Das Schalenmodell mit Monte-Carlo Methoden

Seminarvortrag im Rahmen der Vortragsreihe "Kernstruktur und nukleare Astrophysik" Bastian Löher



TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT



1. Inhaltsverzeichnis

1Inhaltsverzeichnis		i
2Motivation		1
2.1.	Das klassische Schalenmodell	1
2.2.	Problematik	2
3Das Schalenmodell mit Monte-Carlo Methoden		2
3.1.	Überblick	2
3.2.	Thermodynamische Erwartungswerte	2
3.3.	Zeitentwicklung	3
3.4.	Hubbard-Stratonovich Transformation	4
3.5.	Monte-Carlo Integration	4
3.6.	Das Vorzeichenproblem	5
4Anwendungsbeispiele		6
4.1.	Bindungsenergien	6
4.2.	Thermische Eigenschaften	6
4.3.	Doppelter Betazerfall	7
4.4.	Gamow-Teller-Übergänge und Elektroneneinfang	7
5Zus	Zusammenfassung	
6Aus	Ausblick	

2. Motivation

Zur Motivation soll die herkömmliche Art und Weise, wie Kerne und ihre Eigenschaften mit Hilfe des Schalenmodells beschrieben werden. Es wird dann gezeigt, dass für Kerne aus höheren Massenregionen zunehmend technische Probleme eine weitere Untersuchung limitieren.

2.1. Das klassische Schalenmodell

Im Schalenmodell wird ein Hamiltonian bestehend aus einer Einteilchen- und Kopplungskomponenten eingesetzt. Die Kopplung soll hier im weiteren Verlauf lediglich zwischen zwei Teilchen stattfinden.

$$\hat{H} = \sum_{i}^{A} \hat{t}_{i} + \frac{1}{2} \sum_{ij}^{A} \hat{v}_{ij}$$

Zur Lösung wird ein Ansatz mit einem mittleren Potential U und einer Restwechselwirkung, die als schwacher Störungsterm eingeht, durchgeführt, so dass der Hamiltonian separiert werden kann

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{res} = \sum_{i}^{A} (\hat{t}_i + \hat{U}_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij}^{A} (\hat{v}_{ij} - \hat{U}_i \delta_{ij})$$

Das mittlere Potential ist hierbei entweder das Potential des harmonischen Oszillators, das Woods-Saxon-Potential, oder Ähnliches. Der Term \hat{H}_0 kann in dieser Form exakt durch Diagonalisierung gelöst werden.

Bildhaft wird das betrachtete System in einen inerten Kern und einen Valenzraum aufgespalten. Im Kern befinden sich alle Teilchen auf abgeschlossenen Schalen und weshalb dort hohe Anregungsenergien nötig sind, während die Niveaus im Valenzraum nicht komplett gefüllt sind. Die Anregungsenergien sind hier niedriger, was dazu führt, dass die Restwechselwirkung hier den stärksten Einfluss hat und bei der Beschreibung niedrig liegender Energieniveaus nicht vernachlässigt werden kann.



Abbildung 2.1 Schematische Darstellung des mittleren Potentials mit Auftrennung in Kern und Valenzraum.

Um bei der Beschreibung des Problems automatisch den fermionischen Charakter der Teilchen und das Pauli-Prinzip zu berücksichtigen, wird der Übergang in den Formalismus der 2. Quantisierung eingeführt.

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} a_{\gamma}$$

Die Einteilchenquantenzahlen n, l, j, m und m_t werden nun zu Sammelquantenzahlen α zusammengefasst. a und a[†] sind dabei die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. ε sind die Einteilchenenergien und V die ungekoppelten Zweiteilchen-Matrixelemente, die von den jeweils erzeugten und vernichteten Teilchen abhängen. Zur Bestimmung dieser Matrixelemente werden verschiedene Verfahren eingesetzt, die hier nicht näher erläutert werden.

