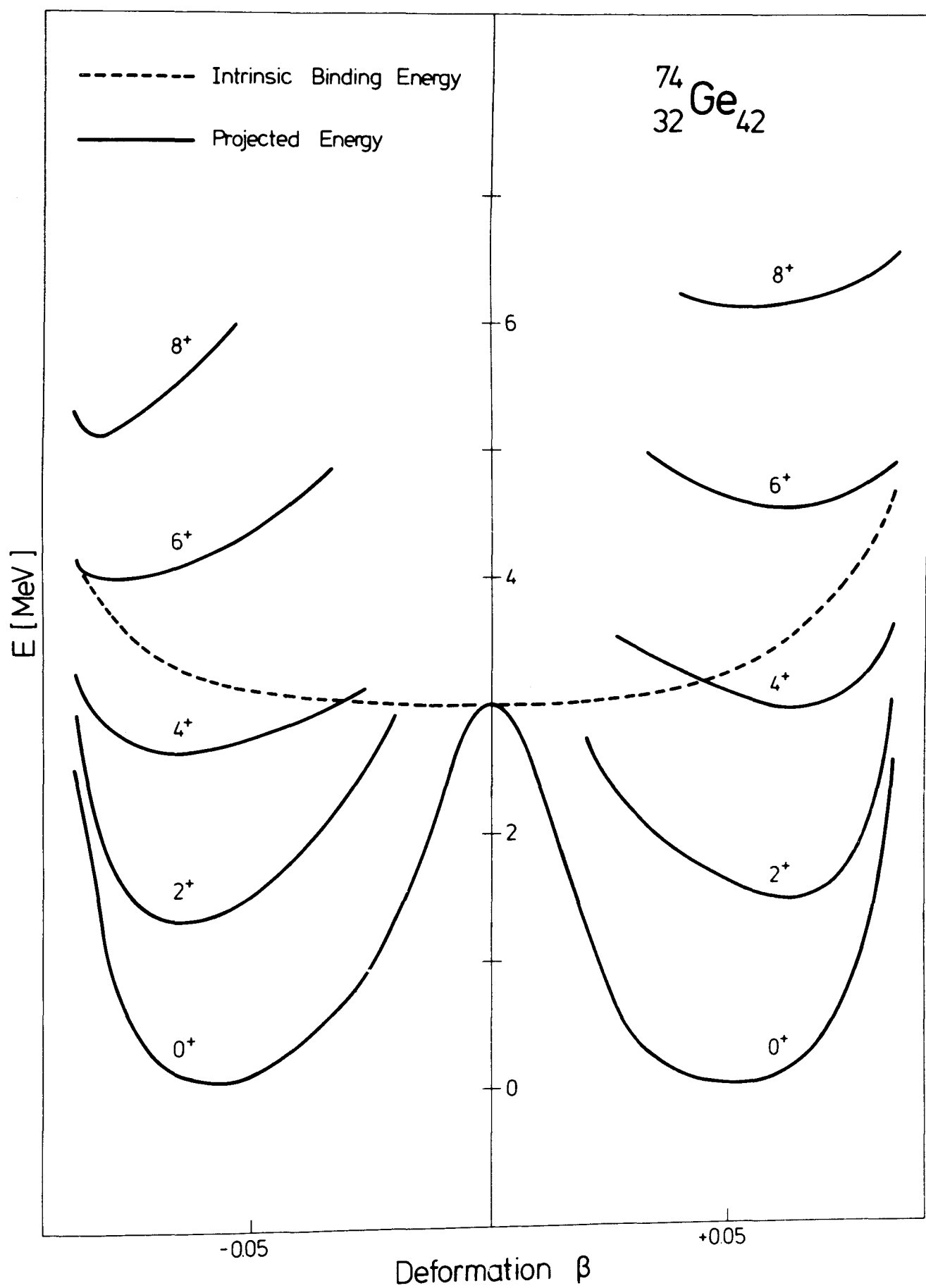
Figur 5



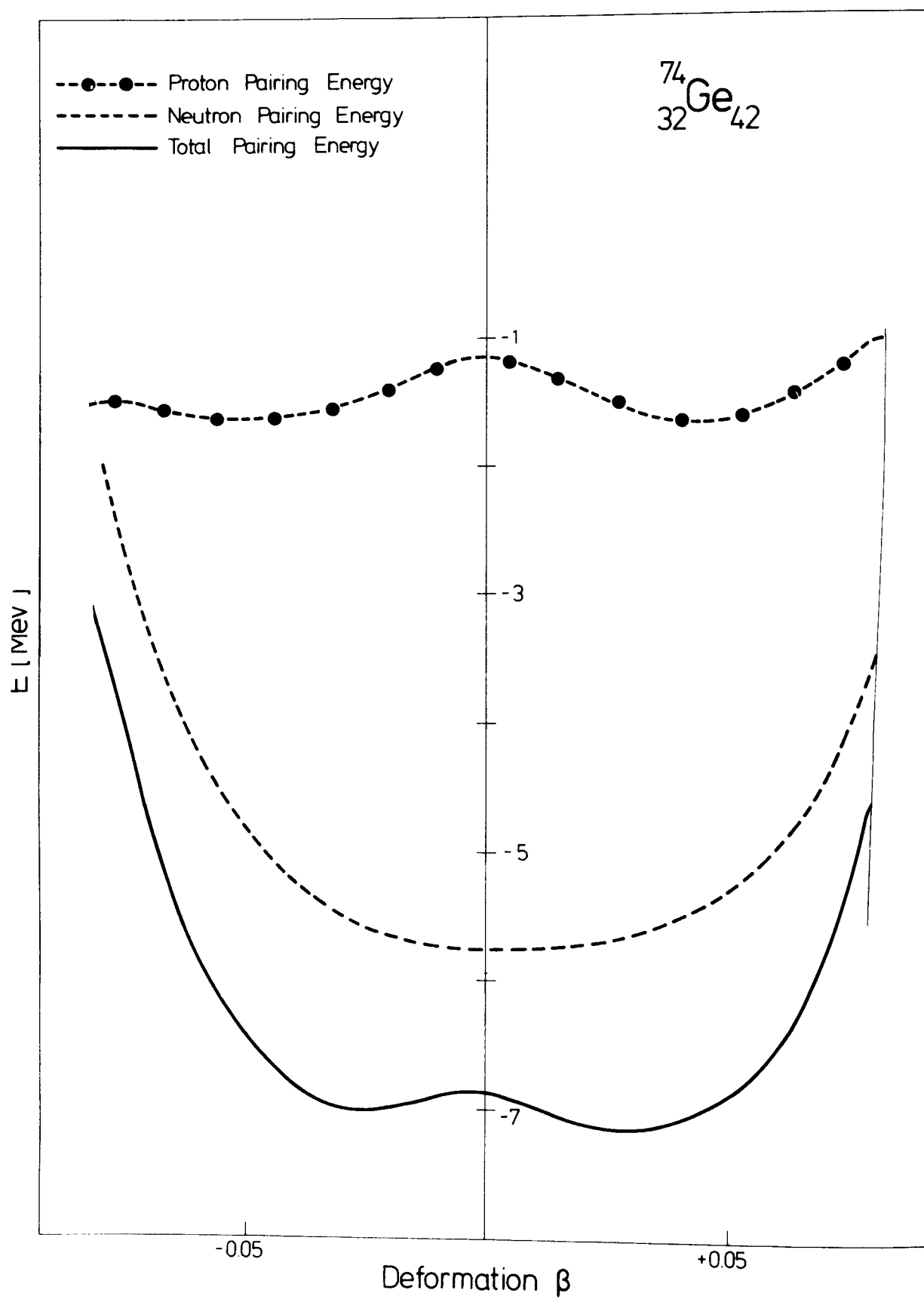
Figur 6

Figure 7





Figur 8



Figur 9

Figur 10

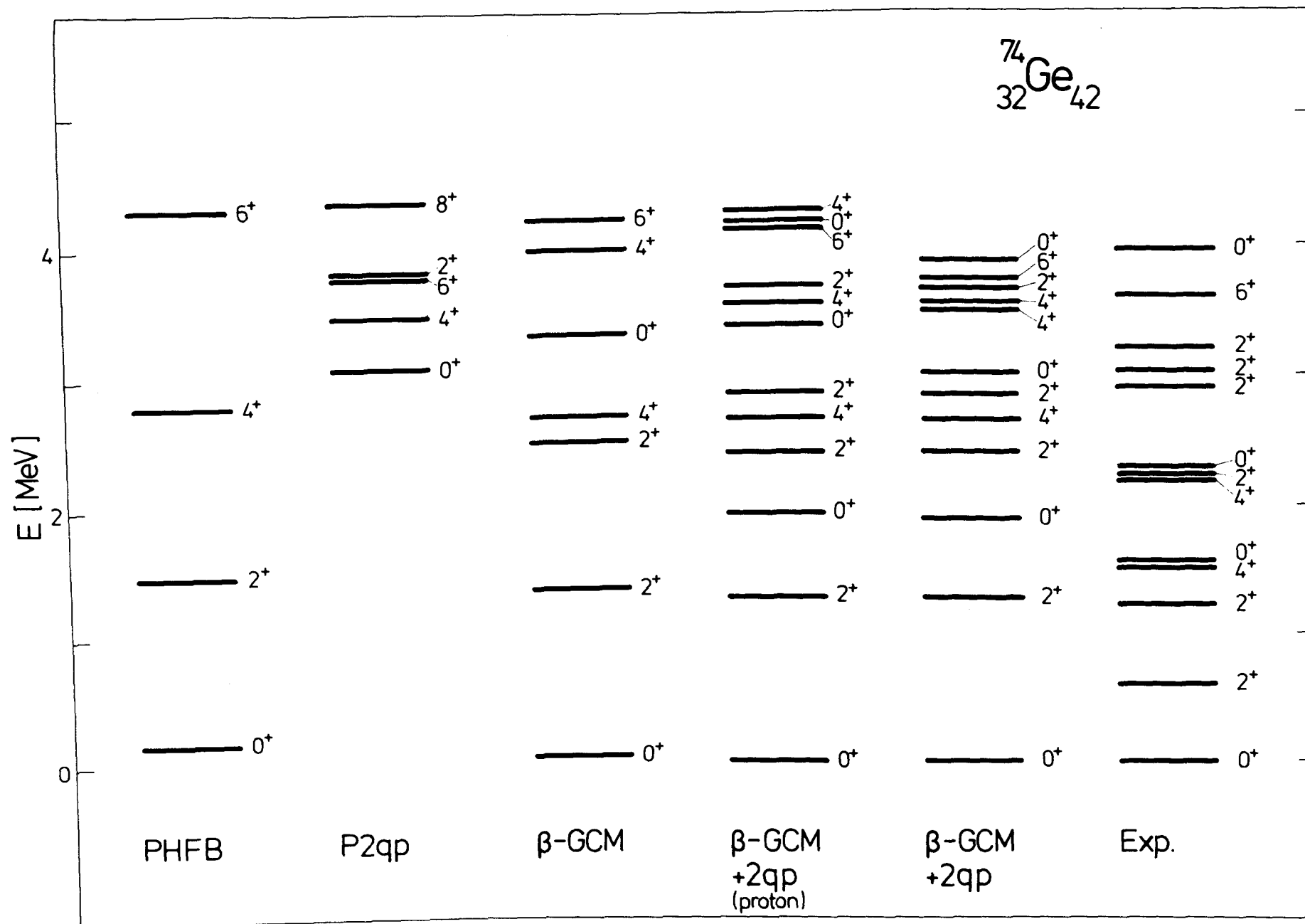


Tabelle 1
BE2-Übergänge in ^{72}Ge

Effektive Ladungen: $\Delta e_p = 0.8$
 $\Delta e_n = 0.9$

J_i	J_f	BE2(EGCM) [$e^2\text{fm}^4$]	$ E_f - E_i $ (EGCM) [MeV]	BE2(EXP) [$e^2\text{fm}^4$]	$ E_f - E_i $ (EXP) [MeV]	BE2(CASTEL) [$e^2\text{fm}^4$]
