EXAKTE OBERE UND UNTERE SCHRANKEN FÜR DIE TRITONBINDUNGSENERGIE MIT SOFT-CORE POTENTIAL

D i s s e r t a t i o n

zur Erlangung des Grades eines Doktors

der Naturwissenschaften

der Mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät

der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von

Horst Ziegelmann

aus Dresden

1969

L e b e n s l a u f

Am 2o. März 194o wurde ich als Sohn des Kaufmanns Erich Ziegelmann und seiner Ehefrau Johanna, geb. Reinholdt, in Dresden geboren.

Nach dem Besuch der Volksschule von 1946 bis 195o wechselte ich in das Progymnasium in Spaichingen/Wttbg. über. Von 1956 an war ich Schüler des Gymnasiums in Tuttlingen, wo ich 1959 die Reifeprüfung ablegte.

Danach studierte ich an der Universität Tübingen Physik und Astronomie. Nach der Diplomhauptprüfung 1965 war ich nacheinander als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Astronomischen Institut, als Hilfsassistent am Institut für Theoretische Physik und als Technischer Leiter des Zentrums für Datenverarbeitung der Universität Tübingen tätig. 1968 wurde mir die Verwaltung einer Assistentenstelle am Institut für Theoretische Physik übertragen. An diesem Institut hatte ich im Sommer 1966 unter der Leitung von Herrn Prof. Schmid die vorliegende Arbeit begonnen, die ich im Frühjahr 1969 vollendete.

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren W. Braunbek, G. Elwert, B. Huppert, H. Krüger, G. Möllenstedt, P. Roquette, E. Schmid, H. Siedentopf, K. Wildermuth und K. Zeller.

Horst Ziegelmann

DK 539.128.3
539.128.4
539.143.3

Exakte obere und untere Schranken für die Tritonbindungsenergie mit soft-core Potential

Institut für Theoretische Physik
der Universität Tübingen

Tübingen, 8. Juli 1969

Institutsleiter:
Prof. Dr. E. W. Schmid

Bearbeiter:
Dipl.-Phys. H. Ziegelmann

Übersicht

Die Genauigkeit von Hackenbroichs Näherung im Jastrowfaktor, die Flexibilität seiner Testfunktion und die Wichtigkeit nicht symmetrischer Anteile werden für das Triton untersucht und auf das α-Teilchen verallgemeinert. Es wurde eine Methode entwickelt, um die Beiträge verschiedener Gebiete des Konfigurationsraumes zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke getrennt zu berechnen. Dadurch erhält man Informationen, die eine gezielte Verbesserung der Testfunktion und eine sehr genaue Abschätzung des Eigenwertes erlauben.

Summary

The accuracy of Hackenbroich's approximation in the Jastrov factor, the flexibility of his trial function and the importance of nonsymmetric functions are tested in the case of the triton and generalized to the α-particle. A procedure was developed to calculate separately the contributions of different regions of configuration space to the gap between upper and lower bounds. So one obtains information which clearly shows, where the trial function should be improved and which allows a very precise estimation with respect to the eigenvalue.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

1. Darstellung der Hackenbroich'schen Methode am Beispiel des Triton

   1.1 Das soft-core Potential 4
   1.2 Der Hamilton-Operator 5
   1.3 Der Variationsansatz zur Berechnung oberer Schranken für den Energieeigenwert 8
   1.4 Kritik der Hackenbroich'schen Methode 9

2. Auswirkung der Näherung im Jastrowfaktor auf die Erwartungswerte von potentieller und kinetischer Energie

   2.1 Die Hackenbroich'sche Näherung im Erwartungswert der potentiellen Energie 12
   2.2 Die Hackenbroich'sche Näherung im Erwartungswert der kinetischen Energie 19
   2.3 Vergleich der von Hackenbroich angegebenen oberen Schranke mit dem exakten Wert 26

3. Prüfung und Verbesserung der Testfunktion

   3.1 Berechnung einer unteren Schranke für den Energieeigenwert 28
   3.2 Analyse der Fehler in der Testfunktion 34
   3.3 Verbesserung der Zweierkorrelationen 48
   3.4 Verbesserung der Dreierkorrelationen 55
   3.5 Abschätzung des Eigenwerts für das Tritonproblem mit effektivem Potential 59

4. Berücksichtigung nicht totalsymmetrischer Anteile in der Wellenfunktion

4.1 Eine Abschätzung für die Energiedifferenz zwischen dem totalsymmetrischen Zustand und dem tatsächlichen Grundzustand 62
4.2 Der Variationsansatz für das totale Potential 66
4.3 Abschätzung des Eigenwertes und Vergleich mit dem experimentellen Wert 7o

5. Korrektur der von Hackenbroich für das α-Teilchen angegebenen oberen Schranke 75

5.1 Auswirkung der vernachlässigten Terme des Jastrowfaktors 76
5.2 Einfluß der fehlerhaften Zweierkorrelationen 77
5.3 Berücksichtigung nicht totalsymmetrischer Anteile in der Testfunktion 8o
5.4 Vergleich der korrigierten Schranke mit den Ergebnissen von Afnan und Tang 83

Literatur

Einleitung

Den Schwierigkeiten, die die 3 N-dimensionale Schrödingergleichung für das N-Nukleonen-System einem Lösungsversuch entgegensetzt, kann man erfolgreich mit einem Variationsverfahren mit Clustermodell-Wellenfunktionen begegnen[1]. Dabei stößt man jedoch bei Verwendung von Potentialen mit hard-core bei Berechnung von Matrixelementen auf Integrale, die sich nicht mehr geschlossen auswerten lassen. Die übliche numerische Integration mit einem fest vorgegebenen Netz von Integrationspunkten läßt sich auf die 3 N-6-dimensionalen Integrale für N = 4 praktisch nicht mehr anwenden, da der Rechenaufwand in keinem vernünftigen Verhältnis zur erzielbaren Genauigkeit steht. Beispielsweise würde man im Fall des Kerns Li^6 bei Verwendung von einer Million Gitterpunkten nur ca. 3 Punkte auf jeder der 12 Koordinatenachsen erhalten. Dennoch lassen sich sehr schöne Erfolge bei der Untersuchung leichter Kerne erzielen, wenn man Integrationen mit einer Monte-Carlo-Methode durchführt[2].

Freilich ist die Genauigkeit dieser Methode wie bei jedem numerischen Verfahren beschränkt. Dies hat ernste Konsequenzen bei größeren Teilchenzahlen, wo sich die Erwartungswerte infolge der Antisymmetrisierung als Differenz vieler großer Zahlen, die alle mit statistischen Fehlern behaftet sind, ergeben. Ebenso ergeben sich die Energieabstände im angeregten Spektrum als Differenz zweier großer mit statistischen Fehlern behafteter Zahlen.

Um diese Schwierigkeiten zu umgehen, hat H. Hackenbroich[3] eine Methode entwickelt, die es erlaubt, im Rahmen des Clustermodells obere Schranken für die Energieniveaus leichter Kerne zu berechnen, ohne numerische Integrationen durchführen zu müssen. Zu diesem Zweck haben H. Eikemeier und H. Hackenbroich ein Zweiteilchen-Serberpotential aus Gaußfunktionen aufge-

baut, deren Parameter sie an die Nukleon-Nukleon-Streudaten bis 3oo MeV und an die Deuteron-Bindungsenergie anpaßten. Es gelingt durch eine Gaußfunktion, die abstoßend wirkt, den Effekt des hard-core zu beschreiben. Damit wird erreicht, daß Energieerwartungswerte zu Wellenfunktionen, die selbst wiederum nur aus Gaußfunktionen aufgebaut sind, sich ohne numerische Integration berechnen lassen, so daß man den Rechenaufwand und die Ungenauigkeit der numerischen Verfahren umgeht.

Allerdings gehen auch in die Hackenbroich'sche Methode Näherungsannahmen ein (siehe Kapitel 1). Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, durch Berechnung von exakten oberen und unteren Schranken im Falle des Triton die Hackenbroich'sche Methode für diesen Kern zu testen.

Der Vergleich der exakten oberen Schranke mit der von Hackenbroich gerechneten genäherten Schranke wird zeigen, wie stark sich die Näherungsannahme im Erwartungswert des Hamiltonoperators auswirkt. Kapitel 2 gibt eine Interpretation und einen Test dieser Näherung.

Um die Güte des Hackenbroich'schen Variationsansatzes zu testen, wird in Kapitel 3 eine untere Schranke für den Energieeigenwert berechnet. Um die Mängel der Hackenbroich'schen Testfunktion zu analysieren, wird dort ein Verfahren entwickelt, das es erlaubt, die wesentlichen Abweichungen der Testfunktion von der Eigenfunktion im Konfigurationsraum zu lokalisieren. Auf diese Weise ist es möglich, die Testfunktion gezielt zu verbessern. Außerdem kann man mit diesem Verfahren auch ohne Verbesserungen der Testfunktion den Eigenwert des Systems besser abschätzen, als dies allein mit Hilfe von oberer und unterer Schranke möglich ist.

Nach Berücksichtigung der von Hackenbroich vernachlässigten nicht totalsymmetrischen Anteile der Wellenfunktion (Kapitel 4) kann man deshalb den Energieeigenwert des Triton sehr genau

angeben und mit dem experimentellen Wert vergleichen, so daß man einen guten Test für das von Hackenbroich und Eikemeier entwickelte Potential erhält.

Im 5. Kapitel werden mit Hilfe der am Triton gewonnenen Einsichten über die Hackenbroich'sche Methode Korrekturen zu der von Hackenbroich für das α-Teilchen angegebenen oberen Schranke abgeschätzt. Nachdem sie für Zweiteilchencluster keinerlei Schwierigkeiten bietet, ist damit die Hackenbroich'sche Methode für alle Cluster bis N = 4 getestet.

1. Darstellung der Hackenbroich'schen Methode am Beispiel des Triton

Da es das Ziel der Hackenbroich'schen Methode ist, Clustermodellrechnungen durchzuführen, ohne auf numerische Integrationen angewiesen zu sein, dürfen das verwendete Potential ebenso wie der Variationsansatz für die Wellenfunktion nur eine ganz bestimmte funktionale Radialabhängigkeit haben.

1.1 Das soft-core-Potential

Die Streuphasen der Nukleon-Nukleon-Streuung lassen sich für Energien größer als 1oo MeV nur dann gut wiedergeben, wenn man ein Zentralpotential verwendet, das für Nukleonenabstände von weniger als o,5 fm abstoßend wirkt.[4] Im allgemeinen wird diese Abstoßung phänomenologisch durch einen unendlich hohen "hard-core" beschrieben. Dieser unendlich hohe "hard-core" bedingt aber, daß die Wellenfunktion im "hard-core" verschwinden muß. Dadurch bekommt die Wellenfunktion ein derart kompliziertes analytisches Verhalten, daß sich die zur Bildung von Erwartungswerten nötigen Integrationen nicht mehr geschlossen durchführen lassen.

Eikemeier und Hackenbroich[5] haben nun gezeigt, daß man die Nukleon-Nukleon-Streudaten bis 3oo MeV auch gut mit einem Zentralpotential mit endlich hohem abstoßenden core - im weiteren "soft-core" genannt - wiedergeben kann.

Dieses Zentralpotential hat die Form:

$$V(12) = (1/2(V_T(12) + V_S(12)) + 1/2(V_T(12)-V_S(12))P^{\sigma}_{12}) \frac{1+P^{M}_{12}}{2} \qquad (1)$$

Dabei ist P^{σ}_{12} der Spinaustauschoperator

und P^{M}_{12} der Ortsaustauschoperator.

Triplettpotential V_T und Singulettpotential V_S sind aus Gaußfunktionen aufgebaut:

$$V_T(r) = \sum_{i=1}^{3} a_i \, e^{-b_i r^2}$$

a_1	= 6oo	MeV	b_1	= 5.5	fm^{-2}
a_2	= -7o	MeV	b_2	= o.5	fm^{-2}
a_3	= -27.6	MeV	b_3	= o.38	fm^{-2}

$$V_S(r) = \sum_{i=1}^{3} a_i \, e^{-b_i r^2}$$

a_1	= 88o	MeV	b_1	= 5,4	fm^{-2}
a_2	= -7o	MeV	b_2	= o.64	fm^{-2}
a_3	= -21	MeV	b_3	= o.48	fm^{-2}

Anstelle eines "hard-core" mit unendlicher Höhe hat dieses Potential einen "soft-core" mit endlicher Höhe, dargestellt durch die 1. Gaußfunktion.

1.2 Der Hamiltonoperator

Der Hamiltonoperator des Dreiteilchenproblems hat die Form:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{3} \nabla_i^2 + \sum_{i<j=1}^{3} V(ij) \qquad (2)$$

Dabei bedeuten $ij \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_j$ und $\nabla_i \equiv \mathrm{grad}_{\vec{r}_i}$.

Die $\vec{r}_i$ sind die Ortsvektoren der 3 Teilchen. V(ij) ist das unter (1) angegebene Serberpotential. Die Massen der 3 Teilchen werden gleichgesetzt: $m = (m_p + m_n)/2$.

Im weiteren wird es sich bisweilen als günstig erweisen, auch andere Koordinatensysteme zu verwenden (zur Veranschaulichung siehe Abb. 1).

Dreieckskoordinaten:

Anstelle der Ortsvektoren $\vec{r}_i$ kann man auch einführen: den Ortsvektor des Schwerpunkts $\vec{r}_S$, die Seiten des von den Nukleonen gebildeten Dreicks $x = |\vec{r}_1-\vec{r}_2|$, $y = |\vec{r}_2-\vec{r}_3|$, $z = |\vec{r}_3-\vec{r}_1|$ und die Eulerschen Winkel α,β,γ, die die Lage des Dreiecks im Raum festlegen. Unter der Annahme reiner Zentralkräfte ist der Grundzustand des Triton ein S-Zustand. Die translationsinvariante Eigenfunktion des Grundzustands hängt deshalb nur von den Seiten x,y,z ab. Für diesen Fall hat der Hamiltonoperator die Gestalt[6]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{m}\sum_{zykl.}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2}{x}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{y^2+z^2-x^2}{2yz}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial z}\right) + V(x) + V(y) + V(z) \qquad (3)$$

Bei Integrationen über den Konfigurationsraum hat das Volumelement in diesen Koordinaten die Gestalt:

$$d\tau = x\ y\ z\ dx\ dy\ dz\ .$$

Die Koordinaten x,y,z unterliegen der Bedingung:

$$|x-y| \leqq z \leqq x + y$$

Jacobische Koordinaten

Setzt man $\vec{s}_1 = \vec{r}_1-\vec{r}_2$ und $\vec{s}_2 = (\vec{r}_1+\vec{r}_2)/2-\vec{r}_3$, so erhält der Hamiltonoperator die Form:

$$H = -\frac{\hbar^2}{m}\left(\nabla_{\vec{s}_1}^2 + \frac{3}{4}\nabla_{\vec{s}_2}^2\right) + V(\vec{s}_1) + V\left(-\frac{\vec{s}_1}{2}+\vec{s}_2\right) + V\left(-\frac{\vec{s}_1}{2}-\vec{s}_2\right) \qquad (4)$$

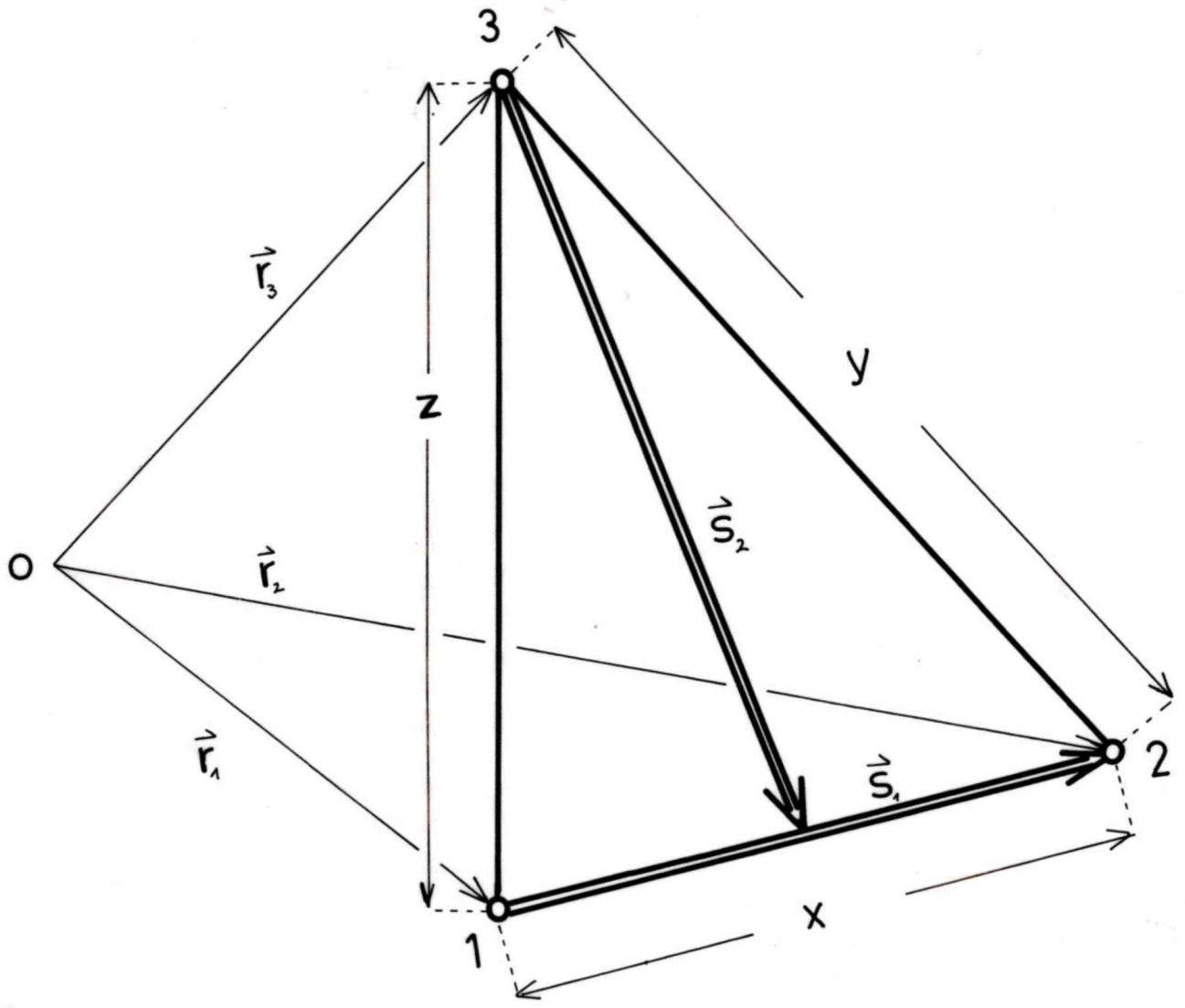


Abb.1

Auch hier ist der Operator der kinetischen Energie des Schwerpunkts unterdrückt.

Während sich die Dreieckskoordinaten besonders für die Durchführung von Integrationen empfehlen, sind die Jacobischen Koordinaten zur Untersuchung des asymptotischen Falles $|\vec{s}_1| << |\vec{s}_2|$ geeignet.

1.3 Der Variationsansatz zur Berechnung oberer Schranken für den Energieeigenwert

Da man numerische Integrationen vermeiden will, bedingt das Potential (1) einen Variationsansatz, dessen radiale Abhängigkeit durch Gaußfunktionen beschrieben wird. Dabei wird bewußt ein falsches asymptotisches Verhalten in Kauf genommen.

Für die Wellenfunktion wird folgender Variationsansatz gemacht: (in Dreieckskoordinaten s. 1.2)

$$\Psi = F \sum_i c_i \phi_i \qquad \phi_i = e^{-d_i(x^2+y^2+z^2)} \phi_o \qquad (5)$$

mit $F(x,y,z) = f(x)f(y)f(z)$ und $f(x) = 1-ge^{-hx^2}$.

Da Ψ symmetrisch gegen Vertauschung der Ortsvariablen ist, fordert das Pauliprinzip, daß ϕ_o, die Spinisospinfunktion zu $S = s_z = T = -t_z = 1/2$, antisymmetrisch in allen Variablen ist.

Mit dem Jastrowfaktor $F(x,y,z)$ soll den durch den soft-core erzeugten Zweierkorrelationen Rechnung getragen werden: er setzt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich des soft-core herab.

Nach dem Ritzschen Variationsprinzip erhält man den tiefsten Eigenwert E_o des Hamiltonoperators durch

$$E_o = \text{Min} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \qquad (6)$$

wenn man zur Variation alle quadratisch integrierbaren Funktionen ψ zuläßt. Beschränkt man sich aber auf die im Ansatz (5) definierte Funktionenklasse, so erhält man aus (6) nur eine obere Schranke $\bar{E}$ für den Eigenwert E_o:

$$E_o \leq \bar{E} = \text{Min} \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \qquad (7)$$

wobei das Gleichheitszeichen nur dann gilt, wenn die Eigenfunktion ψ_o unseres Hamiltonoperators in der Funktionenklasse (5) enthalten ist. Da es sich bei der Funktionenklasse (5) um eine mehrparametrige Schar von Funktionen handelt, reduziert sich die Variationsaufgabe (6) auf eine Extremalaufgabe: Gesucht sind die Parameter c_i, d_i, g, h, die $\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ zum Minimum machen. Das Minimum $\bar{E}$ ist dann die beste obere Schranke für den Eigenwert, den man mit dem Ansatz (5) erhalten kann.

1.4 Kritik der Hackenbroich'schen Methode

Wegen des großen Rechenaufwandes, mit dem jede Clustermodellrechnung verbunden ist, muß jeder Variationsansatz ein Kompromiß zwischen physikalischen Forderungen und rechentechnischen Notwendigkeiten sein. Deshalb sind auch in der Hackenbroich'schen Methode bewußt einige Vernachlässigungen gemacht, deren Berechtigung hier genauer untersucht werden soll:

a) Vernachlässigungen im Jastrowfaktor

Bei der Bildung von Matrixelementen, z. B.

$$H_{ij} = \langle F\phi_i|H|F\phi_j\rangle \qquad (8)$$

muß der Jastrowfaktor $F = f(x)f(y)f(z)$ ausmultipliziert werden, damit die Integration geschlossen durchführbar ist. Im Falle des Triton liefert F ausmultipliziert $2^3 = 8$ Summanden; da aber F quadratisch in den Integranden eingeht, zerfällt das Matrix-

element in $(2^3)^2 = 64$ Integrale. Im allgemeinen Fall von A Teilchen gibt es A(A-1)/2 Paare; für jedes Paar ij muß die Wellenfunktion bei kleinem Paarabstand durch einen Faktor f(ij) modifiziert werden. Der Jastrowfaktor besteht in diesem Falle also aus A(A-1)/2 Faktoren und gibt ausmultipliziert $2^{A(A-1)/2}$ Summanden. In das Matrixelement geht der Jastrowfaktor aber quadratisch ein und bewirkt, daß das Matrixelement aus $2^{A(A-1)}$ Integralen besteht. Das sind bei

H^3 $2^6 = 64$, bei He^4 $2^{12} = 4096$ und bei Li^6 2^{30} 10^9 Integrale,

so daß eine exakte Auswertung der Matrixelemente selbst für einen modernen Hochleistungscomputer nur für H^3, evtl. noch für He^4, möglich ist. Es ist deshalb nötig, die meisten der zum Matrixelement beitragenden Integrale zu vernachlässigen (s. Abschnitt 2.1 und 2.2).

b) Beschränkung des Variationsansatzes auf das Funktionensystem der ϕ_i

Das Funktionensystem der ϕ_i (s. Ansatz (5)) ist offensichtlich nicht vollständig, da es, abgesehen von den Korrelationen, die der Jastrowfaktor hereinbringt, allen Korrelationen mit $x^2 + y^2 + z^2 = \text{const.}$ dieselbe Wahrscheinlichkeit einräumt. Es muß deshalb geprüft werden, ob der Ansatz (5) flexibel genug ist, um die Eigenfunktion genügend gut zu approximieren, oder ob er erweitert werden muß.

c) Vernachlässigung nichtsymmetrischer Ortsfunktionen

Der Ansatz (5) kann auch bei genügend flexibler Ortsfunktion nicht Eigenfunktion des Hamiltonoperators (2) sein, da der antisymmetrischen Spinisospinfunktion ϕ_o durch die Spin-Austauschoperatoren P^{σ}_{ij} des Potentials (1) noch Spinisospinfunktionen anderer Symmetrie beigemischt werden. Eine Variationsrechnung mit einem Ansatz, der auch diese Spinisospinfunktionen

mit einschließt, und deshalb auch nichtsymmetrische Ortsfunktionen enthält, muß entscheiden, ob diese Vernachlässigung zu rechtfertigen ist.

d) Prüfung des Potentials am Triton

Es ist nicht gewiß, ob ein Potential, das die Nukleon-Nukleon-Streudaten und die Deuteron-Bindungsenergie fittet, auch die Bindungsenergie des Triton richtig wiedergibt. Es ist sehr wohl möglich, daß es mehrere Potentiale der Form (1) gibt, die die Nukleon-Nukleon-Streudaten und die Deuteron-Bindungsenergie richtig wiedergeben, am Triton jedoch verschiedene Ergebnisse liefern. Es ist deshalb nötig, in einer Rechnung, die über die Hackenbroich'sche Methode hinausgeht (die nur obere Schranken für den Eigenwert liefert), den zum Hamiltonoperator (2) gehörenden Eigenwert zu bestimmen.

e) Auswirkung der Vernachlässigungen auf He^4

Die für das Triton gewonnenen Ergebnisse sollen auf den He^4-Kern verallgemeinert und mit Hackenbroich's Ergebnis verglichen werden.