Der weitere Lösungsablauf ist durch die folgenden Schritte festgelegt:

- Wahl eines passenden Konfigurationsraumes bestehend aus einer Anzahl N_s freier Einteilchenzustände (jeweils für Neutronen und Protonen) und einer Anzahl N_v an Valenznukleonen, die auf die Einteilchenzustände verteilt werden.
- 2. Erzeugung einer Einteilchenbasis aus den Einteilchenzuständen

$$\alpha \rangle = |nljmm_t\rangle$$

3. Generierung von Slaterdeterminanten als direktes Produkt der Einteilchenzustände

 $|\Psi\rangle_{a} = \hat{A}|\alpha_{1}\rangle \otimes |\alpha_{2}\rangle \otimes \cdots |\alpha_{A}\rangle$

4. Berechnung der Einträge der Hamiltonmatrix als Erwartungswerte des Hamilton-Operators zwischen den einzelnen Einteilchenzuständen $H_{ij} = \left\langle \Psi_{j} \middle| \hat{H} \middle| \Psi_{i} \right\rangle_{a}$

5. Diagonalisierung der Hamiltonmatrix

Das Resultat der Diagonalisierung sind Eigenwerte und Eigenvektoren, die die Lösung des Problems darstellen.

2.2. Problematik

Dieses Schema ist auf den ersten Blick recht einfach und ermöglicht ohne großen Aufwand auch die Berechnung von leichten Kernen. Jedoch taucht mit zunehmender Massenzahl das Problem auf, dass die Dimension der Hamiltonmatrix so groß wird, dass eine Diagonalisierung nicht mehr mit herkömmlichen Methoden durchführbar ist. Die Dimension der Hamiltonmatrix ist definiert durch die Anzahl an Slaterdeterminanten, die aus dem Modellraum gebildet werden können. Eine gute Näherung für die Dimension ist

$$D \approx \begin{pmatrix} N_s^p \\ N_v^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_s^n \\ N_v^n \end{pmatrix}$$

Am Beispiel des Kerns 60 Zn mit der pf-Schale (N_s=20, N_v=10) als Modellraum ergibt sich eine Dimension von etwa 3.4×10^{10} Slaterdeterminanten. Diese Anzahl kann durch Symmetrieüberlegungen zwar reduziert werden, jedoch wird der Gewinn schnell wieder kompensiert, wenn der Modellraum leicht vergrößert wird. Heute können Matrizen mit einer Dimension von 10^5 bis 10^9 gut berechnet werden. Darüber hinaus sind andere Methoden nötig, um das Problem zu lösen. Ein solcher Ansatz wird auf den folgenden Seiten beschrieben.

3. Das Schalenmodell mit Monte-Carlo Methoden

Das Schalenmodell mit Monte-Carlo Methoden (oder englisch: Shell Model Monte Carlo, SMMC) wurde in den neunziger Jahren von W. E. Ormand, S. E. Koonin, D. J. Dean und K. Langanke entwickelt.

3.1. Überblick

Zunächst soll ein Überblick über den Lösungsweg gegeben werden, bevor die Details der einzelnen Schritte diskutiert werden.

1. Übergang zur Betrachtung thermodynamischer Erwartungswerte von Operatoren anstatt der Berechnung von Energieeigenwerten

$$\left\langle \hat{\Omega} \right\rangle = \frac{Tr[\hat{U}\hat{\Omega}]}{Tr[\hat{U}]},$$

- 2. Behandlung der Zeitentwicklung des statistischen Operators in imaginärer Zeit $\hat{U} = e^{-\beta \hat{H}}$.
- 3. Transformation des Hamilton-Operators auf eine Einteilchenform

$$\hat{H} = \varepsilon \ \hat{O} + \frac{1}{2} V \hat{O} \hat{O},$$

4. Linearisierung des Hamilton-Operators

$$\hat{h} = \varepsilon \hat{O} + sV\sigma\hat{O},$$

5. Lösen der aus der Transformation resultierenden Integrale

$$\left\langle \hat{\Omega} \right\rangle = \frac{\int D\sigma W_{\sigma} \Omega_{\sigma}}{\int D\sigma W_{\sigma}},$$

3.2. Thermodynamische Erwartungswerte

Die Betrachtung thermodynamischer Erwartungswerte impliziert die Berechnung von Eigenschaften der Kerne bei endlichen Temperaturen T. Dies ist ein wichtiges Merkmal des SMMC. Der in dieser Berechnung auftauchende statistische Operator

$$\hat{U}=e^{-\beta\hat{H}},$$

enthält die inverse Temperatur β . Dieser Operator wird nun als Zeitentwicklung in imaginärer Zeit β =it aufgefasst. Grundzustandseigenschaften des betrachteten Kerns können somit z.B. durch die Grenzwertbetrachtung bei β =0 erhalten werden. Weiterhin muss bei der Betrachtung realistischer Kerne darauf geachtet werden, dass die Teilchenzahl im großkanonischen Ensemble während der Zeitentwicklung fluktuiert. Ein Übergang in das kanonische Ensemble ist mittels einer Projektion auf den Unterraum mit der festen Teilchenzahl A möglich.