2_1^+	0_1^+	482	1.13	$440 \pm 50^{\text{a)}}; 234^{\text{b)}})$	0.83	322
4_1^+	2_1^+	681	1.30		0.90	530
6_1^+	4_1^+	740	1.47		2.16	
8_1^+	6_1^+	739	1.64		-	
2_1^+	0_2^+	9.8	0.19	$400 \pm 70^{\text{a)}}; 51 \pm 5^{\text{c)}})$ $264 \pm 48^{\text{d)}}; 370 \pm 48^{\text{d)}})$ $1.5^{\text{b)}})$ $711^{\text{b)}})$	0.14	206
2_2^+	0_1^+	18.4	2.19		1.46	79
2_2^+	2_1^+	623	1.06		0.63	124
4_1^+	2_2^+	5	0.24		0.27	44

a) Ref. 50,53

b) Ref. 51

c) Ref. 48

d) Ref. 52

Tabelle 2

BE2-Übergänge in ^{70}Zn

Effektive Ladungen: $\Delta e_p = 0.8$

$\Delta e_n = 0.9$

J_i	J_f	BE2 (EGCM) [$e^2\text{fm}^4$]	$ E_f - E_i $ (EGCM) [MeV]	BE2 (EXP) [$e^2\text{fm}^4$]	$ E_f - E_i $ (EXP) [MeV]
2_1^+	0_1^+	333	1.16	$320 \pm 28^{\text{a)}}$	0.89
4_1^+	2_1^+	390	1.23		0.83
6_1^+	4_1^+	114	1.39		-
8_1^+	6_1^+	316	0.23		-
2_1^+	0_2^+	1.4	0.66		0.18
2_2^+	0_1^+	4.5	2.55		1.76
2_2^+	2_1^+	346	1.40		0.87
4_1^+	2_2^+	70	0.17		0.03

a) Ref. 53