2. Auswirkung der Näherung im Jastrowfaktor auf die Erwartungswerte von potentieller und kinetischer Energie

2.1 Die Hackenbroich'sche Näherung im Erwartungswert der potentiellen Energie

Bei exakter Rechnung hat der Erwartungswert der potentiellen Energie die Form

$$\langle V\rangle_e = \frac{\langle\Psi|V|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \sum_{i>j=1}^{A} \frac{\langle F\phi|V(ij)|F\phi\rangle}{\langle F\phi|F\phi\rangle}$$

$$= \sum_{i>j=1}^{A} \frac{\langle \prod_{\mu>\nu=1}^{A} f(\mu\nu)\,\phi | V(ij) | \prod_{\mu>\nu=1}^{A} f(\mu\nu)\,\phi\rangle}{\langle \prod_{\mu>\nu=1}^{A} f(\mu\nu)\,\phi | \prod_{\mu>\nu=1}^{A} f(\mu\nu)\,\phi\rangle} \qquad (9)$$

Die Hackenbroich'sche Näherung besteht nun darin, daß aus dem Jastrowfaktor $F = \Pi f(\mu\nu)$ nur derjenige Korrelationsfaktor $f(\mu\nu)$ mitgenommen wird, der die Korrelation zwischen den beiden Teilchen beschreibt, deren Wechselwirkung berechnet werden soll:

$$\langle V\rangle_e \approx \langle V\rangle_g = \sum_{i>j=1}^{A} \frac{\langle f(ij)\,\phi|V(ij)|f(ij)\,\phi\rangle}{\langle f(ij)\,\phi|f(ij)\,\phi\rangle} \qquad (10)$$

Da in der Normierung die gleiche Vernachlässigung gemacht wird, kann man erwarten, daß der durch die Näherung gemachte Fehler zum größten Teil wieder ausgeglichen wird.

Ob dies wirklich der Fall ist, soll am Beispiel des Triton untersucht werden:

$$\langle V\rangle_e = 3\,\frac{\int \Psi^2 V(12)\,d\tau}{\int \Psi^2\,d\tau} = 3\,\frac{\int f^2(12)\,f^2(23)\,f^2(31)\,\phi^2(123)\,V(12)\,d\tau}{\int f^2(12)\,f^2(23)\,f^2(31)\,\phi^2(123)\,d\tau} \qquad (11)$$

Dies ist der exakte Ausdruck für den Erwartungswert der potentiellen Energie. Nimmt man in der weiteren Rechnung nur die Korrelation zwischen Teilchen 1 und 2 mit, so erhält man die Näherung:

$$\langle V\rangle_e \approx 3\,\frac{\int f(12)\,\phi^2(123)\,V(12)\,d\tau}{\int f(12)\,\phi^2(123)\,d\tau} = \langle V\rangle_g \qquad (12)$$

Der Unterschied zwischen $\langle V\rangle_e$ und $\langle V\rangle_g$ besteht darin, daß aus den Integralen von Formel (11) die Faktoren f(23)f(31) herausgekürzt worden sind. Dieses Kürzen ist in Strenge nur dann erlaubt, wenn die Integrale faktorisieren. Dazu müssen

1. sich die Integranden in Produktform bringen lassen:

$$\int \phi_1(u)\;\;\phi_2(v)\;\;\phi_3(w)\;du\;dv\;dw$$

2. die Integrationsvariablen u, v, w unabhängig voneinander sein. Dann nämlich zerfällt das Integral in ein Produkt aus drei Integralen:

$$\int \phi_1(u)du \qquad \int \phi_2(v)dv \qquad \int \phi_3(w)dw$$

Bei der Durchführung der Näherung ist Bedingung 1. verletzt. Denn $\phi(123) = \Sigma c_i \phi_i(123)$ läßt sich nicht in Produktform bringen. Für jede einzelne Funktion ϕ_i ist dies jedoch möglich, und wir werden uns deshalb zunächst für die weitere Untersuchung auf den Fall beschränken, daß die Wellenfunktion nur aus einer Gaußfunktion aufgebaut ist:[+)]

$$\phi = e^{-d(x^2+y^2+z^2)}$$

[+)] Wie sich der Fehler bei Überlagerung mehrerer Gaußfunktionen auswirkt, wird sich in 2.3 ergeben.

Im weiteren werden die in 1.2 definierten Dreieckskoordinaten verwendet.

Dann wird aus Formel (11):

$$\langle V\rangle_e = \frac{3\int_0^\infty x\,dx\, e^{-2\alpha x^2} f^2(x)\, V(x) \int_0^\infty y\,dy\, e^{-2\alpha y^2} f^2(y) \int_{|x-y|}^{x+y} z\,dz\, e^{-2\alpha z^2} f^2(z)}{\int_0^\infty x\,dx\, e^{-2\alpha x^2} f^2(x) \int_0^\infty y\,dy\, e^{-2\alpha y^2} f^2(y) \int_{|x-y|}^{x+y} z\,dz\, e^{-2\alpha z^2} f^2(z)} \qquad (13)$$

während sich der Näherungswert (12) schreibt als:

$$\langle V\rangle_g = \frac{3\int_0^\infty x\,dx\, e^{-2\alpha x^2} f^2(x)\, V(x) \int_0^\infty y\,dy\, e^{-2\alpha y^2} \int_{|x-y|}^{x+y} z\,dz\, e^{-2\alpha z^2}}{\int_0^\infty x\,dx\, e^{-2\alpha x^2} f^2(x) \int_0^\infty y\,dy\, e^{-2\alpha y^2} \int_{|x-y|}^{x+y} z\,dz\, e^{-2\alpha z^2}} \qquad (14)$$

Da die Koordinaten die Dreiecksungleichung $|x-y| \leq z \leq x + y$ befolgen müssen, sind die Integrationsgrenzen bei der Integration über z von x und y abhängig. Damit ist aber Bedingung 2. von Seite 13 verletzt, wonach ein Kürzen nur statthaft ist, wenn sich die Integrationen unabhängig voneinander ausführen lassen. Die Dreiecksgleichung verhindert also, daß $\langle V\rangle_e$ und $\langle V\rangle_g$ identisch sind. Um also über die Größe des bei der Näherung gemachten Fehlers etwas aussagen zu können, muß untersucht werden, in welchem Teil des Konfigurationsraumes die Dreiecksungleichung am stärksten wirkt, wo also ein Kürzen in Formel (11) zu großen Fehlern führen muß.

Zu diesem Zweck führen wir den Begriff der "healing distance" ein: Die "healing distance" l ist der Teilchenabstand, bei dem die Wellenfunktion ψ identisch mit der Wellenfunktion ϕ ohne Jastrowfaktor wird. Es ist also der Teilchenabstand, bei dem der Korrelationsfaktor f(x) praktisch 1 wird. Dieser Teilchenabstand ist etwa l = 1.2 fm, denn dann ist $f(1.2) = 1\text{-}6\cdot 10^{-3}$.

Für beliebiges x und für x, y > l ist die Näherung trivialerweise gut, da dann f(y) = f(z) = 1 ist.

Aber auch für $z > 1$, $x >> y$, $y < 1$ ist die Näherung gut. Denn dann gibt die Integration über z in Formel (13) näherungsweise:

$$\int_{|x-y|}^{x+y} e^{-2dz^2}\, z\, dz \approx 2y\, e^{-2dx^2}\, x \qquad (15)$$

Denn wegen $x >> y$ gibt die Integration praktisch den Wert des Integranden an der Stelle x, multipliziert mit der Länge des Integrationsintervalls $x + y - |x - y| = 2y$. Trotz Dreicksungleichung gehen jetzt Zähler und Nenner in ein Produkt von Integralen über und ein Kürzen, das $\langle V \rangle_e$ in $\langle V \rangle_g$ überführt, ist in diesem Fall statthaft. Bezeichnet man mit $\tilde{V}_e$ und $\tilde{V}_g$ die Beiträge des hier betrachteten Konfigurationsbereichs zu $\langle V \rangle_e$ bzw. $\langle V \rangle_g$, so gilt:

$$\tilde{V}_e = \frac{3\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2} V(x) \int_0^\infty 2y^2 dy\, f^2(y)\, e^{-2dy^2}}{\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2} \int_0^\infty 2y^2 dy\, f^2(y)\, e^{-2dy^2}} = \frac{3\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2} V(x)}{\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2}} \qquad (16)$$

$$\tilde{V}_g = \frac{3\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2} V(x) \int_0^\infty 2y^2 dy\, e^{-2dy^2}}{\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2} \int_0^\infty 2y^2 dy\, e^{-2dy^2}} = \frac{3\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2} V(x)}{\int_0^\infty x^2 dx\, e^{-4dx^2}}$$

Es ist für diesen Fall ($z > 1$, $y < 1$, $x >> y$) also tatsächlich der Beitrag zu $\langle V \rangle_e$ gleich dem Beitrag zu $\langle V \rangle_g$ (der Fall $y > 1$, $z < 1$, $x >> z$ läßt sich ähnlich behandeln), so daß für alle Konfigurationen, in denen nur Zweierkorrelationen eine Rolle spielen, die Näherung gut ist.

Wenden wir uns nun dem Teil des Konfigurationsraumes zu, in dem alle drei Teilchen nahe beieinander sind (x, y, z < 1).

Wir führen folgende Abkürzungen ein:

$$V_e = 3\int V(x)\, f^2(x) f^2(y) f^2(z)\, \phi^2\, d\tau$$

$$V_g = 3\int V(x)\, f^2(x)\, \phi^2\, d\tau$$

$$\Delta V = V_g - V_e = 3\int V(x)\, f^2(x)\, \phi^2 \left(1 - f^2(y) f^2(z)\right) d\tau \qquad (17)$$

$$N_e = \int f^2(x) f^2(y) f^2(z)\, \phi^2\, d\tau = \int \psi^2\, d\tau$$

$$N_g = \int f^2(x)\, \phi^2\, d\tau$$

$$\Delta N = N_g - N_e = \int f^2(x)\, \phi^2 \left(1 - f^2(y) f^2(z)\right) d\tau$$

Da wir bereits wissen, daß sich der Fehler für Konfigurationsbereiche mit y < 1, x, z > 1 und auch für z < 1, x, y > 1 heraushebt, brauchen wir die Integrale ΔT, ΔN nur über den Teil des Konfigurationsraumes auszuführen, in dem x, y, z < 1 ist. In diesen Bezeichnungen schreibt sich der Unterschied zwischen exaktem und genähertem Erwartungswert:

$$\Delta\langle V\rangle = \langle V\rangle_e - \langle V\rangle_g = \frac{V_e}{N_e} - \frac{V_g}{N_g} = \frac{\Delta N}{N_e}\left(\langle V\rangle_g - \frac{\Delta V}{\Delta N}\right) \qquad (18)$$

Dieses Ergebnis läßt sich folgendermaßen deuten: Bezeichnen wir mit $P_3(1) = \int_{x,y,z<1} \psi^2 d\tau \Big/ \int_{\infty} \psi^2 d\tau$ die Wahrscheinlichkeit, daß die drei Teilchen nahe beieinander sind (x, y, z < 1), so gibt

$$\frac{\Delta N}{N_e} = \frac{\int_{x,y,z<1} f^2(x)\, \phi^2\, d\tau - \int_{x,y,z<1} \psi^2\, d\tau}{\int_{\infty} \psi^2\, d\tau} = \Delta P_3(1) \qquad (19)$$

an, wie stark die Wahrscheinlichkeit $P_3(1)$ durch die Vernachlässigung von $f^2(y)f^2(z)$ vergrößert wird.

$\frac{\Delta V}{\Delta N} = V_1$ stellt eine Mittelung über das Potential 3V(x) dar. Da wir nur über den Konfigurationsbereich x, y, z < 1 integrieren, wird V_1 von $\langle V \rangle_g$ stark verschieden sein, und zwar ist $V_1 < \langle V \rangle_g$, denn hier wird hauptsächlich in der Gegend des Potentialminimums integriert, das bei etwa x = 1 fm liegt und eine Tiefe von -15o MeV hat. Daß außerdem auch über den soft-core integriert wird, beeinflußt das Ergebnis wenig, da der soft-core einmal durch $f^2(x)$ abgeschnitten wird und außerdem wegen des Faktors x vom Volumelement her nicht viel beitragen kann. Es gilt also auf jeden Fall $V_1 < \langle V \rangle_g$, da sich die Mittelung, die $\langle V \rangle_g$ liefert, über den ganzen Konfigurationsraum erstreckt, als auch über Bereiche, wo V(x) sehr klein ist. Wir bekommen also:

$$\Delta\langle V \rangle = \Delta P_3(1)(\langle V \rangle_g - V_1) > 0 \qquad (2o)$$

Das heißt, es ist stets $\langle V \rangle_e > \langle V \rangle_g$ - die Näherung täuscht also immer eine zu starke Anziehung vor.

$\Delta P_3(1)$ wurde durch numerische Integration gewonnen und ergab sich zu

$$\Delta P_3(1) = 0.009 \qquad (21)$$

$\langle V \rangle_g$ wurde durch Auswertung der Integrale berechnet:

$$\langle V \rangle_g \cong -41 \text{ Mev}^{+)}$$

Zusammen mit $V_1 \cong$ -15o MeV (Wert des Potentials im Minimum) ergibt dies für den Fehler im Erwartungswert der potentiellen Energie

$$V \cong 1 \text{ MeV}.$$

In Abb. 2 ist der Fehler im Erwartungswert der potentiellen Energie in Abhängigkeit von d, dem Abfallparameter in der Wellenfunktion aufgetragen. Hier wurde $\Delta\langle V \rangle$ nicht mit Hilfe von (2o)

+) Als Abfallparameter in der Wellenfunktion ϕ wurde gewählt: $d = 0.09 \text{ fm}^{-2}$; die Korrelationsfunktion hatte die Gestalt: $f(x) = 1-0.6e^{-3x^2}$ (x in fm).

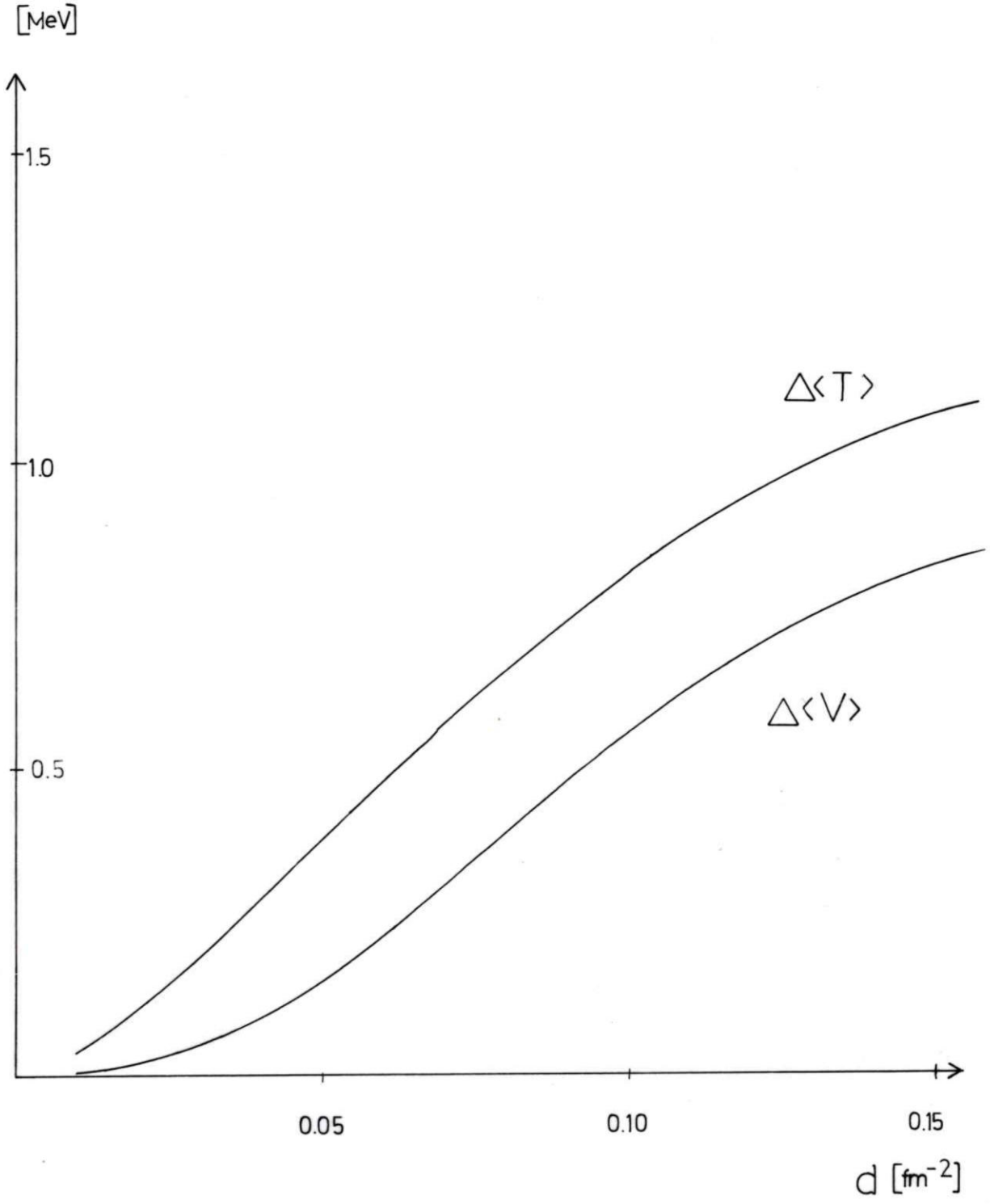


Abb.2

abgeschätzt, sondern durch Vergleich von exakter und genäherter Rechnung ermittelt. Die Abschätzung nach (2o) $\Delta\langle V\rangle \approx 1$ MeV für $d = 0.09$ fm^{-2} ordnet sich einigermaßen in die dort aufgetragenen Ergebnisse ein.

Auch die Abhängigkeit des Fehlers vom Abfallparameter d läßt sich mit Hilfe der Abschätzung (2o) gut verstehen:

Beachtet man, daß bei kleinem Abfallparameter d die Wellenfunktion sich über große Konfigurationsbereiche ausdehnt, so wird klar, daß $\Delta P_3(1)$ klein ist, denn dann ist unwahrscheinlich, daß sich drei Teilchen nahe beieinander befinden. Mit wachsendem Abfallparameter konzentriert sich die Wellenfunktion auf immer kleiner werdende Bereiche, so daß $\Delta P_3(1)$ wächst. V_1 bleibt konstant, da sich an der Mittelung von V(x) über den Bereich x, y, z < 1 nichts ändert.

$\langle V\rangle_g$ nähert sich mit wachsendem Abfallparameter d dem Wert V_1, da sich mit wachsendem Abfallparameter die Wellenfunktion mehr und mehr auf das Potentialminimum konzentriert. Es ist demnach verständlich, daß der Fehler $\Delta\langle V\rangle$ für kleine Abfallparameter d zunächst stark mit d anwächst, daß dann aber, sobald sich $\langle V\rangle_g$ an V_1 annähert, dieses Anwachsen gestoppt wird und der Fehler von d unabhängig wird.

2.2 Die Hackenbroich'sche Näherung im Erwartungswert der kinetischen Energie

Eine entsprechende Näherung wie bei der potentiellen Energie scheint hier zunächst nicht möglich, da der Operator der kinetischen Energie ein Einteilchenoperator ist, so daß bei der Bildung von Erwartungswerten nicht wie bei der potentiellen Energie eine bestimmte Zweierkorrelation im Jastrowfaktor ausgezeichnet ist. Der Operator für die kinetische Energie eines A-Teilchensystems

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{A}\nabla_i^2 \qquad (22)$$

läßt sich aber umformen in:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m\,A}\left(\sum_{i>j=1}^{A}(\nabla_i - \nabla_j)^2 + \left(\sum_{i=1}^{A}\nabla_i\right)^2\right) = T' + T_S \tag{23}$$

Er läßt sich also schreiben als Summe aus Zweiteilchenoperatoren plus Operator der kinetischen Energie des Schwerpunktes T_S. Da wir translationsinvariante Wellenfunktionen benutzen, hat T_S den Erwartungswert 0, so daß für translationsinvariante Wellenfunktionen gilt:

$$\langle T\rangle = \langle T'\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m\,A}\sum_{i>j=1}^{A}\langle(\nabla_i - \nabla_j)^2\rangle \tag{24}$$

In seiner Habilitationsschrit hat Hackenbroich für den Erwartungswert des Zweiteilchenoperators $\langle(\nabla_i-\nabla_j)^2\rangle$ folgende Näherung verwendet:

$$\begin{aligned}\langle F\phi\,|\,(\nabla_i-\nabla_j)^2\,|\,F\phi\rangle \approx{}& \langle\phi\,|\,(\nabla_i-\nabla_j)^2\,|\,\phi\rangle \\ &- \tfrac{A}{2}\langle\phi\,|\,(\nabla_i-\nabla_j)^2\,|\,\chi(ij)\,\phi\rangle \\ &- \tfrac{A}{2}\langle\phi\,\chi(ij)\,|\,(\nabla_i-\nabla_j)^2\,|\,\phi\rangle \\ &+ \tfrac{A}{2}\langle\phi\,\chi(ij)\,|\,(\nabla_i-\nabla_j)^2\,|\,\chi(ij)\,\phi\rangle\end{aligned} \tag{25}$$

mit $f(ij) = 1-\chi(ij)$.

Gleichzeitig wird in der Norm die Näherung verwendet:

$$\langle F\phi\,|\,F\phi\rangle \approx \langle\phi f(ij)\,|\,\phi f(ij)\rangle \tag{26}$$

Der Fehler, der bei dieser Näherung gemacht wird, ergibt sich beim Vergleich zwischen exakter und genäherter Rechnung für den Abfallparameter $d = 0.09\ \mathrm{fm}^{-2}$ zu $\Delta\langle T\rangle = +0.4$ MeV. Er ist also etwas kleiner als der Fehler im Erwartungswert der potentiellen Energie.