$$\left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_{A} = \frac{Tr_{A}[\hat{U}\hat{\Omega}]}{Tr_{A}[\hat{U}]}, \quad Tr_{A}[\hat{X}] = \sum_{i} \left\langle i \left| \hat{P}_{A}\hat{X} \right| i \right\rangle$$

3.3. Zeitentwicklung

Die Behandlung der Zeitentwicklung ist der komplexeste Teil dieser Betrachtung. Vorab deshalb einige Bemerkungen zur Vorgehensweise.

Die Anwendung der Zweiteilchenkomponente auf eine Slaterdeterminante führt aus dem betrachteten Modellraum heraus. Deshalb muss der Hamilton-Operator zunächst auf eine Form gebracht werden, die nur noch aus Einteilchenoperatoren besteht. Die Zweiteilchenkomponente wird zu diesem Zweck durch Einteilchendichteoperatoren ausgedrückt. Dies sind quadratische Einteilchenoperatoren.

Weiterhin ist die Berechnung einfacher, wenn zusätzlich eine Linearisierung des quadratischen Terms durchgeführt wird. Dies wird mittels der Hubbard-Stratonovich-Transformation erreicht.

Zunächst wird der Hamilton-Operator in JMgekoppelter Form betrachtet

$$\begin{split} \hat{H}_{2} &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{J} \left[\left(1 + \delta_{\alpha\beta} \right) \left(1 + \delta_{\gamma\delta} \right) \right]^{1/2} V_{J}^{N} \left(\alpha\beta, \gamma\delta \right) \\ &\times \sum_{M} \hat{A}_{JM}^{\dagger} \left(\alpha\beta \right) \hat{A}_{JM} \left(\gamma\delta \right) \end{split}$$

Die auftauchenden Operatoren A_{JM} sind dabei Paarerzeuger und -vernichter. Die V_J sind die Zweiteilchen-Matrixelemente.

Um die Kopplung zu Einteilchendichteoperatoren zu ermöglichen, wird die Pandya-Transformation durchgeführt. Dabei werden die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren neu gekoppelt

$$\hat{\rho}_{KM}(\alpha\gamma) = \sum_{m_{\alpha}m_{\gamma}} \left(j_{\alpha}m_{\alpha} j_{\gamma}m_{\gamma} \middle| KM \right) a^{\dagger}_{j_{\alpha}m_{\alpha}} \widetilde{a}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}$$
$$\widetilde{a}_{j_{\alpha}m_{\alpha}} = (-1)^{j_{\alpha}+m_{\alpha}} a_{j_{\alpha},-m_{\alpha}}$$

Die Zweiteilchenkomponente des Hamilton-Operators separiert nun wieder in einen Einteilchenoperator und einen Teil, der ein Produkt aus Einteilchendichteoperatoren enthält

$$\hat{H}_{2} = \hat{H}_{1} + \hat{H}_{2} \qquad \qquad \hat{H}_{1} = \sum_{\alpha\delta} \varepsilon_{\alpha\delta} \hat{\rho}_{00}(\alpha\delta)$$
$$\hat{H}_{2} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{K} E_{K}(\alpha\gamma,\beta\delta) \sum_{M} (-1)^{M} \hat{\rho}_{K,-M}(\alpha\gamma) \hat{\rho}_{KM}(\beta\delta)$$

Die hier auftretenden Einteilchenenergien ϵ° und Teilchen-Loch-Matrixelemente E_K haben die folgende komplexe Form, die aus der Transformation resultiert

$$\begin{split} \varepsilon_{\alpha\delta}^{'} &= -\frac{1}{4} \sum_{\beta} \sum_{J} (-1)^{J+j_{\alpha}+j_{\beta}} \frac{(2J+1)}{\sqrt{2j_{\alpha}+1}} V_{J}^{N} \sqrt{\left(1+\delta_{\alpha\beta}\right)} \left(1+\delta_{\beta\delta}\right) \\ & E_{K}(\alpha\gamma,\beta\delta) = (-1)^{j_{\beta}+j_{\gamma}} \sum_{J} (-1)^{J} (2J+1) \begin{cases} j_{\alpha} & j_{\beta} & J \\ j_{\delta} & j_{\gamma} & K \end{cases} \\ & \times \frac{1}{2} V_{J}^{N}(\alpha\beta,\gamma\delta) \sqrt{\left(1+\delta_{\alpha\beta}\right)} \left(1+\delta_{\gamma\delta}\right) \end{split}$$

Wichtig ist hier die direkte Abhängigkeit von den Zweiteilchenmatrixelementen.

Es ist nun möglich, die Matrix E_{κ} zu diagonalisieren, um so den Hamilton-Operator auf eine diagonale Form zu bringen. Dies kann effizient mit Hilfe des Lanczos-Algorithmus durchgeführt werden. Die resultierenden Eigenwerte und Eigenvektoren ersetzen nun die Matrix im Hamiltonian. Außerdem geht die Notation von der Beschreibung einzelner Teilchen und Löcher ($\alpha\gamma$), ($\beta\delta$) über in die Beschreibung von Teilchen-Loch-Paaren i und j. In der Diagonalform taucht jedoch lediglich das i-te Paar auf.

$$\hat{H}_{2}^{'} = \frac{1}{2} \sum_{K\alpha} \lambda_{K\alpha} \sum_{M} (-1)^{M} \hat{\rho}_{K,-M}(\alpha) \hat{\rho}_{KM}(\alpha)$$
$$\hat{\rho}_{KM}(\alpha) = \sum_{i} \hat{\rho}_{KM}(i) v_{K\alpha}(i)$$

Um diesen Hamiltonian nun auf die gewünschte quadratische Form zu bringen werden weitere Operatoren definiert

$$\hat{Q}_{KM}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{M0})}} \left(\hat{\rho}_{KM}(\alpha) + (-1)^{M} \hat{\rho}_{K,-M}(\alpha) \right)$$
$$\hat{P}_{KM}(\alpha) = -\frac{i}{\sqrt{2(1+\delta_{M0})}} \left(\hat{\rho}_{KM}(\alpha) - (-1)^{M} \hat{\rho}_{K,-M}(\alpha) \right)$$

Damit wird die Beschreibung der Zweiteilchenkomponente des Hamiltonians durch eine diagonal quadratische Form erreicht

$$\hat{H}_{2}^{'} = \frac{1}{2} \sum_{K\alpha} \lambda_{K\alpha} \sum_{M \ge 0} (-1)^{M} \left(\hat{Q}_{KM}^{2}(\alpha) + \hat{P}_{KM}^{2}(\alpha) \right)$$

Diese Form wird im nächsten Schritt mittels der Hubbard-Stratonovich Transformation linearisiert.

Die bisherige Beschreibung bezog sich nur auf Nukleonen im Allgemeinen und hat nicht berücksichtigt, dass es Unterschiede zwischen Protonen und Neutronen gibt. Eine isospininvariante Herleitung ist aber ebenfalls möglich. Infolge dessen tauchen noch Summationen über den Isospin auf und die Operatoren sind im Allgemeinen auch vom Isospin abhängig.

3.4. Hubbard-Stratonovich Transformation

Die Linearisierung geschieht durch Ausnutzung einer Gauss-Identität, die wie folgt definiert ist

$$e^{-\beta\hat{H}} = \sqrt{\frac{\beta|V|}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma e^{-(1/2)\beta|V|\sigma^2} e^{-\beta\hat{h}}$$
$$\hat{h} = \varepsilon \hat{O} + sV\sigma\hat{O}$$

Die vom quadratischen Operator abhängige Exponentialfunktion geht über in ein Integral über ein Hilfsfeld σ , das im gesamten Raum existiert. Integriert wird über einen gaussförmigen Term und eine weitere Exponentialfunktion, die den linearen Hamiltonoperator \hat{h} enthält. Dieser Term enthält außerdem das Feld σ und eine Phase s, die in Abhängigkeit vom Potential negativ oder positiv sein kann.