Diese Näherung ist jedoch für ein Ritzsches Variationsverfahren ungeeignet, da der so genäherte Erwartungswert nicht mehr positiv definit ist. Dies sieht man leicht durch folgende Umformung:

$$\langle (\nabla_i - \nabla_j)^2 \rangle_{genähert} = \frac{A}{2} \int \phi f(ij) (\nabla_i - \nabla_j)^2 f(ij) \phi \, d\tau \qquad (27)$$

$$- \left(\frac{A}{2} - 1\right) \int \phi (\nabla_i - \nabla_j)^2 \phi \, d\tau$$

Variiert ϕ bedeutend stärker als $\phi f(ij)$ (was natürlich bei physikalisch sinnvollen Parametern nicht der Fall ist), so kann der zweite Ausdruck in Formel (27) den ersteren überwiegen, und man bekommt als Erwartungswert für die kinetische Energie einen Wert kleiner Null. Dieser Fall tritt ein, wenn man die Parameter optimal durch ein Ritzsches Variationsverfahren bestimmt. Aus diesem Grunde wurde inzwischen diese Näherung aufgegeben, und man nähert im Erwartungswert der kinetischen Energie entsprechend wie im Erwartungswert der potentiellen Energie.[7)]

$$\langle T \rangle_e \approx \langle T \rangle_g = -\frac{\hbar^2}{2m A} \sum_{i>j=1}^{A} \frac{\langle \phi f(ij) | (\nabla_i - \nabla_j)^2 | f(ij) \phi \rangle}{\langle \phi f(ij) | f(ij) \phi \rangle} \qquad (28)$$

Im Falle des Triton erhält man:

$$\langle T \rangle_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int f(12) f(23) f(31) \phi (\nabla_1 - \nabla_2)^2 f(12) f(23) f(31) \phi \, d\tau}{\int f^2(12) f^2(23) f^2(31) \phi^2 \, d\tau} \qquad (29)$$

$$\langle T \rangle_g = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int f(12) \phi (\nabla_1 - \nabla_2)^2 f(12) \phi \, d\tau}{\int f^2(12) \phi^2 \, d\tau} \qquad (30)$$

Bei der potentiellen Energie hatten wir gesehen, daß, wenn ϕ nur durch eine einzige Gaußfunktion dargestellt wird, nur die Dreiecksungleichung verhindert, daß $\langle V\rangle_e$ durch Kürzen in $\langle V\rangle_g$ übergeführt werden kann, denn der Integrand ließ sich in ein Produkt von Funktionen zerlegen, von denen jede für sich nur von einer Variablen abhängt. Das ist hier nicht möglich, da der Zweiteilchenoperator $(\nabla_i-\nabla_j)^2$ nicht multiplikativ wie V(12) wirkt, so daß hier bereits Bedingung 1. von Seite 13 verletzt ist. Diese Näherung wird deshalb auch im Bereich der Zweierkorrelationen versagen. Um das zu zeigen, betrachten wir den Fall $x, z > 1$, $y < 1$. Die Beiträge dieses Bereichs zu $\langle T\rangle_e$ bzw. $\langle T\rangle_g$ bezeichnen wir mit $\tilde{T}_e$ bzw. $\tilde{T}_g$.

Dann erhalten wir wegen $f(x) = f(z) = 1$ aus (29):

$$\tilde{T}_e = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\int f(23)\,\phi\,(\nabla_1-\nabla_2)^2 f(23)\,\phi\,d\tau}{\int f^2(23)\,\phi^2\,d\tau} \tag{31}$$

Durch Anwenden der Produktregel bei der Differentiation erhalten wir:

$$\tilde{T}_e = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\int f^2(23)\,\phi\,(\nabla_1-\nabla_2)^2\,\phi\,d\tau}{\int f^2(23)\,\phi^2\,d\tau}\right. \tag{32}$$

$$\left. + \frac{2\int f(23)\,\phi\left[(\nabla_1-\nabla_2)\,\phi\right](\nabla_1-\nabla_2) f(23)\,d\tau + \int f(23)\,\phi^2(\nabla_1-\nabla_2)^2 f(23)\,d\tau}{\int f^2(23)\,\phi^2\,d\tau}\right\}$$

Nun ist aber für $\phi = \exp(-d(r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2))$

$$(\nabla_1-\nabla_2)^2\phi = (36d^2r_{12}^2 - 36\,d)\phi$$

In diesem speziellen Fall wirkt also $(\nabla_1-\nabla_2)^2$ wie ein multiplikativer Operator, so daß wir das erste Integral aus (32)

$$\int f^2(23)\,\phi\,(\nabla_1-\nabla_2)^2\,\phi\,d\tau$$

$$= 36\,d\int (d\,r_{12}^2 - 1)\,e^{-2d r_{12}^2}\cdot f^2(23)\,e^{-2d r_{23}^2}\cdot e^{-2d r_{31}^2}\,d\tau \tag{33}$$

entsprechend wie (15) in ein Produkt aus drei Integralen zerlegen können. Die Voraussetzung für ein Herauskürzen der Korrelationsfunktion f(23) sind also für dieses Integral gegeben. Es läßt sich in diesem Konfigurationsbereich exakt in $\tilde{T}_g$ überführen, so daß aus (32) für den exakten Wert folgt:

$$\tilde{T}_e = \tilde{T}_g \tag{34}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{2\int f(23)\,\phi\left[(\nabla_1-\nabla_2)\phi\right](\nabla_1-\nabla_2)f(23)\,d\tau+\int f(23)\,\phi^2(\nabla_1-\nabla_2)^2 f(23)\,d\tau}{\int f^2(23)\,\phi^2\,d\tau}$$

In den beiden auf der rechten Seite von Gl. (34) verbleibenden Integralen wirkt der Differentialoperator auch auf f(23). Da der Korrelationsfaktor f(23) in dem hier interessierenden Bereich stark variiert, darf er bei der Berechnung der kinetischen Energie nicht vernachlässigt werden. Eine Auswertung der beiden Integrale ergibt +0.4 MeV, so daß wir für den Bereich, in dem Zweierkorrelationen wichtig sind, erhalten

$$\Delta\langle T\rangle = \tilde{T}_e - \tilde{T}_g = 0.4 \text{ MeV}$$

Bereits in den Zweierkorrelationen versagt also diese Näherung, und zwar gibt sie, abgesehen von den Fehlern, die von den Dreierkorrelationen herrühren, eine um ca. 0.4 MeV zu kleine kinetische Energie. Dies ist verständlich, denn das Weglassen von Faktoren f(ij) im Jastrowfaktor bewirkt nicht nur, daß man effektiv über einen größeren Konfigurationsbereich integriert (dieser Fehler wird ja durch eine entsprechende Manipulation in der Norm kompensiert), sondern es wird außerdem die Wellenfunktion glatter und die kinetische Energie folglich kleiner.

Im weiteren soll nun der Bereich des Konfigurationsraumes untersucht werden, in dem Dreierkorrelationen eine Rolle spielen ($x, y, z < 1$). Entsprechend zu (17) führen wir folgende Abkürzungen ein:

$$T_e = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \bar{\phi}\, p\, (\nabla_1-\nabla_2)^2\, \bar{\phi}\, p\, d\tau$$

$$T_g = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \bar{\phi}\, (\nabla_1-\nabla_2)^2\, \bar{\phi}\, d\tau$$

$$\Delta T = T_g - T_e = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \bar{\phi}\, \left((\nabla_1-\nabla_2)^2 - p(\nabla_1-\nabla_2)^2 p\right)\bar{\phi}\, d\tau$$

$$N_e = \int \bar{\phi}^2 p^2\, d\tau \qquad (35)$$

$$N_g = \int \bar{\phi}^2\, d\tau$$

$$\Delta N = N_g - N_e = \int \bar{\phi}^2 (1-p^2)\, d\tau$$

$\bar{\phi}$ = $\phi(123)f(12)$ ist die Wellenfunktion, multipliziert mit der nicht vernachlässigten Korrelationsfunktion.

$p = f(23)f(31)$ sind die vernachlässigten Korrelationen.

Mit diesen Bezeichnungen erhält man für den Unterschied zwischen exakter und genäherter Rechnung:

$$\Delta\langle T\rangle = \langle T\rangle_e - \langle T\rangle_g = \frac{T_e}{N_e} - \frac{T_g}{N_g} = \frac{\Delta N}{N_e}\left(\langle T\rangle_g - \frac{\Delta T}{\Delta N}\right) \qquad (36)$$

Durch Anwendung der Produktregel können wir ΔT in zwei Integrale aufspalten, dabei wirkt im ersten der Differentialoperator nur auf $\bar{\phi}$, im zweiten aber (hauptsächlich) auf p:

$$\Delta T = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\int \bar{\phi}\, (1-p^2)\nabla_{12}^2\, \bar{\phi}\, d\tau - \int\left(2\bar{\phi}\, p\left[\nabla_{12}\bar{\phi}\right]\nabla_{12} p + \bar{\phi}^2 p\, \nabla_{12}^2 p\right) d\tau\right\} \qquad (37)$$

$\nabla_{12} = \nabla_1 - \nabla_2$

so daß wir $\frac{\Delta T}{\Delta N}$ aufspalten können in

$$\frac{\Delta T}{\Delta N} = T_\phi - T_p \qquad (38)$$

Dabei ist T_ϕ der Beitrag zur kinetischen Energie der Wellenfunktion ohne die vernachlässigten Korrelationsfunktionen f(23)f(31) aus dem Bereich x, y, z < 1. T_p ist die kinetische Energie der vernachlässigten Korrelationen p =f(23)f(31). Da die Korrelations-

funktionen in diesem Bereich stärker variieren als die Wellenfunktion selbst, wird $T_p > T_\phi$ sein, so daß wir für den Fehler in der kinetischen Energie erhalten:

$$\Delta\langle T\rangle = \Delta P_3(1)(\langle T\rangle_g - T_\phi + T_p) > \Delta P_3(1)\langle T\rangle_g > 0 \qquad (39)$$

Ohne $T_p - T_\phi$ abzuschätzen, kann man wegen $T_p - T_\phi > 0$ den Fehler im Erwartungswert der kinetischen Energie nach unten abschätzen mit

$$\Delta\langle T\rangle > \Delta P_3(1)\langle T\rangle_g = 0.3 \text{ MeV}^{+)}$$

Zusammen mit dem im Bereich der Zweierkorrelationen ermittelten Fehler von 0.4 MeV gibt dies einen Gesamtfehler in der kinetischen Energie von mindestens 0.7 MeV. Diese Abschätzung ordnet sich gut in die in Abb. 2 aufgetragenen Werte ein, die durch Vergleich von exakter und genäherter Rechnung ermittelt wurden.

Zusammenfassung

Nachdem in 2.1 und 2.2 Gesagten kann man sich folgendes Bild über die Auswirkung der Näherung machen:

Das nicht statthafte Herauskürzen der Korrelationsfaktoren f(23)f(31) aus den exakten Ausdrücken für potentielle und kinetische Energie bringt mit sich, daß die Bereiche, in denen f(23) und f(31) kleiner 1 sind, bei der Berechnung der Erwartungswerte mit zu hohem Gewicht eingehen. Dies kann durch eine entsprechende Vernachlässigung in der Norm nur dann kompensiert werden, wenn in den besagten Bereichen die mittlere potentielle bzw. kinetische Energie nicht stark vom Erwartungswert abweicht.

Beim Erwartungswert der potentiellen Energie trifft dies in dem Bereich des Konfigurationsraumes nicht zu, in dem alle drei Teilchen nahe beieinander sind (x, y, z < 1). In diesem Bereich

---

+) Als Abfallparameter in der Wellenfunktion ϕ wurde gewählt: $d = 0.09\ \text{fm}^{-2}$; die Korrelationsfunktion hatte die Gestalt: $f(x) = 1 - 0.6e^{-3x^2}$ (x in fm). Das gibt $\langle T\rangle_g = 35.9$ MeV.

trägt hauptsächlich das Potentialminimum zum Erwartungswert bei, was zur Folge hat, daß durch die Näherung eine stärkere Anziehung vorgetäuscht wird.

Im Erwartungswert der kinetischen Energie bewirkt die Vernachlässigung der Korrelationsfaktoren f(23)f(31) zweierlei: Einmal wird, wie oben dargelegt, mit großem Gewicht über den Bereich x, y, z < 1 integriert. In diesem Bereich variiert die Wellenfunktion besonders stark, und man erhält deshalb durch die Näherung eine größere kinetische Energie als durch die exakte Rechnung.

Dem entgegen wirkt ein zweiter Effekt: Durch Vernachlässigung der Korrelationsfaktoren wird die Wellenfunktion glatter gemacht und somit die kinetische Energie verkleinert. Dieser Effekt überwiegt den ersteren, zumal er nicht auf den Konfigurationsbereich x, y, z < 1 beschränkt bleibt, sondern auch im Bereich der Zweierkorrelationen $y<1$; $x, z>1$ und $z<1$; $x, y>1$ wirkt.

Man erhält also durch die Näherung eine kleinere kinetische Energie und zusammen mit dem Fehler in der potentiellen Energie, der das gleiche Vorzeichen hat, wird die Näherung immer eine zu starke Bindung ergeben als in Wirklichkeit vorliegt.

2.3 Vergleich der von Hackenbroich angegebenen oberen Schranke mit dem exakten Wert

Abb. 2 zeigt, daß für kleine Abfallparameter d der Fehler nur wenige Zehntel MeV beträgt, für große Abfallparameter jedoch 1 bis 2 MeV. Nun sind es gerade die großen Abfallparameter, die bei der Variationsrechnung am stärksten bevorzugt werden, so daß man in der oberen Schranke einen Fehler von der Größenordnung 1 bis 2 MeV erwarten muß. Hackenbroich[3] hat als beste Schranke für das Triton

$$\bar{E} = -7.29 \text{ MeV}$$

angegeben. Diese Schranke wurde durch eine Überlagerung von 6 Gaußfunktionen im Ansatz (5) erreicht.

Die Abfallparameter d_i und die Überlagerungsparameter c_i hatten die Werte

d_i	o.o1	o.o3	o.o6	o.o9	o.12	[o.16 fm^{-2}]
c_i	$1.82\cdot10^{-4}$	$5.92\cdot10^{-3}$	$1.28\cdot10^{-2}$	$4.81\cdot10^{-2}$	$-4.4o\cdot10^{-2}$	$1.2\cdot10^{-1}$

Als Korrelationsfunktion wurde verwendet:

$$f(x) = 1-o.6e^{-3x^2} \quad x \text{ in fm} \qquad (4o)$$

Die exakte Rechnung mit diesen Parametern gab den Wert:

$$\bar{E}_e = -6.41 \text{ MeV}.$$

Wegen der großen Diskrepanz zwischen exaktem und genähertem Wert werden im weiteren alle Matrixelemente exakt ausgewertet werden.

3. Prüfung und Verbesserung der Testfunktion

3.1 Berechnung einer unteren Schranke für den Energieeigenwert

Nachdem sich die von Hackenbroich angegebene Schranke von -7.29 MeV bei exakter Rechnung auf-6.41 MeV erhöht hat, muß untersucht werden, ob das Potential zu schwach ist, um den tatsächlichen Eigenwert von -8.5 MeV zu liefern, oder ob die Testfunktionnicht flexibel genug ist, sich der Eigenfunktion anzupassen.

Um ein Maß für die Verbesserungsbedürftigkeit der Testfunktion zu erhalten, berechnen wir zu der bereits vorhandenen oberen Schranke nach der Formel von Temple[8] eine untere Schranke für den Eigenwert:

$$E_o \geq \underline{E} = \langle H \rangle - \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{E_1 - \langle H \rangle} = \frac{\langle H^2 \rangle - E_1 \langle H \rangle}{\langle H \rangle - E_1} \qquad (41)$$

E_1 ist die Energie des ersten angeregten Zustands des Systems - in unserem Fall die tiefste Kontinuumsenergie (=Grundzustandsenergie des Deuterons). Dabei wird vorausgesetzt: $\langle H \rangle - E_1 < 0$.

Da jedoch noch nicht bekannt ist, ob die bei Hackenbroich von vornherein vernachlässigten nicht totalsymmetrischen Anteile in der Wellenfunktion nicht doch eine Rolle spielen, können wir eine Diskrepanz zwischen oberer und unterer Schranke nicht direkt mit der eventuell mangelhaften Flexibilität des Ansatzes (5) identifizieren. Um die beiden Effekte zu trennen, werden wir zunächst nur ein vereinfachtes Dreiteilchenproblem behandeln, das sich mit einem totalsymmetrischen Ansatz lösen läßt - vorausgesetzt, der Ansatz hat die nötige Flexibilität.

Das Potential Gleichung (1) läßt sich aufspalten in

$$V = V_{eff} + V'$$

mit

$$V_{eff}^{(12)} = \frac{1}{4}\,(V_t(12) + V_s(12))(1 + P_{12}^M) \qquad (42)$$

$$V'(12) = \frac{1}{4}\,(V_t(12) - V_s(12))P_{12}^{\sigma}(1 + P_{12}^M)$$

Nur ein Dreiteilchenproblem mit dem Potential V_{eff} läßt sich mit einem Ansatz, der ein Produkt ist aus totalsymmetrischer Ortsfunktion und antisymmetrischer Spinisospinfunktion $\psi = u_0 \phi_0$ lösen, da V_{eff} keine Spin-Austauschoperatoren enthält.

Es ist nützlich anzumerken, daß die oberen Schranken, berechnet mit Ansatz (5), für tatsächliches Potential und für effektives Potential gleich sind, denn das Spinisospin-Matrixelement von V' bezüglich ϕ_0 verschwindet:

$$\langle \phi_0 | V' | \phi_0 \rangle = 0$$

und folglich gilt:

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \langle T \rangle + \langle V_{eff} \rangle + \langle V' \rangle = \langle T \rangle + \langle V_{eff} \rangle = \langle H_{eff} \rangle \qquad (43)$$

Dagegen sind die für totales und effektives Potential berechneten unteren Schranken verschieden, aus zwei Gründen:

Einmal ist

$$\langle \psi | H^2 | \psi \rangle = \langle u_0 \phi_0 | T^2 | u_0 \phi_0 \rangle + \langle u_0 \phi_0 | VT + TV | u_0 \phi_0 \rangle + \langle u_0 \phi_0 | V^2 | u_0 \phi_0 \rangle$$

$$= \langle u_0 \phi_0 | T^2 | u_0 \phi_0 \rangle + \langle u_0 \phi_0 | V_{eff} T + T V_{eff} | u_0 \phi_0 \rangle$$

$$+ \langle u_0 \phi_0 | V'T + TV' | u_0 \phi_0 \rangle$$

$$+ \langle u_0 \phi_0 | V_{eff}^2 | u_0 \phi_0 \rangle + 2\langle u_0 \phi_0 | V_{eff} V' | u_0 \phi_0 \rangle + \langle u_0 \phi_0 | V'^2 | u_0 \phi_0 \rangle$$

Nutzen wir aus, daß man ϕ_o durch die Operatoren T und V_{eff} durchziehen kann, und daß das Spinisospin-Matrixelement von V' verschwindet, so bekommen wir:

$$\langle H^2\rangle = \langle T^2\rangle + \langle TV_{eff}\rangle + \langle V_{eff}T\rangle + \langle V_{eff}{}^2\rangle + \langle V'^2\rangle = \langle H_{eff}{}^2\rangle + \langle V'^2\rangle \qquad (44)$$

Nun ist aber $\langle V'^2\rangle > 0$ und somit $\langle H^2\rangle > \langle H_{eff}{}^2\rangle$.

Außerdem ist zu beachten, daß die in die untere Schranke eingehende Energie E_1 für Rechnungen mit totalem und effektivem Potential verschieden ist, denn es handelt sich ja hier um zwei verschiedene Dreiteilchensysteme, in denen gemäß Gleichung (1) und (42) verschiedene Kräfte wirken. Folglich werden die Energien des ersten angeregten Zustands verschieden sein.

Berechnet man E_1 mit dem tatsächlichen Potential, so erhält man den Energieeigenwert des Deuterons: $E_1 = -2.22$ MeV.

Berechnet man E_1 jedoch mit dem effektiven Potential, so erhält man

$$E_1^e = -0.22 \text{ MeV}^{+)}. \qquad (45)$$

Der große Unterschied $\Delta E_1 = E_1 - E_1^e = -2$ MeV beruht darauf, daß im realen Deuteron das Triplettpotential wirkt, während im Deuteron, berechnet mit effektivem Potential, nur der Mittelwert von Triplett- und Singulettpotential wirkt, was eine geringere Anziehung liefert.

Beachtet man die Gleichungen (44) und (45), so erhält man schließlich für die mit dem totalen Potential berechnete untere Schranke

$$\underline{E} = \frac{\langle H_{eff}{}^2\rangle + \langle V'^2\rangle - E_1^e\langle H\rangle - \Delta E_1\langle H\rangle}{\langle H\rangle - E_1^e - \Delta E_1}$$

+) Da die Ungleichung (41) gültig bleibt, wenn man für E_1 eine untere Schranke einsetzt, genügt es, E_1 selbst mit der Temple'schen Formel nach unten abzuschätzen. Dazu wurde für die Wellenfunktion des Deuterons der Variationsansatz gemacht: $\chi(r) = \Sigma g_i e^{-hr^2}$.

$$= \underline{E}^{eff} + (\underline{E}^{eff} - \bar{E}) \frac{\Delta E}{\langle H \rangle - E_1} + \frac{\langle V'^2 \rangle}{\langle H \rangle - E_1} < \underline{E}^{eff} \qquad (46)$$

so daßalso die zum effektiven Potential gehörende untere Schranke höher liegt als die für das tatsächliche Potential berechnete. Im folgenden werden wir zunächst das System mit effektivem Potential behandeln, und es ist somit für den Rest dieses Kapitels unter Potential stets das effektive Potential (42) zu verstehen. Ebenso beziehen sich die angegebenen unteren Schranken $\underline{E}$ und die Energie des ersten angeregten Zustands auf das mit effektivem Potential gebundene Teilchensystem.

Um optimale obere und untere Schranken zu erhalten, werden die in die Schranken eingehenden freien Parameter g, h, c_i, d_i variiert. Die lineare Abhängigkeit der Testfunktion (5) von den Überlagerungsparametern c_i erlaubt eine direkte Bestimmung der optimalen c_i. Die bezüglich der oberen Schranke optimalen c_i erhält man aus

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial c_i} = 0 = \frac{\partial}{\partial c_i} \frac{\sum_{i,j} c_i c_j \int \phi_i H \phi_j \, d\tau}{\sum_{i,j} c_i c_j \int \phi_i \phi_j \, d\tau} \qquad (47)$$

Während man die bezüglich der unteren Schranke optimalen c_i erhält aus:

$$\frac{\partial \underline{E}}{\partial c_i} = 0 = \frac{\partial}{\partial c_i} \frac{\sum_{i,j} c_i c_j \int \phi_i (H^2 - E_1 H) \phi_j \, d\tau}{\sum_{i,j} c_i c_j \int \phi_i (H - E_1) \phi_j \, d\tau} \qquad (48)$$

Beide Gleichungen führen auf ein Matrixeigenwertproblem, denn die Differentiation eines Ausdrucks der Form

$$\lambda = \frac{\sum_{i,j} c_i c_j A_{ij}}{\sum_{i,j} c_i c_j B_{ij}} \qquad (49)$$

nach den c_i gibt

$$\frac{\partial \lambda}{\partial c_i} = \frac{\sum_j c_j A_{ij} \sum_{ij} c_i c_j B_{ij} - \sum_j c_j B_{ij} \sum_{ij} c_i c_j A_{ij}}{\left(\sum_{ij} c_i c_j B_{ij}\right)^2}$$

$$= \frac{\sum_j c_j A_{ij} - \lambda \sum_j c_j B_{ij}}{\sum_{ij} c_i c_j B_{ij}}$$

Die Forderung $\frac{\partial \lambda}{\partial c_i} = 0$ liefert die Gleichung

$$\sum_j c_j A_{ij} = \lambda \sum_j c_j B_{ij} \tag{50}$$

oder in Matrixschreibweise mit $\mathcal{A} = (A_{ij})$, $\mathcal{B} = (B_{ij})$, $\vec{c} = (c_i)$

$$\mathcal{A}\vec{c} = \lambda \mathcal{B}\vec{c} \tag{51}$$

Die beste obere Schranke ist demnach der tiefste Eigenwert des Eigenwertproblems (51), wenn man setzt

$$A_{ij} = \int \phi_i H \phi_j \, d\tau$$
$$B_{ij} = \int \phi_i \phi_j \, d\tau \tag{52}$$

Die optimalen c_i sind die Komponenten des zum tiefsten Eigenwert gehörenden Eigenvektors.