Diese Transformation kann als Übergang von einem System interagierender Zweiteilchen-Potentiale in ein System unabhängiger Teilchen in einem fluktuierenden Feld interpretiert werden.

Der thermodynamische Erwartungswert geht nun über in

$$\left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_{A} = \frac{\int d\sigma \ e^{-(1/2)\beta |V|\sigma^{2}} e^{-\beta \hat{h}} Tr_{A}[\hat{U}_{\sigma}\hat{\Omega}]}{\int d\sigma \ e^{-(1/2)\beta |V|\sigma^{2}} e^{-\beta \hat{h}} Tr_{A}[\hat{U}_{\sigma}]},$$

und kann als eine Art gewichteter Mittelwert aufgefasst werden. Die Problemstellung wurde durch die Transformationen so verlagert, dass die Integrale ausgewertet werden müssen. Es besteht kein Zweiteilchenproblem mehr, da nur noch Einteilchenoperatoren auftauchen. Die Schwierigkeit besteht nun darin, dass die Integration über den gesamten Raum ausgeführt werden muss.

Es ergeben sich für einen realistischen Vielteilchen-Hamiltonian weitere Probleme. Einerseits wurde bisher nur ein bestimmter Einteilchenoperator Ô betrachtet. Im Allgemeinen besteht der Hamiltonian jedoch aus vielen verschiedenen Operatoren

$$\hat{H} = \sum_{\alpha}^{A} \varepsilon_{\alpha} \hat{O}_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha}^{A} V_{\alpha} \hat{O}_{\alpha} \hat{O}_{\alpha}$$

so dass eine Summation über die Teilchenzahl eingeführt werden muss.

Diese verschiedenen Operatoren vertauschen im Allgemeinen nicht. Dies wird jedoch im SMMC nicht beachtet. Der entstehende Fehler ist von der Ordnung β^2 und damit abhängig von der Länge des Zeitschritts der Zeitentwicklung. Um den Fehler möglichst gering zu halten wird die Zeitentwicklung in viele kleine Intervalle aufgespalten, die nacheinander durchgeführt werden.

$$\beta = N_t \Delta \beta$$

Für jeden Zeitschritt muss die Linearisierung einzeln durchgeführt werden, so dass der Zeitentwicklungsoperator die folgende Form annimmt

$$e^{-\Deltaeta\hat{H}} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \prod\limits_{n=1}^{N_t} \left(rac{d\sigma_{lpha n} \Deltaeta ig| V_{lpha} ig|}{2\pi}
ight) e^{-\Deltaeta \sum\limits_{lpha} ig| V_{lpha} ig| \sigma_{lpha n}^2} e^{-\Deltaeta \hat{h}_n}$$

Werden alle Komponenten zusammengefügt, so lässt sich der thermodynamische Erwartungswert bei fester Teilchenzahl kompakt schreiben als

$$\begin{split} \left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_{A} &= \frac{\int D\sigma W_{\sigma} \Omega_{\sigma}}{\int D\sigma W_{\sigma}}, \\ D\sigma &= \prod_{n=1}^{N_{t}} \prod_{\alpha}^{A} \left(\frac{d\sigma_{\alpha\alpha} \Delta\beta |V_{\alpha}|}{2\pi} \right) \quad \Omega_{\sigma} &= \frac{Tr_{A}[\hat{U}_{\sigma}\hat{\Omega}]}{Tr_{A}[\hat{U}_{\sigma}]}, \\ W_{\sigma} &= G_{\sigma} Tr_{A} \hat{U}_{\sigma} \qquad \qquad \hat{U}_{\sigma} &= \hat{U}_{\sigma N_{t}} \dots \hat{U}_{\sigma 2} \hat{U}_{\sigma 1} \\ G_{\sigma} &= e^{-\Delta\beta \sum_{\alpha}^{N} |V_{\alpha}| \sigma_{\alpha}^{2}} \qquad \qquad \hat{U}_{\sigma n} &= e^{-\Delta\beta \hat{h}_{n}} \\ \hat{h}_{n} &= \sum_{\alpha}^{A} \varepsilon_{\alpha} \hat{O}_{\alpha} + s_{\alpha} V_{\alpha} \sigma_{\alpha n} \hat{O}_{\alpha} \end{split}$$

Dabei werden alle Integralmaße zu D σ zusammengefasst. Außerdem wird das Gewicht des Integrals als W_{σ} definiert. Zur Lösung müssen die Integrale ausgewertet und das Verhältnis gebildet werden. Diese Aufgabe ist wegen der hohen Dimension des Raums auf dem integriert wird nicht einfach. Eine näherungsweise Lösung der Integrale ist daher angebracht. Die Monte-Carlo Integration ist eine solche Methode.