Die beste untere Schranke ist der kleinste[+)] Eigenwert des Eigenwertproblems (51), wenn man setzt:

$$A_{ij} = \int \phi_i (H^2 - E_1 H) \phi_j \, d\tau$$
$$B_{ij} = \int \phi_i (H - E_1) \phi_j \, d\tau \tag{53}$$

+) Eigentlich müßte der größte Eigenwert die beste untere Schranke sein, doch die zur Temple'schen Formel gehörende Bedingung $\langle H \rangle - E_1 < 0$ wird nur vom Eigenvektor des tiefsten Eigenwerts erfüllt.

Die optimalen c_i sind die Komponenten des zu diesem Eigenwert gehörenden Eigenvektors.

Die so erhaltenen Schranken hängen noch von den Parametern g, h, d_i ab, die ebenfalls variiert werden.

Für ihre optimalen Werte lassen sich keine einfachen Gleichungen angeben, da sie in komplizierter Form in die Schranken eingehen. Es ist deshalb nötig, die Suche nach den optimalen Parametern g, h, d_i der Rechenmaschine zu überlassen, um die besten Schranken, die der Ansatz (5) liefern kann, zu erhalten.

Es ergibt sich schließlich:

$$\bar{E} = -6.44 \text{ MeV} \geq E_o \geq \underline{E} = -13.87 \text{ MeV} \qquad (54)$$

Die optimalen Überlagerungsparameter c_i und die optimalen Abfallparameter d_i im langreichweitigen Teil der Wellenfunktion (5) haben die Werte:

d_i	$2.2o9\cdot1o^{-2}$	$7.524\cdot1o^{-2}$	$1.313\cdot1o^{-1}$	$1.332\cdot1o^{-1}$	fm^{-2}
c_i	$9.o13\cdot1o^{-3}$	$1.947\cdot1o^{-1}$	-6.183	6.418	

Als Korrelationsfunktion wurde verwendet:

$$f(x) = 1-o.5446\cdot e^{-2.4ox^2} \quad x \text{ in fm} \qquad (55)$$

Es gelingt nicht, durch Überlagerung von zusätzlichen Funktionen ϕ_i aus der Funktionenklasse des Ansatzes (5) der Testfunktion soviel Flexibilität zu geben, daß der große Unterschied zwischen oberer und unterer Schranke verringert werden kann. Das ist eigentlich verständlich, denn die Funktionen ϕ_i sind weit davon entfernt, ein vollständiges Funktionensystem zu bilden, da sie, abgesehen von der Modifikation, die der Jastrowfaktor hereinbringt, allen Dreieckskonfigurationen mit $x^2+y^2+z^2$ = const. gleiche Wahrscheinlichkeit geben. Die Funktionen ϕ_i bilden auch kein Orthogonalsystem, was zur Folge hat, daß alle zusätzlichen Funktionen ϕ_i,

die man noch überlagern könnte, bereits im wesentlichen in den ersten vier hier verwendeten Funktioen ϕ_i enthalten sind.

3.2 Analyse der Fehler in der Testfunktion

Das in 3.1 erhaltene Ergebnis (54) ist unbefriedigend, da der große Abstand zwischen oberer und unterer Schranke keinerlei Aussagen darüber zuläßt, ob das Potential die richtige Bindungsenergie des Triton gibt oder nicht. Wir müssen deshalb versuchen, noch genauere Informationen über die Testfunktion und den Eigenwert zu erhalten.

E.W.Schmid und J.Schwager[9] haben gezeigt, daß die nach der Temple'schen Formel (41) berechnete untere Schranke $\underline{E}$ die beste untere Schranke ist, die man für den Eigenwert E_o bekommen kann, wenn für die Testfunktion nur $\langle H^2 \rangle$, $\langle H \rangle$ und die Energie des ersten angeregten Zustands E_i bekannt sind. Es ist nur dann möglich, schärfere Aussagen über den Eigenwert zu machen, wenn Information über die Spektraldarstellung der Testfunktion vorliegt:

Mit der Entwicklung der Testfunktion nach den Eigenfunktionen ψ_i des Hamiltonoperators ($H\psi_i = E_i\psi_i$)[+)]

$$\Psi = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_i \Psi_i \tag{56}$$

bilden die folgenden beiden Gleichungen eine Identität:

$$E_o = \langle H \rangle - \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{\epsilon - \langle H \rangle} \tag{57}$$

$$\epsilon = \frac{\langle H^2 \rangle - E_o \langle H \rangle}{\langle H \rangle - E_o} = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} a_i^2 (E_i - E_o) E_i}{\sum_{i=0}^{\infty} a_i^2 (E_i - E_o)} \tag{58}$$

+) Wir nehmen ein diskretes Eigenwertspektrum an. Dies läßt sich immer erreichen, wenn man das System in einen großen Kasten einschließt.

Hat man keinerlei Information über die Spektraldarstellung (56), so kann man über die Größe ε nur die Aussage machen

$$E_1 \leq \varepsilon \leq \infty \tag{59}$$

was in (57) eingesetzt die Schranken nach Ritz bzw. Temple ergibt. Jede Information über die Spektraldarstellung (56), die es erlaubt, die Energie ε (58) besser nach oben bzw. nach unten abzuschätzen als (59), liefert mit Hilfe von (57) eine bessere obere bzw. untere Schranke für den Eigenwert E_o als die Formel von Ritz bzw. Temple. Da in der Praxis meist $\varepsilon >> E_1$ ist, ist man nur an einer Verbesserung der nach Temple berechneten unteren Schranke interessiert. Die obere Schranke liegt dann ohnehin relativ nahe am Eigenwert.

Wie kann man sich nun Information über die Spektraldarstellung (56) der Testfunktion verschaffen?

Aus den Fluktuationen der Funktion

$$p = \frac{H\psi}{\psi} \tag{60}$$

im Konfigurationsraum kann man auf die Energien E_i der beigemischten Eigenfunktionen des angeregten Spektrums schließen.

Betrachten wir den einfachsten Fall, bei dem nur eine Eigenfunktion beigemischt ist:

$$\psi = a_o\psi_o + a_i\psi_i \tag{61}$$

dann erhält man für $p = \frac{H\psi}{\psi} = \frac{a_oE_o\psi_o + a_iE_i\psi_i}{a_o\psi_o + a_i\psi_i} = E_o + \frac{a_i(E_i - E_o)\psi_i}{a_o\psi_o + a_i\psi_i}$

(62)

Das Verhalten der Funktion $p = \frac{H\psi}{\psi}$ liefert uns Information über die Nullstellen der beigemischten Eigenfunktion ψ_i:

Die Eigenfunktion ψ_i hat überall da Nullstellen, wo $p = E_o$ ist. (Da wir den Eigenwert E_o nicht kennen, müssen wir ihn durch seine obere Schranke $\bar{E}$ ersetzen, und diese Aussage etwas schwächer formulieren: in der Nähe der Stellen, wo $p = \bar{E}$ ist, hat ψ_i Nullstellen).

Die Eigenfunktion ψ_i beschreibt einen angeregten Zustand unseres Systems - wie stark angeregt dieser Zustand ist, können wir qualitativ aus der Dichte der Nullstellen entnehmen, da die Wellenfunktion eines stark angeregten Zustands viele Knoten hat.

Quantitative Aussagen über die Anregungsenergie sind mit Hilfe der Unschärferelation möglich. Diese kann zwar nur die kinetische Energie des Zustands abschätzen, doch mit der kinetischen Energie hat man auch schon ein grobes Maß für die gesamte Energie, da ein Zustand mit vielen Knoten im Vergleich zur kinetischen Energie nur eine relativ geringe potentielle Energie hat.

Für die in (54) angegebene Testfunktion ist in Abb. 3

$$p(x,y,z) = \frac{H\psi(x,y,z)}{\psi(x,y,z)}$$

in Abhängigkeit von z und u = x+y+z bei x = y aufgetragen. Und zwar wurde für $p \geq \bar{E} + 1$ MeV im Punkt (z,u) ein "+" eingesetzt, während für $p \leq \bar{E} - 1$ MeV im Punkt (z,u) ein "-" eingesetzt wurde. Somit sind die freigebliebenen Bereiche in der z,u-Ebene diejenigen Konfigurationen, in denen p um maximal ±1 MeV von $\bar{E}$ abweicht, wo also die Testfunktion ψ die Eigenfunktion ψ_o relativ gut annähert, und wo die Nullstellen der beigemischten Eigenfunktionen ψ_i liegen.

Man ersieht aus Abb. 3, daß nur wenige Bereiche vorhanden sind, in denen p = const. = $\bar{E}$ ist, wie man es von einer guten Testfunktion erwarten würde. Insbesondere ist nicht ersichtlich, in welchem Konfigurationsbereich die Testfunktion besonders verbesserungsbedürftig ist, da sie offenbar fast überall bedeutend von der Eigenfunktion abweicht.

Aus den verschiedenen Nullstellenabständen in den verschiedenen Konfigurationsbereichen kann man mit Hilfe der Unschärferelation Anregungsenergien E_i von 5o - 2oo MeV ableiten. Um jedoch die Größe ε (58), die die Form einer mittleren Anregungsenergie der beigemischten Eigenfunktionen hat, berechnen zu können, muß aber auch die Form des Anregungsspektrums bekannt sein. Die Form

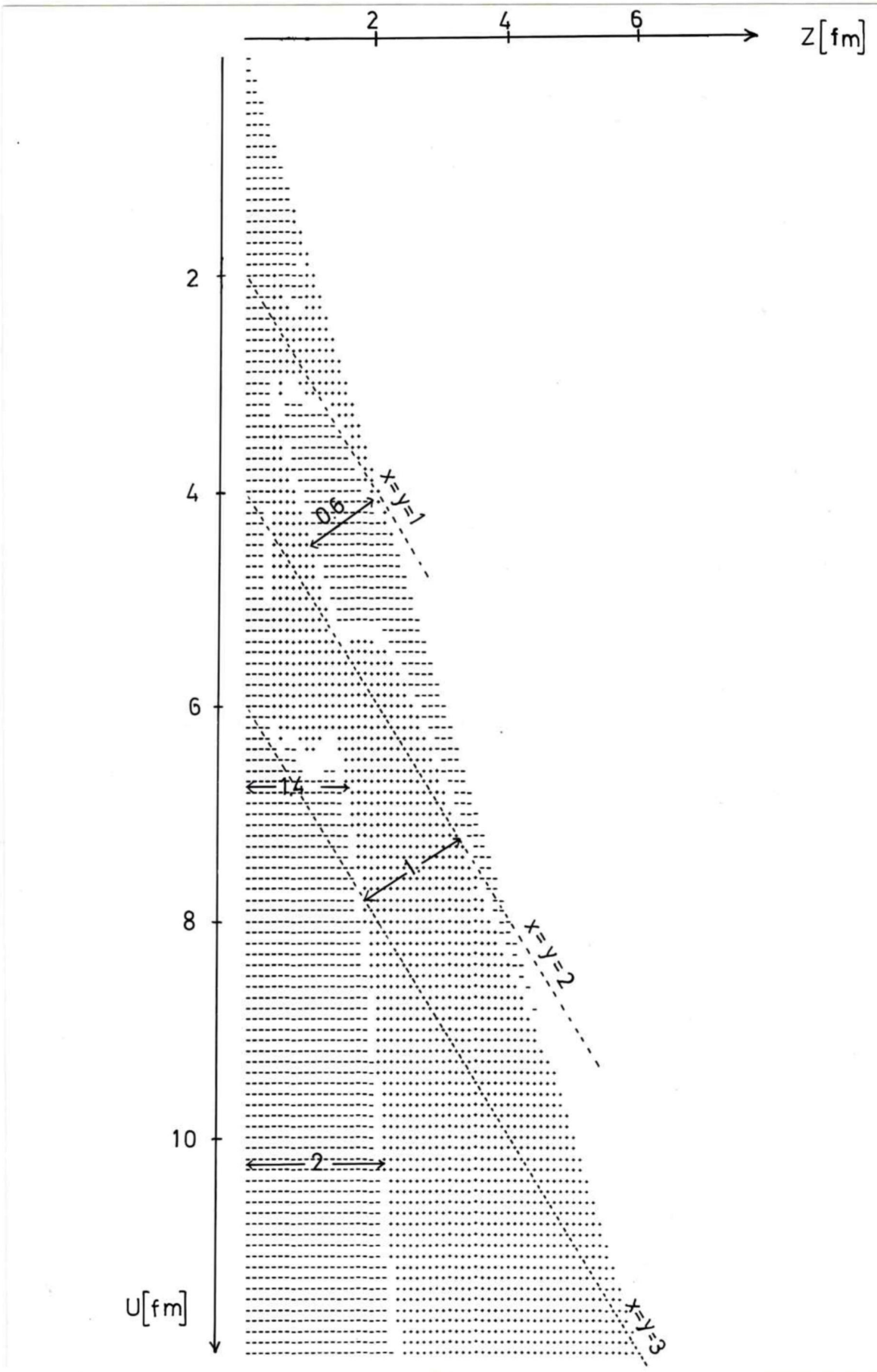


Abb. 3

des Anregungsspektrums - das heißt, die Koeffizienten a_i der beigemischten Eigenfunktionen - läßt sich aber nicht aus dem Diagramm $H\psi/\psi$ Abb. 3 ableiten.

Das ist der Grund, warum wir den von Schmid und Schwager vorgeschlagenen Weg nicht zu Ende gehen können. Wir ändern deshalb die Fragestellung etwas ab, und statt nach den verschiedenen beigemischten Eigenfunktionen und ihren Überlagerungskoeffizienten fragen wir nach den Beiträgen der Fehler in der Testfunktion in verschiedenen Konfigurationsbereichen zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke.

Diese Beiträge lassen sich bestimmen, wie gezeigt werden wird. Sie liefern nicht nur einen Fingerzeig, wo die Testfunktion verbessert werden muß, sie geben auch an, wie bei der Berechnung der mittleren Anregungsenergie ε (58) die Gewichte verteilt werden müssen.

Um diese Beiträge zu berechnen, führen wir anstelle der Entwicklung der Testfunktion nach Eigenfunktionen (56) folgende Zerlegung der Testfunktion ein:

$$\psi = a_0 \psi_0 + \lambda \sum_i q_i \tag{63}$$

Wir schreiben also die Testfunktion als Summe von Eigenfunktion ψ_0 und den Fehlern q_i.[+)] Dabei sei $q_i \neq 0$ nur in einem gewissen Bereich B_i des Konfigurationsraumes. Da wir die Fehler verschiedener Bereiche getrennt studieren wollen, ist es nötig, eine solche Zerlegung des Gesamtfehlers einzuführen. Der Konfigurationsraum wird derart in verschiedene, sich nicht überlappende Bereiche B_i eingeteilt, daß innerhalb eines Bereiches eine eindeutige Bestimmung der Anregungsenergie möglich ist. Die Funk-

---

+) Den Parameter λ können wir uns vorerst gleich 1 gesetzt denken. Wir werden diesen Parameter in der weiteren Rechnung mitführen, um leicht entscheiden zu können, welche Größen bei verschwindendem Fehler ($\lambda \to 0$) vernachlässigbar sind.

tionen q_i sind orthogonal zueinander, da ihre Träger nicht überlappen. Außerdem sind sie per definitionem orthogonal zur Eigenfunktion ψ_0.

Wir denken uns die Testfunktion ψ und die Eigenfunktion ψ_0 auf 1 normiert:

$$\int \psi^2 d\tau = 1 = a_0^2 + \lambda^2 \sum_i \int q_i^2 d\tau \tag{64}$$

Es ist nun möglich, den Beitrag des Fehlers q_i zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke zu berechnen:

Dazu zeigen wir zuerst, daß man für

$$r(x,y,z) = \frac{H - \langle H \rangle}{\sqrt{E_1 - \langle H \rangle}} \psi(x,y,z) \tag{65}$$

durch Integration von r^2 über den ganzen Konfigurationsraum den Abstand $\Delta = \bar{E} - \underline{E}$ zwischen oberer und unterer Schranke erhält:

$$\int r^2 d\tau = \frac{\int \left((H\psi)^2 - 2\langle H \rangle \psi H \psi + \langle H \rangle^2 \psi^2 \right) d\tau}{E_1 - \langle H \rangle} \tag{66}$$

$$= \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{E_1 - \langle H \rangle} = \bar{E} - \underline{E} = \Delta$$

In der Zerlegung (63) schreibt sich die Funktion r:

$$r = \frac{a_0 \psi_0 (E_0 - \langle H \rangle) + \lambda \sum_i (H - \langle H \rangle) q_i}{\sqrt{E_1 - \langle H \rangle}} \tag{67}$$

und für den Abstand zwischen oberer und unterer Schranke erhält man

$$\Delta = \frac{a_0^2 (E_0 - \langle H \rangle)^2 + \lambda^2 \sum_{ij} \int (H - \langle H \rangle) q_i (H - \langle H \rangle) q_j d\tau}{E_1 - \langle H \rangle} \tag{68}$$

Nun ist aber wegen $q_i \neq 0$ nur im Bereich B_i

$$\int q_i q_j \, d\tau = \delta_{ij} \int q_i^2 \, d\tau \tag{69}$$

und aus demselben Grund:

$$\int (H - \langle H \rangle) q_i (H - \langle H \rangle) q_j \, d\tau = \delta_{ij} \int ((H - \langle H \rangle) q_i)^2 \, d\tau \tag{70}$$

Nützt man das aus, so erhält man schließlich für den Abstand zwischen oberer und unterer Schranke:

$$\Delta = \frac{a_0^2 (E_0 - \langle H \rangle)^2 + \lambda^2 \sum_i \int ((H - \langle H \rangle) q_i)^2 \, d\tau}{E_1 - \langle H \rangle} \tag{71}$$

Die Integrationen, die über den ganzen Konfigurationsraum auszuführen waren, können auf den jeweiligen Bereich B_i beschränkt werden, da $q_i = 0$ außerhalb von B_i ist. Führt man außerdem noch im ersten Summanden des Zählers von (71) einen Faktor $1 = \sum_i \int_{B_i} \psi_0^2 \, d\tau$ ein, so läßt sich der Abstand zwischen oberer und unterer Schranke in eine Summe aufspalten:

$$\Delta = \sum_i \Delta_i = \sum_i \frac{a_0^2 (E_0 - \langle H \rangle)^2 \int_{B_i} \psi_0^2 \, d\tau + \lambda^2 \int_{B_i} ((H - \langle H \rangle) q_i)^2 \, d\tau}{E_1 - \langle H \rangle} \tag{72}$$

Die Größe Δ_i ist aber gerade der Beitrag des Fehlers q_i der Testfunktion im Konfigurationsbereich B_i zum Abstand Δ zwischen oberer und unterer Schranke.

Dieser Beitrag läßt sich direkt berechnen, denn es gilt

$$\Delta_i = \int_{B_i} r^2 \, d\tau \tag{73}$$

Der Beweis ist nach den vorausgehenden Gleichungen (66)-(72) trivial. Man muß statt über den ganzen Konfigurationsraum nur über den Bereich B_i integrieren und beachten, daß bei Integration

über den Bereich B_i nur die Funktion q_i beiträgt.

Somit läßt sich durch Berechnung der Beiträge Δ_i exakt feststellen, in welchem Bereich die Testfunktion besonders schlecht ist.

Weiter können die Größen Δ_i dazu benutzt werden, um mit Hilfe der Gleichungen (57) und (58) den Eigenwert genauer zu bestimmen, denn die Größen Δ_i geben an, wie man bei der Berechnung der mittleren Anregungsenergie nach Gleichung (58) die Gewichte zu verteilen hat.

Um dies quantitativ zu formulieren, setzen wir die Zerlegung der Testfunktion

$$\psi = a_0 \psi_0 + \lambda \sum_i q_i$$

in den Ausdruck für die mittlere Anregungsenergie (58) ein.

$$\epsilon = \frac{\sum_i \int \left((H q_i)^2 - E_0 q_i H q_i \right) d\tau}{\sum_i \int \left(q_i H q_i - E_0 q_i^2 \right) d\tau} \tag{74}$$

Aus den Fluktuationen von $H\psi/\psi$ im Konfigurationsraum kann man ableiten, daß der Energieerwartungswert für die beigemischten Fehler groß gegen den Eigenwert ist:

$$\begin{aligned} \int q_i H q_i \, d\tau &\gg E_0 \int q_i^2 \, d\tau \\ \int q_i H^2 q_i \, d\tau &\gg E_0 \int q_i H q_i \, d\tau \end{aligned} \tag{75}$$

Damit vereinfacht sich der Ausdruck für die mittlere Anregungsenergie (74) zu

$$\epsilon = \frac{\sum_i \int (H q_i)^2 \, d\tau}{\sum_i \int q_i H q_i \, d\tau} \tag{76}$$

Zur Berechnung von ε benötigen wir demnach die Erwartungswerte

$$\int (H q_i)^2 \, d\tau \qquad \text{und} \qquad \int q_i H q_i \, d\tau$$

$\int (H q_i)^2 d\tau$ können wir aus Δ_i (72) berechnen.

Für Δ_i ergibt sich nämlich mit Berücksichtigung von (75), wenn wir in Gleichung (72) nur Glieder mit λ^2 mitnehmen+):

$$\Delta_i = \frac{\lambda^2 \int (H q_i)^2 d\tau}{E_1 - \langle H \rangle} \tag{77}$$

Für die Berechnung von $\int q_i H q_i d\tau$ müssen wir uns allerdings mit einer groben Näherung begnügen. Wir führen

$$\int q_i H q_i \, d\tau \quad \text{in} \quad \frac{1}{E_i} \int (H q_i)^2 \, d\tau \quad \text{über}$$

indem wir die doppelte Anwendung des Hamiltonoperators in $\int (H q_i)^2 d\tau$ kompensieren durch einen Faktor $1/E_i$. (E_i ist die mittlere Anregungsenergie des beigemischten Fehlers q_i.)

Wir setzen also

$$\lambda^2 \int q_i H q_i \, d\tau = \frac{\lambda^2 \int (H q_i)^2 d\tau}{E_i} = \frac{\Delta_i}{E_i} (E_1 - \langle H \rangle) \tag{78}^{++}$$

+) Der erste Summand im Zähler von Gleichung (72) kann bei verschwindendem Fehler gegen $\lambda^2 \int (H q_i)^2$ vernachlässigt werden, denn er enthält einen Faktor λ^4. Es gilt nämlich in der Zerlegung (63) $1 = a_0^2 + \lambda^2 \sum_i \int q_i^2 d\tau$ und $\langle H \rangle = E_0 a_0^2 + \lambda^2 \sum_i \int q_i H q_i d\tau$. Daraus erhält man für $(E_0 - \langle H \rangle)^2 = \lambda^4 (\sum \int q_i (H - E_0) q_i d\tau)^2$. Wie eine Abschätzung für die Überlappung von der Testfunktion mit der Eigenfunktion zeigt, ist der Fehler $\lambda^2 \sum_i \int q_i^2 d\tau < 0.05$ und somit die Vernachlässigung in allen hier vorkommenden Fällen statthaft.

++) Dies gilt nur exakt, wenn q_i Eigenfunktion von H ist. Da jedoch auch die Bestimmung der Anregungsenergien E_i aus dem Diagramm $H\psi/\psi$ eine gewisse Ungenauigkeit mit sich bringt, geht an dieser Stelle die Exaktheit ohnehin verloren. Wir werden jedoch später sehen, daß sich ein großer Fehler in der mittleren Anregungsenergie nur wenig in dem nach Gleichung (57) berechneten Eigenwert auswirkt.

Damit und mit Hilfe von Gleichung (77) können wir den Ausdruck für die mittlere Anregungsenergie (76) umformen in

$$\epsilon = \frac{\sum_i \Delta_i}{\sum_i \frac{\Delta_i}{E_i}} \tag{79}$$

In diesem Ausdruck sind nun alle Größen bekannt: Während man $\Delta_i = \int_{B_i} v^2 d\tau$ durch numerische Integration erhält, können die Anregungsenergien E_i aus den Fluktuationen von $H\psi/\psi$ abgelesen werden.

Um herauszufinden, wie sich die Beschränktheit des Trägers einer Funktion auf den mit ihr gebildeten Erwartungswert der kinetischen Energie auswirkt, betrachten wir eine Gaußfunktion

$$\psi = \exp(-d(x^2+y^2+z^2)) \tag{80}$$

Sie gibt folgenden Erwartungswert für die kinetische Energie:

$$T = g \frac{\hbar^2}{m} d \tag{81}$$

Nach der Unschärferelation

$$\sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}} \geq \frac{\hbar/2}{\sqrt{\overline{(\Delta x_x)^2}}} \tag{82}$$

kann man diese oder eine größere kinetische Energie von jeder Funktion erwarten, deren Träger auf den Bereich $x,y,z \leq d^{-1/2}$ beschränkt ist, da für eine Gaußfunktion in der Unschärferelation (79) das Gleichheitszeichen gilt.

Unterschiedliche Beschränktheit des Trägers in x,y,z-Richtung

$$0 \leq x \leq \rho_x \;,\; 0 \leq y \leq \rho_y \;,\; 0 \leq z \leq \rho_z \tag{83}$$

geht nach der Unschärferelation folgendermaßen in die kinetische Energie ein:

$$T = 3\frac{\hbar^2}{m}\left(1/\varrho_x^2 + 1/\varrho_y^2 + 1/\varrho_z^2\right) \tag{84}$$

Soweit der Träger auf ein Gebiet um den Ursprung beschränkt ist, sind diese Betrachtungen richtig, obwohl wir die Beschränktheit des Trägers in Dreieckskoordinaten betrachtet haben, während sich die Unschärferelation auf kartesische Koordinaten bezieht - in unserem Fall auf die kartesischen Koordinaten des sechsdimensionalen Raumes, in dem sich die drei Teilchen bei ruhendem Schwerpunkt bewegen.

Ist nun der Träger auf eine Umgebung des Punktes x_1, y_1, z_1 (in Dreieckskoordinaten) beschränkt

$$|x - x_1| \leq \tfrac{1}{2}\varrho_x \;,\; |y - y_1| \leq \tfrac{1}{2}\varrho_y \;,\; |z - z_1| \leq \tfrac{1}{2}\varrho_z \tag{85}$$

so ist der Träger im dreidimensionalen Raum der x,y,z zwar auf das gleiche Volumen beschränkt wie im Fall (83), um jedoch die Unschärferelation anzuwenden, müssen wir die Beschränktheit des Trägers in dem sechsdimensionalen Raum untersuchen. Dabei ergibt sich, daß für den Fall (85) die Beschränktheit des Trägers und folglich die Impulsunschärfe geringer ist.

Das Volumelement im sechsdimensionalen Raum hat in Dreieckskoordinaten die Form:

$$d\tau = xyz\, dx\, dy\, dz \tag{86}$$

Damit ergibt sich das Trägervolumen im Fall (83) zu

$$\int_{\substack{0\leq x\leq \varrho_x \\ 0\leq y\leq \varrho_y \\ 0\leq z\leq \varrho_z}} d\tau \sim \varrho_x^2 \varrho_y^2 \varrho_z^2 \tag{87}$$

während man im Fall (85) erhält:

$$\int_{\substack{|x-x_1|\leq \frac{1}{2}\varrho_x \\ |y-y_1|\leq \frac{1}{2}\varrho_y \\ |z-z_1|\leq \frac{1}{2}\varrho_z}} d\tau \sim x_1 \varrho_x\, y_1 \varrho_y\, z_1 \varrho_z \qquad (88)$$

Für $x_1 \gg \varrho_x, y_1 \gg \varrho_y, z_1 \gg \varrho_z$ ist der Träger nach Gleichung (85) praktisch nur in drei Dimensionen beschränkt, und somit ist die zugehörige kinetische Energie nach der Unschärferelation nur halb so groß wie nach Formel (84).

Beachtet man dies alles, so lassen sich ungefähre Werte für die Anregungsenergien E_i aus dem Diagramm $H\psi/\psi$ mit Hilfe der Unschärferelation ableiten.

Durchführung der Fehlerabschätzung für die auf Seite 33 angegebene Testfunktion.

Die Bestimmung der Beiträge einzelner Bereiche zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke ist für die Testfunktion (5) mit den auf Seite 33 angegebenen Parametern durchgeführt worden.

Die Bereichseinteilung wurde wie folgt vorgenommen:

Bereich o :	kein Nukleonenabstand $\leq c$	$x,y,z \geq c$
Bereich 1 :	ein Nukleonenabstand $\leq c$	$x,y \geq c$, $z \leq c$ et cycl.
Bereich 2 :	zwei Nukleonenabstände $\leq c$	$x,y \leq c$, $z \geq c$ et cycl.
Bereich 3 :	drei Nukleonenabstände $\leq c$	$x,y,z \leq c$

In Abb. 4 sind die Ergebnisse in Abhängigkeit von c aufgetragen, gleichzeitig wird dort die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den einzelnen Bereichen angegeben.

Wir betrachten das Diagramm bei c = 2 fm. Für Nukleonenabstände größer als 2 fm kann man die Nukleonen als frei ansehen. Die Bereichseinteilung bedeutet dann, daß im Bereich B_k k Nukleonen-

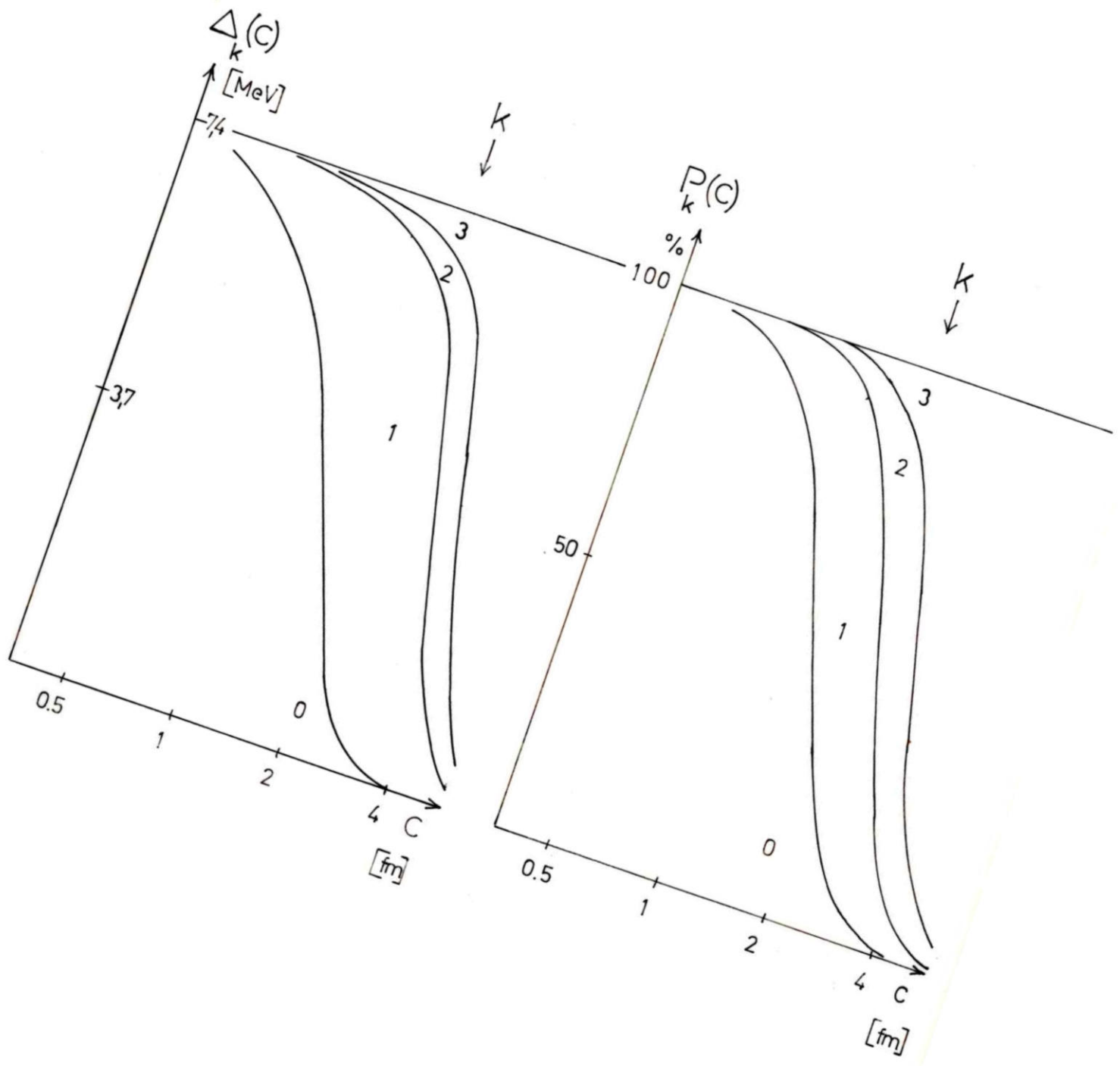


Abb.4

paare miteinander in Wechselwirkung stehen.

Es zeigt sich, daß der Bereich B_1 ($x,y \geq 2$ fm, $z \leq 2$ fm - nur ein Nukleonenpaar in Wechselwirkung) mit $\Delta_1 = 4.6$ MeV am stärksten zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke beiträgt. In diesem Bereich wird eine Verbesserung der Testfunktion nötig sein.

Um den Eigenwert mit Hilfe von Gleichung (57) genauer abzuschätzen, müssen die Anregungsenergien E_i in den einzelnen Konfigurationsbereichen nach (84) mit Hilfe der Unschärferelation aus den Nullstellenabständen im Diagramm $H\psi/\psi$ Abb. 3 ermittelt werden. Die Ergebnisse sind in Tab. 1 aufgetragen. Es wurden außer dem in Abb. 3 wiedergegebenen Diagramm für $H\psi/\psi$ bei $x = y$ noch weitere Diagramme mit $x \neq y$ untersucht, da man ja das Verhalten der beigemischten Fehler in allen drei Dimensionen betrachten muß. Das wesentliche ist aber aus Abb. 3 zu ersehen.

Tabelle 1:

i	Bereich B_i	Δ_i [MeV]	Nullstellenabstand (ρ_1, ρ_2, ρ_3)	E_i [MeV]
0	$x,y,z \geq 2$ fm	1.9	(1., 3.7, ∞)	65
1	$x,y \geq 2$ fm $z \leq 2$ fm	4.6	(1.4 - 2.o, ∞, ∞)	3o-65
2	$x,y \leq 2$ fm $z \geq 2$ fm	o.95	(o.6, 1.8, ∞)	19o
3	$x,y,z \leq 2$ fm			

Mit Hilfe von Formel (79) und der in Tab. 1 angegebenen Ergebnisse erhält man für die mittlere Anregungsenergie der beigemischten Fehler:

$$\varepsilon = (55 \pm 15) \text{ MeV} \qquad (89)$$

Eine genauere Angabe von ε ist nicht möglich, da die Nullstellenabstände im Bereich 1 nicht einheitlich sind. Für den Eigenwert erhält man nun mit Formel (57):

$$E_o = (7.2 \pm 0.2)\ \text{MeV} \qquad (90)$$

Dieses Ergebnis ist trotz der Unsicherheit in der Bestimmung von ε bedeutend besser als die Eingabelung des Eigenwerts in obere und untere Schranke von Seite 33.

3.3 Verbesserung der Zweierkorrelationen

Da der größte Fehler der Testfunktion in der Konfiguration $x,y \geq 2$ fm, $z \leq 2$ fm steckt - einer Konfiguration, in der nur zwei Teilchen miteinander wechselwirken - ist es nötig, die Zweierkorrelationen zu verbessern. Es ist wichtig anzumerken, daß nicht die durch den soft-core erzeugten Zweierkorrelationen schlecht wiedergegeben werden. Der in diesen Korrelationen steckende Fehler geht nach Abb. 4 mit nur 0.3 MeV in den Abstand zwischen oberer und unterer Schranke ein (Bereich $1,x,y \geq 0.5$ fm, $z \leq 0.5$ fm). Es handelt sich vielmehr um die durch den anziehenden Teil des Potentials erzeugten Zweierkorrelationen, die in der Testfunktion bis jetzt noch nicht berücksichtigt wurden.

Im interessierenden Bereich (nur ein Teilchenpaar in Wechselwirkung) separiert die Schrödingergleichung, wenn man die in 1.2 definierten Jacobischen Koordinaten verwendet.

Für $|\vec{s}_2| >> |\vec{s}_1|$ geht der Hamiltonoperator (4) über in

$$H = -\frac{\hbar^2}{m}\left(\nabla_{\vec{s}_1}^2 + \frac{3}{4}\nabla_{\vec{s}_2}^2\right) + V(\vec{s}_1) \qquad (91)$$

und die Wellenfunktion wird

$$\psi = \chi(\vec{s}_1)\,\Omega(\vec{s}_2) \qquad (92)$$

Für die Ortsabhängigkeit der Funktion χ, die das Verhalten der beiden in Wechselwirkung verbleibenden Teilchen beschreibt, erhält man

$$-\frac{\hbar^2}{m}\left[\chi''(z)+\frac{2}{z}\chi'(z)\right]+V(z)\chi(z)=E_1\chi(z) \qquad (93)$$

Mit Hilfe eines Variationsansatzes

$$\chi(z)=\sum_i g_i e^{-h_i z^2} \qquad (94)$$

wurde die Funktion $\chi(z)$ bestimmt. Das Verhalten von $\chi(z)$ gibt Abb. 5 wieder (Kurve 3). Zum Vergleich ist aufgetragen das Verhalten der bis jetzt benutzten Testfunktion $\psi(x,y,z)$ für $x = y = 4$ fm in Abhängigkeit von z (Kurve 1). Der Anstieg bis $z = o.5$ fm ist für die beiden Kurven etwa gleich. Es ist jedoch deutlich, daß für $\chi(z)$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit viel stärker auf den Bereich $z \approx 1\text{-}2$ fm konzentriert ist als für ψ. Da die Schrödingergleichung für die Eigenfunktion in diesem Bereich das gleiche Verhalten fordert, muß die Testfunktion hier mehr Flexibilität bekommen. Dies geschieht am besten dadurch, daß man im Jastrowfaktor von Ansatz (5) die Korrelationsfunktion

$$f(x) = 1-ge^{-hx^2}$$

ersetzt durch die Funktion χ, die das freie Nukleonenpaar beschreibt und damit eine neue Variationsrechnung durchführt, in der auch die Parameter g_i, h_i der Funktion χ (94) nochmals variiert werden.

Man erhält nun als Ergebnis

$$\bar{E} = -7.o1 \text{ MeV} \geq E_o \geq \underline{E} = -8.16 \text{ MeV} \qquad (95)$$

Die optimalen Überlagerungsparameter c_i und die optimalen Abfallparameter d_i im langreichweitigen Teil der Wellenfunktion (5) haben die Werte:

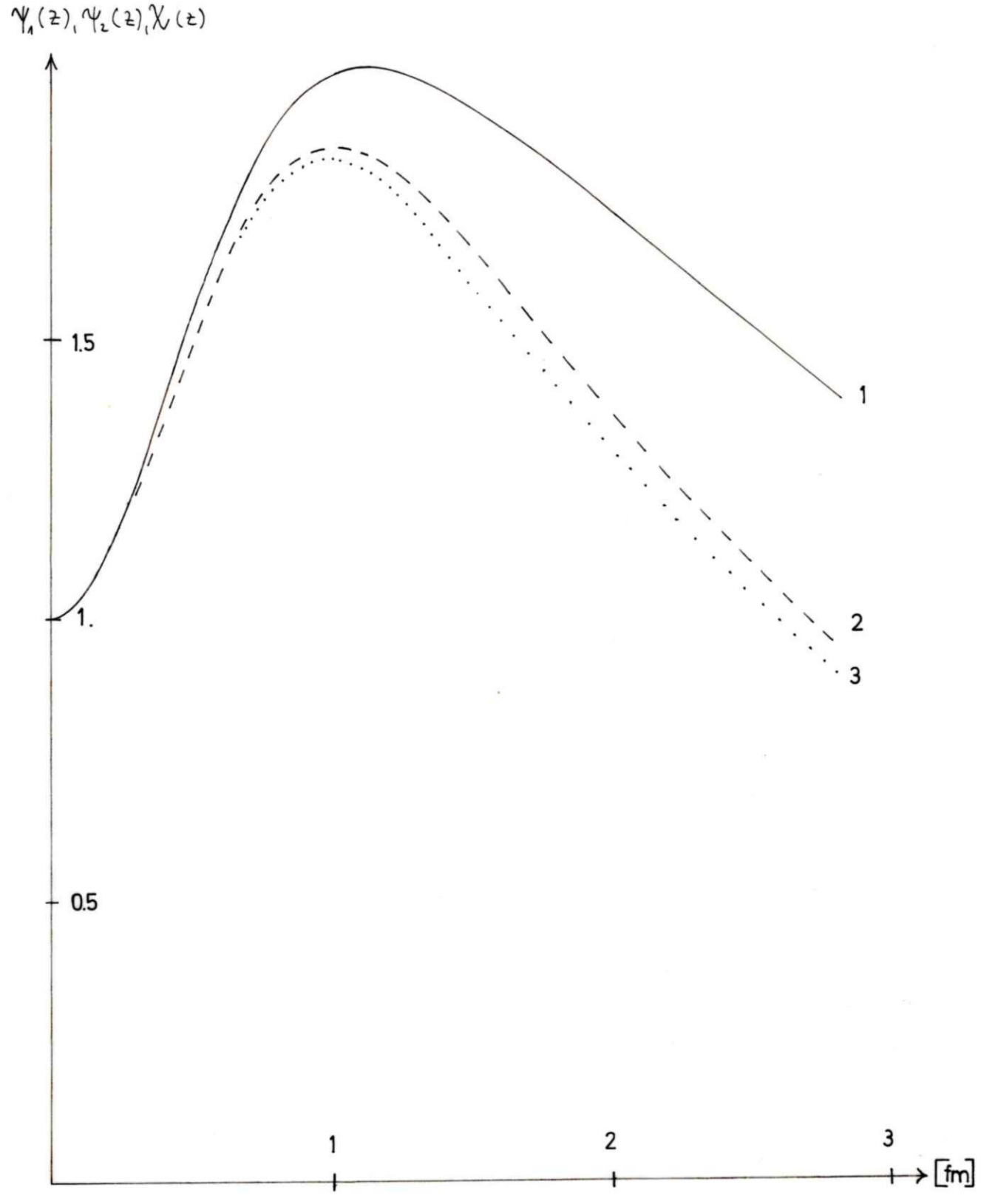


Abb.5

d_i	$2.715 \cdot 1o^{-2}$	$5.73o \cdot 1o^{-2}$	$1.227 \cdot 1o^{-1}$	$1.341 \cdot 1o^{-1}$	$\left[fm^{-2}\right]$
c_i	$7.872 \cdot 1o^{-1}$	1.385	-1.263	$8.784 \cdot 1o^{-1}$	

Als Korrelationsfunktion wurde verwendet:

$$f(x) = 1.+1.278e^{-o.1845x^2} - 1.256 \cdot e^{-2.426x^2} \qquad x \text{ in fm} \qquad (96)$$

Übernimmt man die Parameter g_i, h_i der Funktion χ unvariiert, so erhält man als obere Schranke nur -6.59 MeV. Die Variation trägt also der Anwesenheit des dritten Teilchens Rechnung, so daß sich die neue Testfunktion (siehe Abb. 5, Kurve 2) von χ etwas unterscheidet.

Die Wichtigkeit der zusätzlichen Gaußfunktion im Korrelationsfaktor (96) ersieht man nicht nur daraus, daß sich nun die Schranken auf ca. 1 MeV nahekommen, sondern auch aus der Tatsache, daß man mit einem Ansatz mit $c_2 = c_3 = c_4 = 0$. gute Ergebnisse bekommt, nämlich:

$$\bar{E} = -6.95 \text{ MeV} \geq E_o \geq \underline{E} = -8.82 \text{ MeV} \qquad (97)$$

In diesem Fall reduziert sich der Ansatz (5) auf einen reinen Produktansatz:

$$\psi = c_1 f(x) f(y) f(z) e^{-d_1(x^2+y^2+z^2)} \qquad (98)$$

Wendet man auf die so verbesserte Testfunktion (95) die oben durchgeführte Fehlerabschätzung nochmals an, so sieht man, daß sich nun die Fehler viel gleichmäßiger über den ganzen Konfigurationsraum verteilen (siehe Abb. 6 - die Verteilung von Δ_k über den Konfigurationsraum ähnelt jetzt der Verteilung der Aufenhaltswahrscheinlichkeiten P_k). Die Nullstellen der beige-

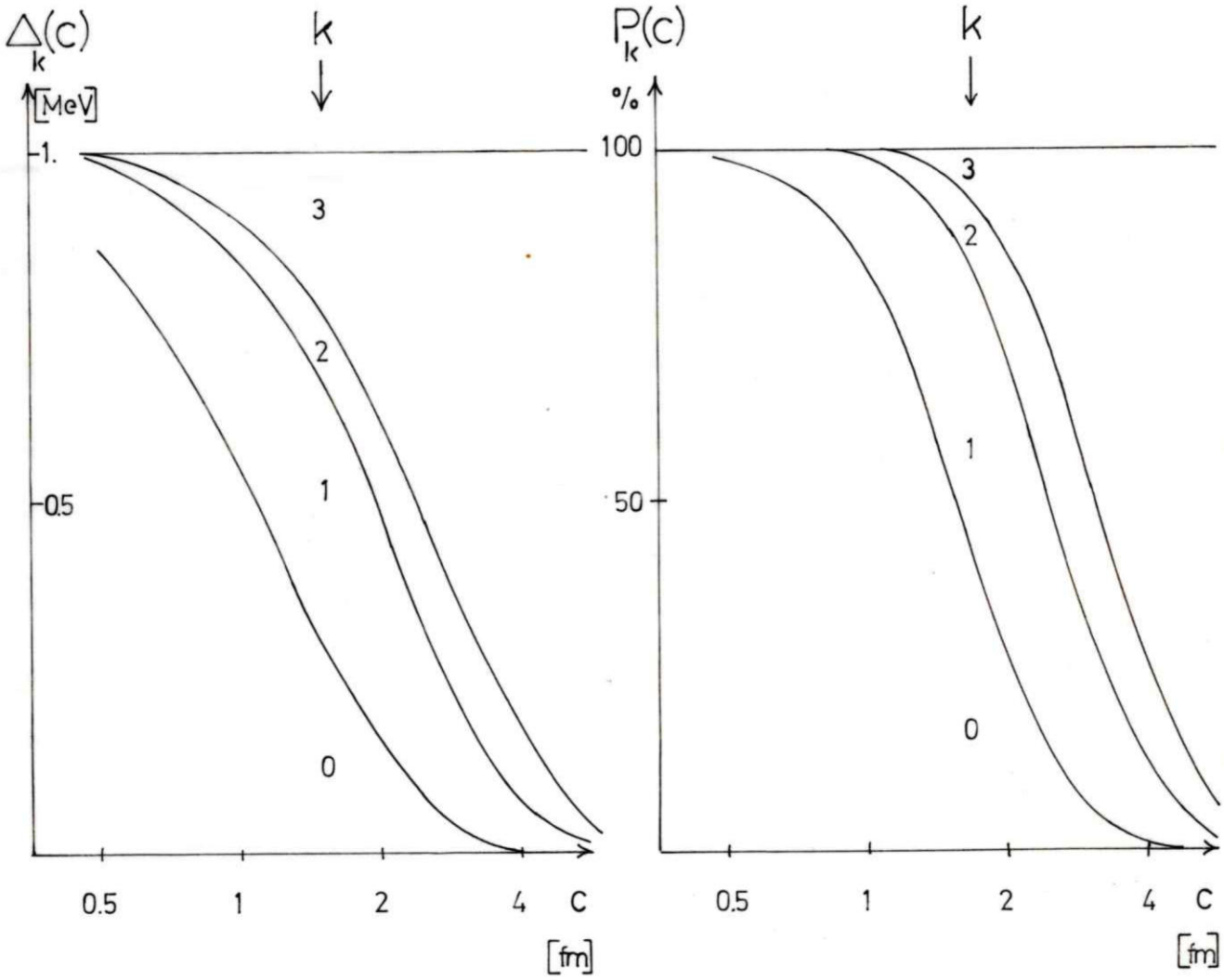


Abb.6

mischten Fehler liegen nun bedeutend dichter - sie haben also hohe Energien (siehe Abb. 7 und Tab. 2).