3.5. Monte-Carlo Integration

Die Monte-Carlo Integration basiert darauf, das Integral nur an den Stellen auszuwerten, die einen signifikanten Beitrag leisten. Dazu wird eine Wahrscheinlichkeitsdichte

$$P_{\sigma} = \frac{W_{\sigma}}{\int D\sigma W_{\sigma}}, \qquad \int D\sigma P_{\sigma} = 1, \quad P_{\sigma} \ge 1$$

definiert, die die Gewichte W_{σ} enthält. Wenn aus dieser Verteilung Zufallszahlen generiert werden, so reduziert sich die Lösung der Integrale näherungsweise auf eine Summation der Form

$$\left\langle \hat{\Omega} \right\rangle \approx \frac{1}{N_{\sigma}} \sum_{k=1}^{N_{\sigma}} \Omega_{\sigma_{k}}$$

Der Vorteil bei dieser Methode ist, dass die Unsicherheit mit der der Wert des Integrals bekannt ist, mit zunehmender Anzahl an Stützstellen abnimmt.

Die Stützstellen werden mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus erzeugt. Dies ist eine Art Random Walk Algorithmus. Es wird ein beliebiger Startpunkt σ_0 gewählt, von dem aus iterativ Versuchsschritte mit der Schrittweite δ durchgeführt werden. Jeder Versuchsschritt wird einem Test unterzogen und dann entweder verworfen oder akzeptiert. Das Annahmekriterium ist

$$r \ge 1$$
 $r = \frac{W_{k+1}}{W_k}$

so dass der Versuchsschritt auf jeden Fall akzeptiert wird, wenn der Beitrag des Integrals nach dem Schritt größer wird. Ist r<1, so wird der Schritt mit einer Wahrscheinlichkeit r akzeptiert und ansonsten verworfen. Die Schrittweite δ kann so angepasst werden, dass im Mittel die Hälfte der Schritte akzeptiert werden.

Ein wichtiger Punkt hierbei ist, dass die generierten Samples nicht unabhängig von einander sind. Die Korrelationslänge ist vom jeweiligen Problem (z.B. Dimension, Hamiltonian,...) abhängig. Um die Korrelation aufzuheben, kann eine Anzahl Zwischenwerte generiert werden. Genauso kann die Abhängigkeit vom Startpunkt verringert werden. Dafür werden zu Beginn eine Anzahl Samples generiert, die nicht für die Berechnung des Integrals verwendet werden. Dieser Prozess heißt "thermalisieren".

An diesem Punkt ist die Beschreibung der Monte-Carlo Methoden abgeschlossen. Die Integrale können nun berechnet werden, so dass thermodynamische Erwartungswerte gebildet werden können. Jedoch soll noch kurz auf ein weiteres wichtiges Problem eingegangen werden.

3.6. Das Vorzeichenproblem

Bisher wurde angenommen, dass das Gewicht des Integrals im gesamten Raum positive Werte aufweist. Dies erweist sich bei der Betrachtung eines realistischen Hamiltonians allerdings als falsch. Oft ist das Gewicht zu einem großen Teil negativ.

Damit aber die Monte-Carlo Integration angewendet werden kann, muss das Vorzeichen des Integralgewichts im Mittel nahe an +1 liegen. Wenn das Vorzeichen stark fluktuiert, kann das Integral nicht sinnvoll ausgewertet werden und die Näherung gilt nicht.

Die realistischen Hamilton-Operatoren lassen sich deshalb in zwei Klassen einteilen. Problemlose Operatoren beschreiben etwa gg-Kerne mit negativem Potential und uu-Kerne auf der N=Z-Achse. Problematische Operatoren beschreiben gu- oder ug-Kerne und enthalten Potentiale mit positivem Vorzeichen.