Für die mittlere Anregungsenergie (58) und (79) erhält man

$$\varepsilon = (14o \pm 5o)\ \text{MeV}^{+)} \tag{99}$$

Daraus erhält man mit Hilfe von Gleichung (57) für den Eigenwert:

$$E_o = (-7.07 \pm o.o2)\ \text{MeV} \tag{1oo}$$

Die große Unsicherheit in der mittleren Anregungsenergie wirkt sich im Eigenwert nur schwach aus, da bei der Berechnung von E_o mittels Gleichung (57) nur der zweite Summand die fehlerhafte Größe ε enthält. Dieser zweite Summand ist aber bei kleinem Schrankenabstand und großer mittlerer Anregungsenergie klein gegen den ersteren, und folglich ist die Auswirkung des Fehlers gering.

Tabelle 2:

i	Bereich B_i	Δ_i [MeV]	Nullstellenabstand (ρ_1, ρ_2, ρ_3)	E_i [MeV]
o	x,y,z ≥ 2 fm	o.19	(o.8, 1.4, ∞)	12o
1	x,y ≥ 2 fm z ≤ 2 fm	o.35	(o.8, 2.6, ∞)	1oo
2	x,y ≤ 2 fm z ≥ 2 fm	o.56	(o.6, 1.2, ∞)	21o
3	x,y,z ≤ 2 fm			

+) Trotz Einteilung des Konfigurationsraumes in Bereiche mit möglichst einheitlichen Nullstennabständen ist eine genauere Bestimmung der Anregungsenergien E_i nicht möglich, da auch innerhalb der einzelnen Bereiche Nullstellenabstände noch variieren.

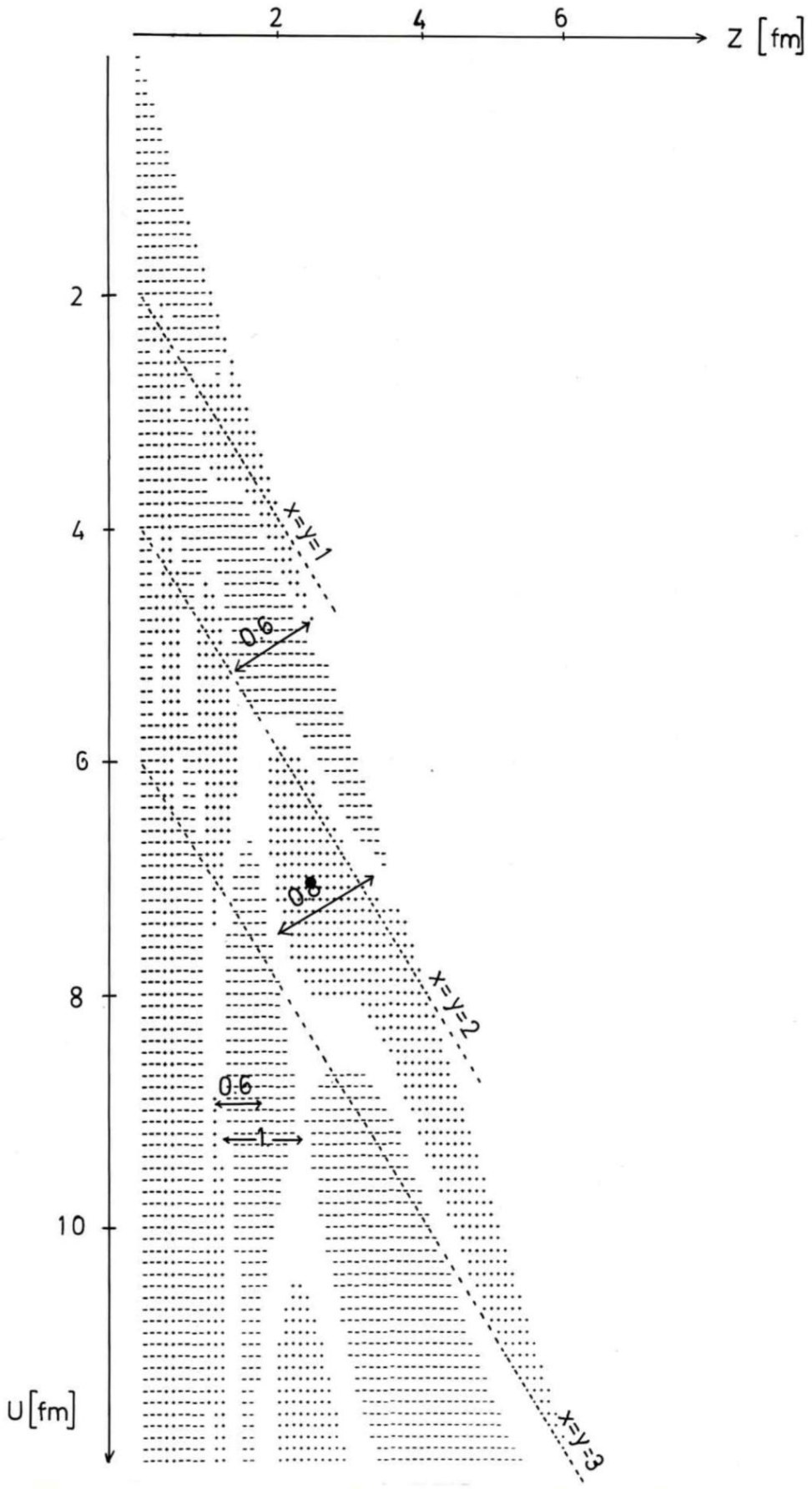


Abb.7

3.4 Verbesserung der Dreierkorrelationen

Der Beitrag des Fehlers im Bereich 2 und 3 (alle drei Nukleonen in Wechselwirkung) zum Abstand oberer und unterer Schranke Δ_{2+3} = o.56 MeV ist nun größer als der Beitrag des Bereichs 1 (nur ein Nukleonenpaar in Wechselwirkung). Um eine weitere Verbesserung der Testfunktion zu erzielen, müssen wir uns also den Dreierkorrelationen zuwenden.

Es wäre ein Zufall, wenn man mit Hilfe des Korrelationsfaktors f(x) (Gleichung 96), der eingeführt wurde, um den Zweierkorrelationen Rechnung zu tragen, durch das Produkt f(x)f(y)f(z) auch die Dreierkorrelationen gut beschreiben könnte. Die wahre Lösung läßt sich sicher nicht in Produktform darstellen, da die Schrödingergleichung in diesen Koordinaten nicht separiert (vgl. die Form des Hamiltonoperators in Dreieckskoordinaten (3)). Daß unsere Testfunktion noch mit einer Funktion multipliziert wird, die von $x^2+y^2+z^2$ abhängt, ist dabei kaum von Belang. Das zeigt sich schon an dem auf Seite 51 (Gleichung 97) erwähnten Ergebnis. Dort wurden durch Weglassen dieser Funktion ebenfalls sehr gute Schranken erzielt. Das ist nicht verwunderlich, da diese Art von Funktion sich eben nur einer ganz speziellen Art von Dreierkorrelationen anpassen kann. Der noch verbleibende Abstand zwischen oberer und unterer Schranke ist ein Hinweis darauf, daß die tatsächlichen Dreierkorrelationen nicht von dieser Art sind.

Eine Testfunktion größerer Flexibilität, auch im Bereich der Dreierkorrelationen, ist:

$$\Psi = \sum c_i \varphi_i \qquad \varphi_i = \exp(-\mu_i x^2 - \nu_i y^2 - w_i z^2) + \text{cycl.} \tag{101}$$

Sie ist die allgemeinste Funktion, die man aus Gaußfunktionen aufbauen kann. In ihr ist auch der bis jetzt benutzte Typ (im weiteren Produkttyp genannt) als Spezialfall enthalten.

Überlagert man 12 der neuen Funktionen, so erhält man Schranken, die noch näher beieinander liegen.

$$\bar{E} = -7.045 \text{ MeV} \geq E_o \geq \underline{E} = -7.45 \text{ MeV} \qquad (102)$$

Die optimalen Testfunktionen, die diese Schranken liefern, sind in den Zweierkorrelationen so gut wie identisch mit dem Produkttyp. Die optimalen Überlagerungsparameter c_i und die optimalen Abfallparameter u_i, v_i, w_i (siehe Tabelle 3) sind aber derart, daß sich die Funktion (101) nicht mehr in Produktform schreiben läßt.

Um sich einen Begriff von der Verbesserung im Bereich der Dreierkorrelationen machen zu können, ist in Abb. 8 das Verhalten von neuer und alter Testfunktion für die Annäherung eines Teilchens an zwei bereits in Wechselwirkung stehenden wiedergegeben.

Und zwar erfolgt die Annäherung

a) senkrecht zur Verbindungslinie

und

b) in der Verbindungslinie

der beiden in Wechselwirkung stehenden Teilchen. In beiden Fällen ist die neue Testfunktion um ca. 10 % größer als die alte, die diese Korrelation starr mit dem Produkt aus Zweierkorrelationen wiedergab.

Einen Überblick über die erzielte Verbesserung gibt ein Vergleich der Beiträge Δ_i einzelner Konfigurationsbereiche B_i zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke. (Zur Definition der einzelnen Konfigurationsbereiche B_i siehe Seite 45.)

Bereich B_i =	0	1	2	3	
Beitrag Δ_i	0.19	0.35	0.14	0.42 [MeV]	(Produkttyp)
Beitrag Δ_i	0.0076	0.33	0.034	0.196 [MeV]	(neue Testfkt.)

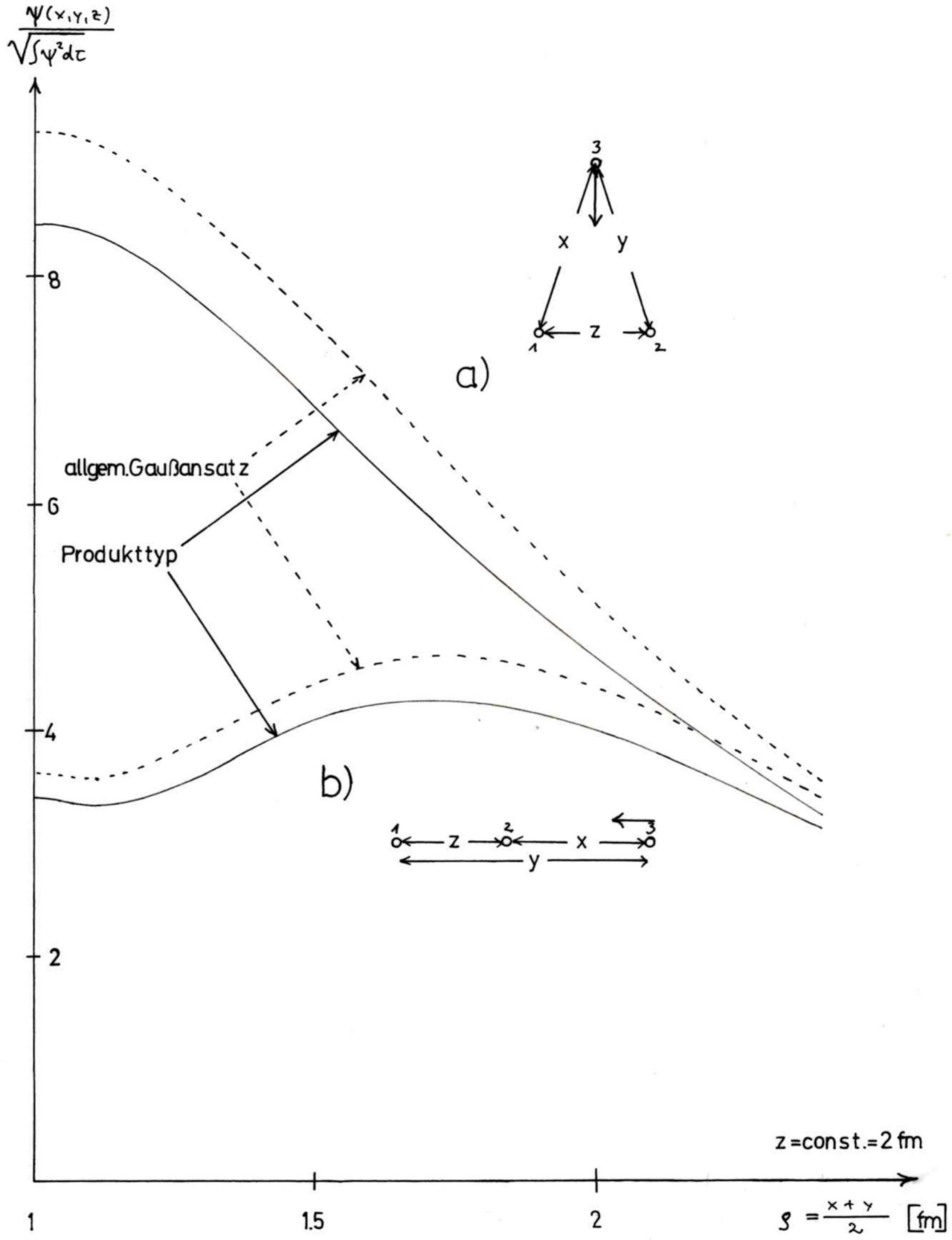

$\frac{\Psi(x,y,z)}{\sqrt{\int \Psi^2 d\tau}}$
8
6
4
2
allgem. Gaußansatz
Produkttyp
a)
b)
3
x
y
z
1
2
1
z
2
x
3
y
z = const. = 2 fm
1
1.5
2
$s = \frac{x+y}{2}$ [fm]

Abb.8

Es wird also nicht nur der Fehler im Bereich 3 verringert (um ca. 5o %), sondern besonders stark auch der Fehler im Bereich 2 (von o.14 MeV auf o.o34 MeV). In den Bereich 2 fallen gerade die gestreckten Konfigurationen - $x,y \leqq 2$ fm, $z \geqq 2$ fm - die wie die spezielle unter b) angeführte Konfiguration verbessert werden.

Interessant ist die Verbesserung im Bereich 0 (kein Nukleonenpaar in Wechselwirkung): Die alte Testfunktion (Produkttyp) hätte eigentlich genügend Flexibilität, um ein gutes asymptotisches Verhalten zu liefern, diese Flexibilität muß aber offenbar ganz im Bereich kleinerer Abstände eingesetzt werden, um dort größere Fehler zu vermeiden.

Tabelle 3:

Optimale Parameter für den Variationsansatz (1o1)

Überlagerungsparameter: c_i

Abfallparameter: u_i, v_i, w_i $\left[\text{fm}^{-2}\right]$

c_i	u_i	v_i	w_i
$5.332 \cdot 1o^{-2}$	$1.131 \cdot 1o^{-2}$	$1.157 \cdot 1o^{-2}$	$2.954 \cdot 1o^{-2}$
$1.o8o \cdot 1o^{-1}$	$1.86o \cdot 1o^{-1}$	$1.157 \cdot 1o^{-2}$	$1.527 \cdot 1o^{-2}$
-1.133	2.714	$2.418 \cdot 1o^{-2}$	$3.o68 \cdot 1o^{-2}$
$5.711 \cdot 1o^{-1}$	$2.85o \cdot 1o^{-2}$	$3.216 \cdot 1o^{-2}$	$7.44o \cdot 1o^{-2}$
$1.o54$	$3.137 \cdot 1o^{-1}$	$2.494 \cdot 1o^{-2}$	$4.o74 \cdot 1o^{-2}$
$1.434 \cdot 1o^{1}$	$2.o94$	$1.827 \cdot 1o^{-1}$	$7.o51 \cdot 1o^{-2}$
$-4.517 \cdot 1o^{-1}$	$1.213 \cdot 1o^{-1}$	$1.oo5 \cdot 1o^{-1}$	$1.o62 \cdot 1o^{-1}$
3.457	$3.882 \cdot 1o^{-1}$	$1.369 \cdot 1o^{-1}$	$8.35o \cdot 1o^{-2}$
$-1.874 \cdot 1o^{1}$	$2.36o$	$1.859 \cdot 1o^{-1}$	$9.267 \cdot 1o^{-2}$
1.554	$1.352 \cdot 1o^{-1}$	$8.799 \cdot 1o^{-2}$	$9.786 \cdot 1o^{-2}$
-4.173	1.325	$7.941 \cdot 1o^{-2}$	$9.663 \cdot 1o^{-2}$
3.941	2.121	$2.o36$	$4.898 \cdot 1o^{-1}$

3.5 Abschätzung des Eigenwertes für das Tritonproblem mit effektivem Potential

Die neuerliche Verbesserung der Testfunktion durch Ansatz (1o1) hat im Diagramm $H\psi/\psi$ die Nullstellenabstände nicht wesentlich verändert. Es sind also nicht die Anregungsenergien E_i verändert, sondern nur die Amplituden der beigemischten Fehlerfunktionen reduziert worden. Die mittlere Anregungsenergie ist trotzdem etwas kleiner als die in Gleichung (99) angegebene, da jetzt bei der Mittelung die Gewichte anders verteilt werden. Mit Hilfe der in Tabelle 4 angegebenen Ergebnisse ergibt sich die mittlere Anregungsenergie zu:

$$\varepsilon = (13o \pm 5o)\ \text{MeV} \qquad (1o3)$$

Als endgültige Abschätzung für den Eigenwert des Tritonproblems mit effektivem Potential erhält man damit:

$$E_o = (-7.o75 \pm o.o1)\ \text{MeV} \qquad (1o4)$$

Die Auswirkung des Fehlers der mittleren Anregungsenergie ist in diesem Ergebnis noch geringer als in dem Ergebnis auf Seite 53, da der Abstand zwischen oberer und unterer Schranke hier noch kleiner ist.

Für die drei untersuchten Testfunktionen (Seite 33, Seite 53 und Seite 55) soll nun noch die Überlappung mit der Eigenfunktion abgeschätzt werden.

Mit der Entwicklung der Testfunktion nach Eigenfunktionen erhält man für die Überlappung:

$$\langle \psi | \psi_o \rangle = a_o = \sqrt{1 - \sum_{i=1}^{\infty} a_i^2} \qquad (1o5)$$

Eine Abschätzung für $\sum_{i=1}^{\infty} a_i^2$ bekommen wir aus

$$\langle H\rangle - E_o = \sum_{i=1}^{\infty} a_i^2 (E_i - E_o) \geq (E_1 - E_o) \sum_{i=1}^{\infty} a_i^2 \qquad (1o6)$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} a_i^2 \leq \frac{\langle H\rangle - E_o}{E_1 - E_o}$$

Daraus erhält man für die Überlappung:

$$\langle \psi | \psi_o \rangle \geq \sqrt{\frac{E_1 - \langle H\rangle}{E_1 - E_o}} \qquad (1o7)$$

$$= o.998 \quad \text{für } \psi \text{ von Seite } 55\,, \ \bar{E} = -7.o45 \text{ MeV}$$

$$= o.995 \quad \text{für } \psi \text{ " " } 53\,, \ \bar{E} = -7.o1 \text{ MeV}$$

$$= o.95 \quad \text{für } \psi \text{ " " } 33\,, \ \bar{E} = -6.44 \text{ MeV}$$

Wünscht man größere Genauigkeit in der Approximation der Wellenfunktion, so kann man unter Beibehaltung des Gaußfunktionenansatzes nur noch durch Überlagerung weiterer Funktionen ϕ_i Fortschritte erzielen, prinzipiell müßte man damit die Eigenfunktion beliebig gut annähern können, da das Funktionensystem (1o1) vollständig sein dürfte. Doch lohnt dieser Aufwand nicht, der als Ergebnis nur eine sehr unhandliche Funktion liefern kann, denn durch weitere Gaußfunktionen wächst nicht nur die Rechenzeit, die nötig ist, um einen Erwartungswert zu rechnen, sondern auch die Zahl der zu berechnenden Erwartungswerte, die nötig sind, um die Parameter optimal zu bestimmen.

Außerdem wird die Konvergenz dieses Verfahrens immer langsamer, wie Rechnungen am Zweiteilchenproblem zeigen. Dort kann man mit 12 Gaußfunktionen die Schranken nicht näher als auf o.o18 MeV zusammenbringen ($\underline{E}$ =-o.22 MeV, effektives Potential), obwohl hier nur die Funktion einer Variablen zu approximieren ist. Man kann deshalb ermessen, wie langsam die Konvergenz im Dreidimensionalen

sein würde.

Für größere Genauigkeit wäre deshalb ein Ansatz wünschenswert, der das Zweiteilchenproblem mit geringerem Aufwand löst, und der in den Dreierkorrelationen mindestens so flexibel wie unsere zuletzt entwickelte Testfunktion ist.

Tabelle 4:

i	Bereich B_i	Δ_i [MeV]	Nullstellenabstand (ρ_1, ρ_2, ρ_3)	E_i [MeV]
0	$x,y,z \geq 2$ fm	0.0076	(0.8, 1.4, ∞)	120
1	$x,y \geq 2$ fm $z \leq 2$ fm	0.33	(0.8, 2.6, ∞)	100
2	$x,y \leq 2$ fm $z \geq 2$ fm	0.23	(0.6, 1.2, ∞)	210
3	$x,y,z \leq 2$ fm			

4. Berücksichtigung nicht totalsymmetrischer Anteile in der Wellenfunktion

4.1 Eine Abschätzung für die Energiedifferenz zwischen dem totalsymmetrischen Zustand und dem tatsächlichen Grundzustand

Der Zustand mit totalsymmetrischer Ortswellenfunktion kann nicht Grundzustand des Triton sein, da die Spin-Austauschoperatoren im Potential (1) der totalsymmetrischen Wellenfunktion noch Funktionen anderer Symmetrie beimischen.

Man kann jedoch bereits ohne eine neue Variationsrechnung, die Ortswellenfunktionen niedrigerer Symmetrie einschließt, eine Aussage darüber machen, ob sich die Energie des Grundzustands erheblich von der in 3.5 angegebenen Energie des totalsymmetrischen Zustands unterscheiden wird.

In Abschnitt 3.1 hatten wir gezeigt, daß die mit effektivem Potential berechnete untere Schranke $\underline{E}^{eff}$ höher liegt, als die mit dem tatsächlichen Potential berechnete. Der Unterschied zwischen beiden Schranken gibt uns ein Maß für die Wichtigkeit der bis jetzt vernachlässigten Funktionen niedrigerer Symmetrie.

Nach Gleichung (46) ergibt sich für diesen Unterschied

$$\underline{E} - \underline{E}^{eff} = \frac{\langle V'^2 \rangle}{\langle H \rangle - E_1} \qquad (108)$$

(Dabei wurde angenommen, daß das Dreiteilchenproblem mit effektivem Potential gelöst sei, das also gilt: $\underline{E}^{eff} = \bar{E} = \langle H \rangle$.)

Für $\langle V'^2 \rangle$ ergibt sich:

$$\langle V'^2 \rangle = 100 \text{ MeV}^2 \qquad (109)$$

Damit erhält man aus Gleichung (108) für die untere Schranke

$$\underline{E} = \underline{E}^{eff} - 20 \text{ MeV} = -27 \text{ MeV} \qquad (110)$$

Diese schlechte untere Schranke deutet darauf hin, daß der Ansatz mit totalsymmetrischer Ortsfunktion zur Lösung unseres Problems nur bedingt geeignet ist, und daß ein Variationsansatz, der auch Ortsfunktionen niedrigerer Symmetrie einschließt, eine wesentliche Absenkung der oberen Schranke mit sich bringen sollte.

Wir wollen nun versuchen, mit Hilfe der Störungsrechnung die Größe dieser Absenkung abzuschätzen:

Im vorhergehenden Kapitel haben wir das Eigenwertproblem

$$H_{eff}\psi_o^e = E_o^{eff}\psi_o^e \quad \text{gelöst.} \tag{111}$$

Wollen wir das Eigenwertproblem mit dem tatsächlichen Potential behandeln,

$$H\psi_o = (H_{eff} + V')\psi_o = E_o\psi_o \tag{112}$$

so können wir, von Gleichung (111) ausgehend, den Unterschied zwischen tatsächlichem und effektivem Potential V' als Störung behandeln.

In der ersten Näherung der Störungsrechnung erhalten wir dann für den gestörten Eigenwert:

$$E_o = E_o^{eff} + \langle\psi_o^e|V'|\psi_o^e\rangle = E_o^{eff} \tag{113}$$

da wir ja das effektive Potential so eingeführt hatten, daß $\langle V\rangle = \langle V_{eff}\rangle$ und somit $\langle V'\rangle = 0$ wird.

In der zweiten Näherung der Störungsrechnung erhalten wir für den gestörten Eigenwert:

$$E_o = E_o^{eff} + \sum_{n\neq 1}^{\infty} \frac{|\langle\psi_o^e|V'|\psi_n^e\rangle|^2}{E_o^{eff} - E_n^{eff}} \tag{114}$$

Dabei sind die ψ_n^e die Eigenfunktionen und E_n^{eff} die Eigenwerte der angeregten Zustände von Gleichung (111). Die Summation läßt sich

ausführen, wenn wir im Nenner für E_n^{eff} einen geeigneten Mittelwert $\bar{e}$ einführen:

$$E_o - E_o^{eff} + \frac{\sum_{n=1}^{\infty} |\langle \psi_o^e | V' | \psi_n^e \rangle|^2}{E_o^{eff} - \bar{e}} = E_o^{eff} + \frac{\langle \psi_o^e | V'^2 | \psi_o^e \rangle}{E_o^{eff} - \bar{e}} \qquad (115)$$

Würden wir für $\bar{e}$ die Energie des ersten angeregten Zustands einsetzen, so erhielten wir die in Gleichung (11o) angegebene untere Schranke.

Present[1o)] hat die Größe $\bar{e}$ durch folgende Summenregel abgeschätzt:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (E_n^{eff} - E_o^{eff}) |\langle \psi_o^e | s_1 | \psi_n^e \rangle|^2 = (\bar{e}' - E_o^{eff}) \langle \psi_o^e | s_1^2 | \psi_o^e \rangle = \frac{\hbar^2}{\mu} \qquad (116)$$

Dabei ist s_1 die erste Komponente des Abstandsvektors zweier Nukleonen. Die Energie $\bar{e}'$ wird sich von $\bar{e}$ unterscheiden, da bei der Mittelung (116) andere Gewichte verwendet werden als in (115).

Man erhält aus Gleichung (116):

$$\bar{e}' - E_o^{eff} = \frac{\hbar^2/\mu}{\langle \psi_o^e | s_1^2 | \psi_o^e \rangle} = 14 \text{ MeV} \approx \bar{e} - E_o^{eff} \qquad (117)$$

Für Present's Potential (ohne hard-core) war $\langle \psi_o^e | V'^2 | \psi_o^e \rangle = 5$ MeV^2, so daß sich in seinem Fall ergab:

$$E_o = E_o^{eff} - 0.3 \text{ MeV} \qquad (118)$$

In unserem Fall ist aber $\langle \psi_o^e | V'^2 | \psi_o^e \rangle = 1oo$ MeV^2 und folglich:

$$E_o = E_o^{eff} - 7 \text{ MeV} \quad !! \qquad (119)$$

Es ist eine Eigenart des hier verwendeten soft-core-Potentials (1), daß Singulett- und Triplett-soft-core verschieden sind, und daß der Hauptbeitrag zu $\langle V'^2 \rangle$ vom soft-core und nicht vom anziehenden Teil des Potentials geliefert werden[+)]. Deshalb ist die Summenregel (116)

[+)] Setzt man die Amplituden der den soft-core beschreibenden Gaußfunktionen gleich Null, so erhält man für $\langle V'^2 \rangle$ nur 1o MeV^2.

ungeeignet zur Abschätzung der mittleren Anregungsenergie $\bar{e}$, denn infolge des unterschiedlichen räumlichen Verhaltens der Operatoren s_1 und V' werden die Energien der Zustände ψ_n^e in Gleichung (114) bzw. (116) verschieden bewichtet: Während s_1 den Grundzustand hauptsächlich mit Zuständen koppelt, die nur schwach ortsveränderlich sind, also kleine kinetische Energie haben, verbindet V', das am soft-core sehr stark variiert, den Grundzustand mit Zuständen sehr hoher kinetischer Energie. Man muß deshalb zur Abschätzung der Größe $\bar{e}$ eine Summenregel aufstellen, in der der Operator wenigstens im Ortsraum das gleiche Verhalten wie V' zeigt. Wir wählen deshalb den Operator

$$W = W(12)+W(23)+W(31) \text{ mit } W(12) = 1/2(V_t-V_s) \qquad (12o)$$

Für den Operator W erhält man durch Einführen von Zwischenzuständen im Erwartungswert des Kommutators $\left[[H_{eff}, W], W\right]$ folgende Summenregel:

$$\tfrac{1}{2}\langle\psi_o^e|\left[[H_{eff},W],W\right]|\psi_o^e\rangle = \sum_{n\neq o}^{\infty}(E_n^{eff}-E_o^{eff})|\langle\psi_o^e|W|\psi_n^e\rangle|^2 \qquad (121)$$

Durch Auswertung des Kommutators erhält man:

$$\tfrac{1}{2}\langle\psi_o^e|\left[[H_{eff},W],W\right]|\psi_o^e\rangle$$

$$= 3\frac{\hbar^2}{m}\langle\psi_o^e|\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \frac{y^2+z^2-x^2}{2yz}\frac{\partial W}{\partial y}\frac{\partial W}{\partial z}|\psi_o^e\rangle = 66\,000\ \text{MeV}^3 \qquad (122)$$

Zur Auswertung der Summe in Gleichung (121) führen wir wieder eine mittlere Energie $\bar{e}'$ ein und erhalten

$$\sum_{n=1}^{\infty}(E_n^{eff}-E_o^{eff})|\langle\psi_o^e|W|\psi_n^e\rangle|^2 = (\bar{e}'-E_o^{eff})\langle\psi_o^e|W^2|\psi_o^e\rangle \qquad (123)$$

Dabei ergibt sich für $\langle\psi_o^e|W^2|\psi_o^e\rangle$ = 22o MeV^2 (124)

Geht man mit den Ergebnissen (122) und (124) in die Summenregel (121) ein, so erhält man

$$\bar{e}' - E_o = 300 \text{ MeV} \tag{125}$$

Nehmen wir die Energie $\bar{e}'$ als Abschätzung für die mittlere Anregungsenergie $\bar{e}$ im Ausdruck für den Eigenwert in zweiter Näherung (114), so erhalten wir:

$$E_o = E_o^{eff} - 0.33 \text{ MeV} \tag{126}$$

Die folgende Variationsrechnung wird ergeben, daß der Unterschied zwischen E_o und E_o^{eff} noch größer ist als diese Abschätzung angibt.

4.2 Der Variationsansatz für das totale Potential

Es soll nun versucht werden, einen Variationsansatz zu finden, der dem totalen Potential Rechnung trägt, und der es erlaubt, die in 4.1 abgeschätzte Absenkung des Energieerwartungswerts zu erreichen.

Bis jetzt hatten wir als Testfunktion verwendet:

$$\psi = u_o(r_{12}, r_{23}, r_{31})\phi_o \tag{127}$$

mit totalsymmetrischer Ortsfunktion u_o und totalantisymmetrischer Spinisospinfunktion ϕ_o.

Außer $$\phi_o = 1/\sqrt{2}\,(\chi_2\eta_1 - \chi_1\eta_2)$$

aufgebaut aus den Spinfunktionen für $S = s_z = 1/2$

$$\chi_1 = 1/\sqrt{2}\,(\uparrow\downarrow\uparrow - \downarrow\uparrow\uparrow) \qquad \chi_2 = 1/\sqrt{6}\,(\uparrow\downarrow\uparrow + \downarrow\uparrow\uparrow - 2\uparrow\uparrow\downarrow)$$

und den Isospinfunktionen für $T = -t_z = 1/2$

$$\eta_1 = 1/\sqrt{2}\,(\{\uparrow\{ - \uparrow\{\{) \qquad \eta_2 = 1/\sqrt{6}\,(\{\uparrow\} + \uparrow\{\{ - 2\{\{\uparrow) \tag{128}$$

lassen sich aus den χ_i, η_i noch genau drei weitere linear unabhängige Spinisospinfunktionen (ebenfalls mit $S = s_z = T = -t_z = 1/2$) aufbauen:

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 1/\sqrt{2}\,(\chi_2\eta_2 - \chi_1\eta_1)\\ \phi_2 &= 1/\sqrt{2}\,(\chi_2\eta_1 + \chi_1\eta_2)\\ \phi_3 &= 1/\sqrt{2}\,(\chi_2\eta_2 + \chi_1\eta_1)\end{aligned} \qquad (129)$$

Über die im Potential (1) stehenden Spin-Austauschoperatoren koppeln alle Spinisospinfunktionen ϕ_i miteinander (siehe Tabelle 5), so daß wir alle vier benötigen, um unser Problem zu beschreiben. Um eine in allen Teilchenvariablen antisymmetrische Variationsfunktion zu bekommen, müssen die ϕ_i mit Funktionen u_i der Ortskoordinaten multipliziert werden, deren Symmetrieeigenschaften von denen der ϕ_i bestimmt werden (siehe Tabelle 6). Wegen der Eigenschaft von ϕ_1 und ϕ_2, sich bei Teilchenvertauschung ineinander zu transformieren, kann man aus $\phi_{1,2}$, $u_{1,2}$ nur eine antisymmetrische Funktion aufbauen:

$$\psi_1 = u_1\phi_1 - u_2\phi_2 \qquad (130)$$

Der neue Variationsansatz besteht demnach nur aus drei Funktionen

$$\psi = \psi_o + \psi_1 + \psi_2 \qquad (131)$$

mit

$$\psi_o = u_o\phi_o \qquad \psi_2 = u_3\phi_3$$

Da aber unser Potential nur in geraden Zuständen wirkt, reduziert sich der Ansatz (131) auf:

$$\psi = \psi_o + \psi_1 \qquad (132)$$

da ψ_2 eine totalantisymmetrische Funktion der Ortsvariablen enthält.

Tabelle 5: Wirkung der Spinaustauschoperatoren P^s_{lm}

auf die Spinisospinfunktionen Φ_i

i =	o	1	2	3
$P^s_{12}\Phi_i$	Φ_2	Φ_3	Φ_o	Φ_1
$P^s_{23}\Phi_i$	$-1/2\Phi_2+\sqrt{3}/2\Phi_1$	$-1/2\Phi_3+\sqrt{3}/2\Phi_o$	$-1/2\Phi_o-\sqrt{3}/2\Phi_3$	$-1/2\Phi_1-\sqrt{3}/2\Phi_2$
$P^s_{31}\Phi_i$	$-1/2\Phi_2-\sqrt{3}/2\Phi_1$	$-1/2\Phi_3-\sqrt{3}/2\Phi_o$	$-1/2\Phi_o+\sqrt{3}/2\Phi_3$	$-1/2\Phi_1+\sqrt{3}/2\Phi_2$

Tabelle 6: Verhalten der Φ_i bei Teilchenvertauschung

i =	o	1	2	3
$P_{12}\Phi_i$	$-\Phi_o$	Φ_1	$-\Phi_2$	Φ_3
$P_{23}\Phi_i$	$-\Phi_o$	$-1/2\Phi_1+\sqrt{3}/2\Phi_2$	$1/2\Phi_2+\sqrt{3}/2\Phi_1$	Φ_3
$P_{31}\Phi_i$	$-\Phi_o$	$-1/2\Phi_1-\sqrt{3}/2\Phi_2$	$1/2\Phi_2-\sqrt{3}/2\Phi_1$	Φ_3

Verhalten der u_i bei Teilchenvertauschung

i =	o	1	2	3
$P_{12}u_i$	u_o	$-u_1$	u_2	$-u_3$
$P_{23}u_i$	u_o	$1/2u_1+\sqrt{3}/2u_2$	$-1/2u_2+\sqrt{3}/2u_1$	$-u_3$
$P_{31}u_i$	u_o	$1/2u_1-\sqrt{3}/2u_2$	$-1/2u_2-\sqrt{3}/2u_1$	$-u_3$

Die geforderten Symmetrieeigenschaften von $u_{1,2}$ erreicht man mit folgendem Ansatz:

$$\begin{aligned} u_1 &= 1/\sqrt{2}(g(231) - g(132)) \\ u_2 &= 1/\sqrt{6}(g(231) + g(132) - 2g(123)) \end{aligned} \tag{133}$$

wobei die Funktion g(123) symmetrisch bei Vertauschung von 1 und 2 ist (Schiff[11]).

Um die Variationsrechnung wieder ohne numerische Integration durchführen zu können, wird die Funktion g ähnlich wie der symmetrische Ansatz (5) aus Gaußfunktionen aufgebaut:

$$\begin{aligned} g(1,2,3) &= g(x,y,z) \\ &= F'(x,y,z)\sum_{i=1}^{n'} c_i e^{-(d_i'+e_i)x^2 - d_i'(y^2+z^2)} \\ F'(x,y,z) &= f_3(x)f_2(y)f_2(z) \\ f_{2,3}(r) &= \sum_{i=1}^{m} a_{i\ 2,3}\, e^{-b_{i\ 2,3} r^2} \end{aligned} \tag{134}$$

Durch $e_i \neq 0$ und $f_2 \neq f_3$ wird die geforderte Asymmetrie von g erreicht.

Für die symmetrische Funktion u_o wählen wir, um Rechenzeit zu sparen, nicht den allgemeinsten Ansatz aus Kapitel 3, sondern den Ansatz (5) mit einer Korrelationsfunktion f_1 wie in Gleichung (96):

$$u_o = f_1(x)f_1(y)f_1(z) \sum_{i=1}^{n} c_i e^{-d_i(x^2+y^2+z^2)} \tag{135}$$

Ein solcher Ansatz ist ausreichend, da er die Eigenfunktion des symmetrischen Zustands, wie die Abschätzung des Überlappungsintegrals (1o7) gezeigt hat, recht gut annähert.

Die Variationsrechnung liefert mit diesen Ansätzen:

$$\bar{E} = -7.65 \text{ MeV} \geq E_o \geq -12.14 \text{ MeV} \tag{136}$$

Die optimalen Überlagerungsparameter c_i, die optimalen Abfallparameter d_i und der Asymmetrieparameter e_i haben die Werte:

c_i	$5.994 \cdot 1o^{-1}$	$9.o74 \cdot 1o^{-1}$	$-7.653 \cdot 1o^{-1}$	$3.446 \cdot 1o^{-1}$	$-1.8o3 \cdot 1o^{-1}$
d_i	$2.175 \cdot 1o^{-2}$	$5.73o \cdot 1o^{-2}$	$1.227 \cdot 1o^{-1}$	$1.341 \cdot 1o^{-1}$	$2.421 \cdot 1o^{-2}$
e_i	-	-	-	-	$9.815 \cdot 1o^{-2}$
	symmetrische Ortsfunktion				teilsymmetrische Ortsfkt

Die Korrelationsfunktionen haben die Form:

in der symmetrischen Ortsfunktion

$$f_1(x) = 1 + 1.324e^{-o.2oox^2} - 1.256e^{-2.426x^2} \qquad (137)$$

in der teilsymmetrischen Ortsfunktion

$$f_2(x) = 1 + 1.2ooe^{-o.o879x^2} - 2.o18e^{-2.547x^2}$$

$$f_3(x) = 1 + o.89oe^{-o.273x^2} - o.663e^{-3.41ox^2} \qquad x \text{ in fm}$$

Bei dieser optimalen Testfunktion befinden sich die Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit von 1 % im nicht totalsymmetrischen Zustand.

4.3 Abschätzung des Eigenwerts undVergleich mit dem experimentellen Wert

Um den Eigenwert aus den in Gleichung (136) angegebenen Schranken abschätzen zu können, müssen wir uns die Frage stellen, ob die hier ermittelte obere Schranke relativ zur unteren Schranke ebenso nahe am Eigenwert liegt, wie die obere Schranke im Falle des Tritonproblems mit effektivem Potential; mit anderen Worten, ob man annehmen kann, daß das Güteverhältnis

$$\eta = \frac{E_o - \underline{E}}{\bar{E} - E_o} \qquad (138)$$

einen ähnlich großen Wert hat wie bei der Variationsrechnung mit effektivem Potential:

$$\eta_{eff} = \frac{E_o^{eff} - \underline{E}^{eff}}{\bar{E}^{eff} - E_o^{eff}} = 16.7 \qquad (139)$$

Dann könnten wir nämlich aus unserer Rechnung schließen, daß der zum Potential (1) gehörende Energieeigenwert nicht mit dem experimentellen Wert übereinstimmt:

Setzt man $\eta = \eta_{eff}$, so erhält man aus Gleichung (138)

$$E_o = -7.9o \text{ MeV} \qquad (14o)$$

Der experimentelle Wert ist jedoch:

$$E_{exp} = -8.492 \text{ MeV}^{12)} \qquad (141)$$

Erst bei einem Güteverhältnis von

$$\eta = 4.1 \qquad (142)$$

wäre unsere Rechnung in Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert. Es läßt sich aber zeigen, daß ein derart geringes Güteverhältnis mit den Informationen, die wir über unser System haben, nicht zu vereinbaren ist.

Für die Abhängigkeit des Güteverhältnisses von der mittleren Anregungsenergie ε der beigemischten Fehler ergibt sich mit Hilfe von Gleichung (57) nach einfacher Rechnung:

$$\eta = \frac{\varepsilon - \bar{E}}{E_1 - \bar{E}} - 1 \qquad (143)$$

bzw.

$$\eta_{eff} = \frac{\varepsilon^{eff} - \bar{E}^{eff}}{E_1^{eff} - \bar{E}^{eff}} - 1 \qquad (144)$$

Aus den Gleichungen (143) und (144) liest man zunächst ab, daß, falls $\varepsilon = \varepsilon^{eff}$ wegen $E_1^{eff} > E_1$ $\eta > \eta_{eff}$ sein muß. Es ist nun die Frage, ob die Energie ε soviel kleiner als ε^{eff} sein kann, daß dieser Effekt überkompensiert werden kann, und man ein Güteverhältnis erhält, wie es der experimentelle Wert erfordert.+)
Die mittlere Anregungsenergie ε setzt sich zusammen aus der mittleren Anregungsenergie ε^{eff} des Fehlers in der symmetrischen Ortsfunktion und der mittleren Anregungsenergie ε' des Fehlers in der Ortsfunktion mit niedrigerer Symmetrie (nach Gleichung 58):

$$\varepsilon = \frac{\alpha^2 \varepsilon^{eff^2} + \beta^2 \varepsilon'^2}{\alpha^2 \varepsilon^{eff} + \beta^2 \varepsilon'} \qquad (145)$$

Für die Energie ε^{eff} hatten wir ermittelt (Gleichung 99)):

$$\varepsilon^{eff} = 150 \text{ MeV} \qquad (146)$$

Da aber bei der Mittelung in Gleichung (145) große Energien gegenüber kleinen bevorzugt werden, ist als Ergebnis dieser Mittelung eine sehr kleine Energie unwahrscheinlich.

Die bei der Variation am stärksten bevorzugten Funktionen niedriger Symmetrie haben Energien von ca. 50 MeV. Beimischungen von Funktionen mit Energien von 20 MeV geben keine größere Verbesserung in der oberen Schranke als solche mit Energien von 100 MeV, so daß man annehmen muß, daß das Energiespektrum der noch fehlenden Funktionen kein scharfes Maximum bei sehr kleinen Energien haben kann. Das Energiespektrum wird sich vielmehr über einen großen Energiebereich ausdehnen, was wiederum infolge der Mittelung (58), die große Energien bevorzugt, eine große mittlere Anregungsenergie ε' wahrscheinlich macht.

Ja, man muß sogar annehmen, daß die mittlere Anregungsenergie ε' der Fehler in der Ortsfunktion mit niedriger Symmetrie gleich ist der mittleren Anregungsenergie ε^{eff} der Fehler in der symmetrischen

---

+) Bei einer mittleren Anregungsenergie von ε = 20 MeV wäre unsere Rechnung in Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert.

Ortsfunktion. Wir hatten in Abschnitt 4.1 gesehen, daß der Hauptunterschied zwischen dem totalsymmetrischen Zustand und dem wahren Grundzustand des Triton verursacht wird durch die unterschiedliche Höhe von Singulett- und Triplett-soft-core. Es dürften also die Fehler in den Zweier- und Dreierkorrelationen der Funktionen niedriger Symmetrie den Hauptbeitrag zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke geben. Die mittleren Anregungsenergien der Fehler in diesen Konfigurationsbereichen liegen aber nach Tabelle 2 bei ca. 1oo MeV und höher. Man kann folglich als Ergebnis der Mittelung (145) eine Energie ε erwarten, die ungefähr mit der mittleren Anregungsenergie der Fehler beim Tritonproblem mit effektivem Potential übereinstimmt (Gleichung (99)). Übernimmt man die dort angegebenen Fehlerschranken, so erhält man für den Eigenwert:

$$E_o = (-7.84 \pm o.o6)\ \text{MeV} \qquad (147)$$

Danach ist das Potential (1) zu schwach, um die richtige Bindungsenergie des Triton (141) zu geben. Dennoch ist (147) kein schlechtes Ergebnis, denn wie Kok[6] in einer Zusammenstellung gezeigt hat, variieren für eine Reihe von Potentialen, die vor 1965 entwickelt wurden, die Bindungsenergien für das Triton zwischen 5.7 und 12.5 MeV.

Was das Potential (1) betrifft, bedürfen allerdings noch zwei Punkte der Klärung.

1. Es müßte geprüft werden, wie sich eine genauere Anpassung des Potentials an die Deuteronenbindungsenergie auswirken würde. Die Deuteronenbindungsenergie ist offensichtlich nicht richtig gefittet worden, wie mit einer Variationsrechnung gezeigt werden kann. Mit einem Variationsansatz[+] wurden obere und untere Schranken für das Deuteron berechnet. Es ergab sich:

$$\bar{E} = -2.152\ \text{MeV} \geq E_o^D \geq \underline{E} = -2.165\ \text{MeV}$$

+) $\chi(r) = \sum_i a_i e^{-b_i r^2}$

Der Energieeigenwert des Deuteron liegt aber bei E_o^D = -2.226 MeV, was den oben angegebenen Schranken widerspricht.

2. Es müßte untersucht werden, welche Alternativen es zu Potential (1) gibt. Man könnte sich vorstellen, daß mehrere Potentiale existieren, die die Zweiteilchendaten gut wiedergeben, jedoch am Triton verschiedene Ergebnisse liefern.

   Insbesondere ist interessant, wie weit der Unterschied zwischen den Höhen von Triplett- und Singulett-soft-core variiert werden kann, ohne die Übereinstimmung mit den Zweiteilchendaten zu zerstören. Von diesem Unterschied hängt der Eigenwert des Triton empfindlich ab.[+)]

   Nach Aussagen der Autoren sind durch das experimentelle Material die Höhen der soft-cores auf ±1o MeV festgelegt - wenn man einen Ansatz für Triplett- und Singulett-Potential mit drei Gaußfunktionen macht. Es ist die Frage, ob man bei flexibelerem Ansatz nicht mehr Freiheit in der Wahl der core-Höhen hätte.

Doch diese Fragen sollten erst dann eingehend untersucht werden, wenn auch die Tensorkräfte in das Potential eingebaut sind, was nach den vielversprechenden Ergebnissen von H. Eikemeier[13)] in Kürze zu erwarten ist.

[+)] Der Störterm in Gleichung (112) V', der den Unterschied zwischen effektivem und tatsächlichem Potential ausmacht, ergibt $\langle V'^2 \rangle$ = 1oo MeV; wenn man jedoch den soft-core wegläßt, so wird $\langle V'^2 \rangle$ = 1o MeV^2!

5. Korrektur der von Hackenbroich[3] für das α-Teilchen angegebenen oberen Schranke

In den vorangegangenen Kapiteln hatten wir gezeigt, daß an der von Hackenbroich angegebenen oberen Schranke für den Energieeigenwert des Triton eine dreifache Korrektur anzubringen ist:

1. wegen der vernachlässigten Terme im Jastrowfaktor
2. wegen der ungenügenden Zweier- und Dreierkorrelationen
3. wegen der Vernachlässigung von nicht totalsymmetrischen Anteilen in der Wellenfunktion.

In diesem Kapitel sollen die entsprechenden Korrekturen für das α-Teilchen abgeschätzt werden. Dabei ergibt sich, daß man bei der Verallgemeinerung der für das Dreiteilchensystem gewonnenen Ergebnisse auf den Fall von 4 Teilchen nur die Vergrößerung des Konfigurationsraumes in Rechnung stellen muß. Die so korrigierte Schranke kann dann mit den Ergebnissen von I. R. Afnan und Y. C. Tang[14] verglichen werden, die im Widerspruch zu der unkorrigierten Schranke von Hackenbroich stehen.

5.1 Auswirkung der vernachlässigten Terme des Jastrowfaktors

Durch die Vernachlässigung von Korrelationsfaktoren im Jastrowfaktor wird die Wahrscheinlichkeit, drei Teilchen nahe beieinander zu finden, erhöht. Diese erhöhte Wahrscheinlichkeit führt zu Fehlern in den Erwartungswerten von potentieller und kinetischer Energie, die dieser Wahrscheinlichkeit proportional sind. Die Fehler im Falle des Triton kann man aus Abb. 2 ablesen und ergeben sich bei einem Abfallparameter von d = o.o9 fm^{-2} zu:

$$\Delta T_t = 0.75 \text{ MeV} \qquad \Delta V_t = 0.5o \text{ MeV} \tag{148}$$

Aus diesen Werten kann man die entsprechenden Werte für das α-Teilchen ableiten, wenn man beachtet, daß die Wahrscheinlichkeit, drei Nukleonen beieinander zu finden, für das α-Teilchen viermal so groß ist wie beim Triton[+]. Folglich erhält man für die Fehler in den Erwartungswerten von kinetischer und potentieller Energie im Falle des α-Teilchens:

$$\Delta T_\alpha = 4 \cdot \Delta T_t = 3.o \text{ MeV} \qquad \Delta V_\alpha = 4 \cdot \Delta V_t = 2.o \text{ MeV} \tag{149}$$

Man kann also für die obere Schranke für den Energieeigenwert des α-Teilchens einen Fehler von ca. 5 MeV erwarten, und zwar wird die exakte Schranke nach dem in Kapitel 2 Gesagten höher als die genäherte Schranke liegen.

Um diese Abschätzung zu stützen, wurde zum Vergleich ein Matrixelement exakt und genähert gerechnet. Da jedoch die Rechenzeit, die zur exakten Auswertung eines Matrixelements nötig ist, beim α-Teilchen 64 mal größer ist als beim Triton, wurde ein anderer Jastrowfaktor verwendet.

[+] Das Volumen beider Kerne ist etwa gleich groß. In diesem Volumen findet man beim α-Teilchen 4 Teilchentripel, beim Triton jedoch nur eines.

$$F = 1 - \sum_{i>j=1}^{A} \chi(ij) \qquad \chi(12) = 0.6\, e^{-3r_{12}^2} \tag{150}$$

Bei diesem Jastrowfaktor ist die Zahl der auszuwertenden Integrale $(1 + A(A-1)/2)^2$. Sie wächst also bedeutend langsamer mit der Teilchenzahl A an als bei dem Jastrowfaktor von Ansatz (5) (Zahl der Integrale = $2^{A(A-1)}$), so daß eine exakte Rechnung sehr wohl möglich ist.

Man erhält:

$$\Delta T_\alpha = 5.2 \text{ MeV} \qquad \Delta V_\alpha = 2.0 \text{ MeV} \tag{151}$$

Der Fehler im Erwartungswert der kinetischen Energie wird durch (151) überschätzt, da der ersatzweise eingeführte Jastrowfaktor (150) Nullstellen hat und folglich eine größere kinetische Energie liefert als der Jastrowfaktor aus Ansatz (5), mit dem die genäherte Rechnung eigentlich zu vergleichen wäre. Für die an die obere Schranke anzubringende Korrektur nehmen wir deshalb die Abschätzung (149):

$$\Delta E_1 = 5 \text{ MeV} \tag{152}$$

5.2 Einfluß der fehlerhaften Zweierkorrelationen

Im Falle des Triton beträgt der Abstand zwischen dem Energieeigenwert (147) und dem exakt mit dem Hackenbroich-Ansatz (5) berechneten oberen Schranke (54) 1.4 MeV.

0.6 MeV dieser Differenz werden von den ungenügenden Zweierkorrelationen (und zu einem geringen Maß auch von den ebenfalls ungenügenden Dreierkorrelationen) verursacht, wie sich in Kapitel 3 ergab.

In Hackenbroich's Variationsansatz für das α-Teilchen werden die Zweierkorrelationen mit demselben Jastrowfaktor wie beim Triton beschrieben. Es soll deshalb in diesem Abschnitt untersucht werden, wie sich die fehlerhaften Zweierkorrelationen auf die obere Schranke des α-Teilchens auswirken.

Nach Gleichung (73) erhält man durch Integration des Quadrates von

$$r = \frac{H - \langle H \rangle}{\sqrt{E_1 - \langle H \rangle}} \psi \tag{153}$$

über einen gewissen Konfigurationsbereich k den Beitrag der Fehler dieses Bereiches zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke:

$$\int_{\kappa} r^2 d\tau = \Delta_k = (\bar{E} - \underline{E})_k \tag{154}$$

Setzt man in Gleichung (153) anstelle von E_1 die mittlere Anregungsenergie ε der der Testfunktion beigemischten Fehler ein

$$r_\varepsilon = \frac{H - \langle H \rangle}{\sqrt{\varepsilon - \langle H \rangle}} \psi \tag{155}$$

so erhält man durch

$$\int_{\kappa} r_\varepsilon^2 d\tau = \frac{\int_{\kappa} (H\psi)^2 d\tau - \langle H \rangle^2 \int_{\kappa} \psi^2 d\tau}{\varepsilon - \langle H \rangle} = (\bar{E} - E_\circ)_\kappa \tag{156}$$

(siehe Gleichung (57)) den Beitrag des Konfigurationsbereiches k zum Abstand zwischen oberer Schranke und Eigenwert.

Es läßt sich nun zeigen, daß im interessierenden Bereich (nur zwei Nukleonen in Wechselwirkung) sich die Funktion r für das α-Teilchen ebenso verhält wie für das Triton, so daß ein Unterschied nur durch den vergrößerten Konfigurationsraum des α-Teil-

chens hereinkommt. Im Bereich der Zweierkorrelationen wird das Verhalten der Testfunktion ausschließlich durch den Jastrowfaktor bestimmt, den Hackenbroich bei allen Kernen gleich ansetzt. Der Vierteilchen-Hamiltonoperator zerfällt in diesem Bereich in den Zweiteilchen-Hamiltonoperator und einen Operator der Relativbewegung der nicht in Wechselwirkung stehenden Teilchen. In diesem Bereich unterscheidet sich der Hamiltonoperator des α-Teilchens und der des Triton nur durch die verschiedenen Operatoren der Relativbewegung der nicht wechselwirkenden Teilchen.

Dieser Unterschied geht aber nicht in die Funktion r_ε ein, da die Relativbewegung der nicht wechselwirkenden Teilchen relativ gut durch den Gaußfunktionenansatz beschrieben wird[+)], so daß das Verhalten von r_ε und somit auch die Größe $(\bar{E}\text{-}E_o)_k$ im wesentlichen durch die Fehler der Testfunktion in den Zweierkorrelationen bestimmt wird. Aus denselben Gründen ist auch die mittlere Anregungsenergie ε für diesen Bereich identisch mit der entsprechenden Energie im Falle des Triton, so daß wir als einzigen Unterschied zwischen Triton- und α-Teilchen-Rechnung nur den größeren Konfigurationsbereich des α-Teilchens berücksichtigen müssen. Der Konfigurationsraum des α-Teilchens, in dem Zweierkorrelationen eine Rolle spielen, ist doppelt so groß wie der des Triton, da es bei gleichem Kernvolumen im α-Teilchen 6 Paare, im Triton jedoch nur 3 Paare gibt. Folglich liefert die Integration (156):

$$(\bar{E} - E_o)_\alpha - \int_\alpha r_{\varepsilon_\alpha}^2 \, d\tau = 2 \int_t r_{\varepsilon_t}^2 \, d\tau = 1.2 \text{ MeV} \qquad (157)$$

Die zweite an der Hackenbroich'schen Schranke anzubringende Korrektur ist somit:

$$\Delta E_2 = -1.2 \text{ MeV} \qquad (158)$$

+) Nach Tabelle 1 (Seite 47) wird der Abstand zwischen oberer und unterer Schranke zu nur ca. 25 % vom fehlerhaften Verhalten der Testfunktion im Konfigurationsbereich x,y,z ≥ 2 fm verursacht.

5.3 Berücksichtigung nicht totalsymmetrischer Anteile in der Testfunktion

Ein Zustand mit totalsymmetrischer Ortsfunktion, wie er durch den Hackenbroich'schen Variationsansatz beschrieben wird, kann nicht Grundzustand eines Teilchensystems sein, in dem ein Potential der Form (1) wirkt, da die Spin-Austauschoperatoren des Potentials der totalsymmetrischen Wellenfunktion noch Funktionen anderer Symmetrie beimischen. Wir hatten in Abschnitt 4.1 gesehen, daß man ein Maß für den Unterschied von totalsymmetrischem Zustand und wahrem Grundzustand erhält, wenn man die unteren Schranken für den Energieeigenwert vergleicht, die man mit dem tatsächlichen Potential bzw. mit einem effektiven Potential berechnet hat[+)]. Für den Unterschied der beiden Schranken erhält man, wenn man voraussetzt, daß die Testfunktion das Problem mit effektivem Potential löst (1o8):

$$\underline{E} - \underline{E}^{eff} = \frac{\langle V'^2 \rangle}{\langle H \rangle - E_1} \quad \text{mit } V' = V - V_{eff} \tag{159}$$

Für die Energie E_1 des ersten angeregten Zustands ist im Fall des α-Teilchens die Grundzustandsenergie des Triton einzusetzen, nach Gleichung (147) $E_1 = -7.84$ MeV.

Für <H> setzen wir die Hackenbroich'sche obere Schranke, versehen mit den Korrekturen (152) und (158) ein: <H> = -28.1 MeV. Die Berechnung von $\langle V'^2 \rangle$ ergab: $\langle V'^2 \rangle = 258$ MeV^2.

Man erhält damit:

$$\underline{E} = \underline{E}^{eff} - 12.7 \text{ MeV} \tag{16o}$$

+) Das tatsächliche Potential des Vierteilchensystems hat die Form: $V = \sum_{i>j=1}^{4} V(ij)$ mit dem Zweiteilchen-Potential aus Gl.(1). Das effektive Potential erhält man daraus durch Weglassen aller Terme mit Spin-Austauschoperatoren (siehe Gl. (42)).

Ein Vergleich mit dem entsprechenden Ergebnis für das Triton (11o) zeigt, daß sich beim α-Teilchen die fehlenden nicht totalsymmetrischen Anteile in der unteren Schranke nicht so stark auswirken wie beim Triton. Es wäre allerdings falsch, aufgrund dieses Ergebnisses anzunehmen, daß die nicht totalsymmetrischen Anteile beim α-Teilchen eher zu vernachlässigen sind als beim Triton.

Für die Energiedifferenz zwischen totalsymmetrischem Zustand und tatsächlichem Grundzustand erhält man nämlich nach Formel (115):

$$E_o = E_o^{eff} + \frac{\langle V'^2 \rangle}{E_o^{eff} - \bar{e}} \tag{161}$$

Für die mittlere Anregungsenergie $\bar{e}$ erhält man, ebenso wie in Abschnitt 4.1, eine Abschätzung mit Hilfe der dort angeführten Summenregel (121):

$$\bar{e} - E_o^{4l} \approx \bar{e}' - E_o^{4l} = \frac{\frac{1}{2}\langle [[H_{4l}, W], W] \rangle}{\langle W^2 \rangle} \tag{162}$$

mit $W = \sum_{i>j=1}^{4} W(ij)$ $\qquad W(12) = (V_t(12) - V_s(12))/2$

Die Auswertung des Kommutators in Gl. (162) ergibt:

$$\bar{e} - E_o^{4l} \approx \bar{e}' - E_o^{4l} = \frac{\frac{\hbar^2}{m} \left\langle \left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \frac{y^2+z^2-x^2}{yz} \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial W}{\partial z} \right\rangle}{\langle W^2(x) + 4 W(x) W(y) + W(x) W(w) \rangle} \tag{163}^{+)}$$

Wenn man beachtet, daß zum Erwartungswert von Operatoren wie zum Beispiel W(x)W(y) nur die Teile des Konfigurationsraumes beitragen, in denen gleichzeitig x und y klein sind, so kann man fol-

---

+) x, y, z sind die Dreieckskoordinaten, wie in Abschnitt 1.2 eingeführt. Sie beschreiben die Gestalt des von den drei ersten Nukleonen gebildeten Dreiecks. Für die Abstände des vierten Nukleons von den drei anderen wird gesetzt: $|\vec{r}_{14}| = u$, $|\vec{r}_{24}| = v$, $|\vec{r}_{34}| = w$.

gende Vernachlässigung machen:

$$\langle W(x)W(y)\rangle,\ \langle W(x)W(w)\rangle \ll \langle W(x)^2\rangle;\quad \langle \frac{\partial W}{\partial y}\frac{\partial W}{\partial z}\rangle \ll \langle (\frac{\partial W}{\partial x})^2\rangle \tag{164}$$

und erhält dann aus (163):

$$\left(\bar{e}' - E_o^{eff}\right)_\alpha = \frac{\frac{\hbar^2}{m}\langle \psi_\alpha^e | (\frac{\partial W}{\partial x})^2 | \psi_\alpha^e\rangle}{\langle \psi_\alpha^e | W(x)^2 | \psi_\alpha^e\rangle} \tag{165}$$

Die gleichen Vernachlässigungen im entsprechenden Ausdruck für das Triton ergeben:

$$\left(\bar{e}' - E_o^{eff}\right)_t = \frac{\frac{\hbar^2}{m}\langle \psi_t^e | (\frac{\partial W}{\partial x})^2 | \psi_t^e\rangle}{\langle \psi_t^e | W(x)^2 | \psi_t^e\rangle} \tag{166}$$

Wie in Abschnitt 4.1 diskutiert, bedingt der große Unterschied zwischen Singulett- und Triplett-soft-core, daß der Hauptbeitrag zu den Erwartungswerten $\langle V'^2\rangle$, $\langle W^2\rangle$ und $\langle (\frac{\partial W}{\partial x})^2\rangle$ aus dem Bereich von Nukleonenabständen $x \lesssim 1$ fm kommt. In diesem Bereich haben aber die Testfunktionen ψ_t^e und ψ_α^e dasselbe Verhalten (gleicher Jastrowfaktor!), folglich hängen die Ausdrücke (165) und (166) nicht von der speziellen Kernstruktur ab und sind einander gleich.

$$(\bar{e}' - E_o^{eff})_\alpha \simeq (\bar{e}' - E_o^{eff})_t = 300 \text{ MeV} \tag{167}$$

Benutzt man $\bar{e}'$ als Abschätzung für die mittlere Anregungsenergie $\bar{e}$, so erhält man aus Gleichung (161):

$$E_o = E_o^{eff} - 0.9 \text{ MeV} \tag{168}$$

Als dritte Korrektur ist deshalb an der oberen Schranke von Hackenbroich anzubringen:

$$\Delta E_3 = -0.9 \text{ MeV} \tag{169}$$

Dabei ist zu beachten, daß die entsprechende Abschätzung im Falle des Triton (126) den Unterschied in den Energien von totalsymmetrischem Zustand und wirklichem Grundzustand unterschätzte, wie ein Vergleich mit den Ergebnissen der verschiedenen Variationsrechnungen mit symmetrischer bzw. nicht totalsymmetrischer Testfunktion (Gl. (104) und (147)) zeigt.

5.4 Vergleich der korrigierten oberen Schranke mit den Ergebnissen von Afnan und Tang

Afnan und Tang[14] haben mit Hilfe einer Monte-Carlo-Rechnung eine obere und eine untere Schranke für den Energieeigenwert des α-Teilchens berechnet. Da sie das effektive Potential (siehe Fußnote Seite 8o) verwendeten, hat ihre untere Schranke die Bedeutung, daß sie mit keiner totalsymmetrischen Testfunktion unterschritten werden kann.

Ihre Ergebnisse waren:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= (-27.74 \pm 0.11)\ \text{MeV} \\ \underline{E} &= (-28.74 \pm 0.22)\ \text{MeV} \end{aligned} \qquad (17o)$$

Diesen Ergebnissen widerspricht die von Hackenbroich[3] mit einer totalsymmetrischen Testfunktion berechnete obere Schranke:

$$\bar{E}_H = -31.91\ \text{MeV} \qquad (171)$$

Dieser Widerspruch verschwindet, wenn man an der Hackenbroich'schen Schranke die oben abgeschätzten Korrekturen (152) und (158) anbringt[+]:

$$\bar{E}_{korr} = \bar{E}_H + \Delta E_1 + \Delta E_2 \approx -28\ \text{MeV} \qquad (172)$$

Eine genauere Angabe der korrigierten Schranke ist sinnlos, da die Korrekturen nicht exakt berechnet, sondern abgeschätzt wurden.

Da die korrigierte Schranke geringfügig tiefer liegt als die obere Schranke von Afnan und Tang (17o), darf man annehmen, daß der Hackenbroich'sche Variationsansatz mit der in Abschnitt 3.3 be-

---

[+] Die dritte Korrektur (169), die sich auf die Berücksichtigung nicht totalsymmetrischer Anteile in der Testfunktion bezieht, darf hier nicht angebracht werden, da sich die untere Schranke (17o) nur auf totalsymmetrische Zustände bezieht.

schriebenen Verbesserung der Zweierkorrelationen mindestens so gut wie der Variationsansatz von Afnan und Tang ist.

Die Bemerkung von Afnan und Tang, daß man die nicht totalsymmetrischen Anteile in der Wellenfunktion vernachlässigen kann, da der Unterschied zwischen der Energie des totalsymmetrischen Zustands und der des wahren Grundzustands "nur einige wenige Zehntel MeV" ausmacht, trifft für das Potential (1) nicht zu. Nach der Abschätzung (169) beträgt der Unterschied ca. o.9 MeV, und nach den beim Triton gemachten Erfahrungen dürfte der Unterschied noch größer sein, so daß der Eigenwert des mit Potential (1) gebundenen Vierteilchensystems etwa bei E_o = -29 MeV liegen dürfte. Der Vergleich mit dem experimentellen Wert E_{exp} = -28.1 MeV[12] zeigt, daß bei Verwendung von Potential (1) das α-Teilchen im Gegensatz zum Triton etwas zu stark gebunden ist.

Literatur

1 K. Wildermuth und W. McClure, Springer Tracts in Modern Physics, 41 (1966)

2 E. W. Schmid, Habilitationsschrift, Technische Hochschule München (1965)

3 H. H. Hackenbroich, Habilitationsschrift, Universität Tübingen (1967)

4 J. L. Gammel und R. M. Thaler, Phys. Rev. 1o7, 291 (1957)

5 H. Eikemeier und H. H. Hackenbroich, Z. Phys. 195, 412 (1966)

6 L. P. Kok, Universität Groningen/Niederlande, Report IR 64 (1966)

7 W. Wodsak, Doktorarbeit, Universität Tübingen (1969)

8 G. Temple, Proc. Roy. Soc. (London) 119, 276 (1928)

9 E. W. Schmid und J. Schwager, Z. Phys. 21o, 3o9 (1968)

1o R. D. Present, Phys. Rev. 5o, 87o (1936)

11 L. I. Schiff, Phys. Rev. 133, 8o2 (1964)

12 A. V. Tollestrup, W. A. Fowler, C. C. Lauritsen, Phys. Rev. 78, 372 (195o)

13 H. Eikemeier, Doktorarbeit, Universität Tübingen (1969)

14 I. R. Afnan und Y. C. Tang, Preprint, University of Minnesota (1968)

Vergl auch 115
215 auch 1114

DK 539.128.3'4:539.143.3

Ziegelmann, H.: Exakte obere und untere Schranken für die Tritonbindungsenergie mit soft-core Potential.

Bundesministerium für wissenschaftliche Forschung
Forschungsbericht K 69-33, 1969
84 Seiten, 8 Abb., 6 Tab., 14 Lit., DM 17.85

Die Genauigkeit von Hackenbroichs Näherung im Jastrowfaktor, die Flexibilität seiner Testfunktion und die Wichtigkeit nicht symmetrischer Anteile werden für das Triton untersucht und auf das α-Teilchen verallgemeinert. Es wurde eine Methode entwickelt, um die Beiträge verschiedener Gebiete des Konfigurationsraumes zum Abstand zwischen oberer und unterer Schranke getrennt zu berechnen. Dadurch erhält man Informationen, die eine gezielte Verbesserung der Testfunktion und eine sehr genaue Abschätzung des Eigenwertes erlauben.

DK 539.128.3'4:539.143.3

Ziegelmann, H.: Accurate upper and lower bounds for the binding energy of the triton with soft-core potential.

Bundesministerium für wissenschaftliche Forschung
Report K 69-33, 1969
84 pages, 8 figs., 6 tabs., 14 refs., DM 17.85

The accuracy of Hackenbroich's approximation in the Jastrov factor, the flexibility of his trial function and the importance of nonsymmetric functions are tested in the case of the triton and generalized to the α-particle. A procedure was developed to calculate separately the contributions of different regions of configuration space to the gap between upper and lower bounds. So one obtains information which clearly shows, where the trial function should be improved and which allows a very precise estimation with respect to the eigenvalue.