Um dieses Problem zu umgehen existiert die Möglichkeit, den problematischen Hamiltonian in einen "guten" und einen "schlechten" Teil aufzuspalten

$$\hat{H}_{G} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} \hat{O}_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{V_{\alpha} < 0} V_{\alpha} \hat{O}_{\alpha} \hat{O}_{\alpha}$$
$$\hat{H}_{B} = \frac{1}{2} \sum_{V_{\alpha} \ge 0} V_{\alpha} \hat{O}_{\alpha} \hat{O}_{\alpha}$$

Im nächsten Schritt wird ein neuer Parameter g eingeführt, der die beiden Teile wieder verbindet

$$\hat{H}_{g} = \hat{H}_{G} + g\hat{H}_{B}$$

Dieser Hamiltonian wird nun für verschiedene Werte von g für g<0 berechnet. Die daraus resultierenden Datenpunkte werden durch eine polynomische Funktion angepasst und zu g=1extrapoliert, was dem ursprünglichen Hamilton-Operator entspricht.

Als Beispiel ist dieses Vorgehen hier am Kern $^{54}\mathrm{Fe}$ zu sehen



Abbildung 3.1 Extrapolation zu g=1 für verschiedene Operatoren am Beispiel des Kerns ⁵⁴Fe.

4. Anwendungsbeispiele

Es folgen einige Beispiele, die die Anwendung des SMMC demonstrieren.

4.1. Bindungsenergien

Zunächst wurden Bindungsenergien in der Massenregion von A=44 bis A=66 für verschiedene Kerne berechnet und mit experimentellen Daten verglichen. Die Rechnungen wurden mit der pf-Schale als modellraum durchgeführt.



Abbildung 4.1 Vergleich der berechneten Massendefekte mit experimentellen Daten.

Die beobachtete mittlere Abweichung ist 500 keV bei Bindungsenergien von bis zu 70 MeV. Die Ergebnisse der Rechnungen sind also in guter Übereinstimmung mit den Messdaten. Weiterhin wurden Rechnungen in höheren Massenbereichen mit einem ähnlich guten Ergebnis durchgeführt. Dazu wurde für die Rechnungen noch das $g_{9/2}$ -Orbital hinzugenommen.

4.2. Thermische Eigenschaften

Mit SMMC können ohne weiteren Aufwand auch Eigenschaften von Kernen bei endlichen Temperaturen berechnet werden. Als Beispiel ist hier die Abhängigkeit der Wärmekapazität einiger N=40 Isotone von der Temperatur zu sehen



Abbildung 4.2 Einfluss von Pairing auf die Wärmakapazität der N=40 Isotone bei niedrigen Temperaturen.

Für die Rechnungen wurde ein Hamiltonian mit QQ-Wechselwirkung und einem abschaltbaren Pairingterm verwendet. Es ist gut zu erkennen, dass das Pairing einen starken Einfluss auf die Wärmekapazität bei niedrigen Temperaturen hat.

4.3. Doppelter Betazerfall

Eine weitere interessante Anwendung ist die Beschreibung des doppelten Betazerfalls. Dabei geht ein Kern, der normalerweise nicht zu Betazerfall fähig ist, direkt in einen Kern mit $Z^*=Z+2$ über und emittiert zwei Elektronen und Elektronantineutrinos.

$$(Z,A) \rightarrow (Z+2,A)+2e^{-}+2\overline{\nu}_{a}$$

Es wird allerdings auch ein neutrinoloser Zerfall postuliert, der auftreten kann, falls das Elektronneutrino sein eigenes Antiteilchen, also ein Majoranateilchen, ist. Dies würde jedoch zur Leptonenzahlverletzung führen. Experimentell werden große Anstrengungen mit leistungsfähigen und großen Ge-Detektoren unternommen, um Hinweise auf diesen alternativen Übergang zu finden.

Mit SMMC-Methoden konnte das Matrixelement für den doppelten Betazerfall in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, allerdings gibt es noch keine Hinweise auf einen neutrinolosen Zerfall.

4.4. Gamow-Teller-Übergänge und Elektroneneinfang

Der Gamow-Teller-Operator beschreibt gleichzeitig einen Spin- und Isospinflip. Experimentelle Messungen ergeben eine stark fragmentierte Stärkeverteilung dieses Operators (gestrichelt)



Die Rechnungen im SMMC liefern als Ergebnisse Schwerpunkte und Breiten dieser Stärkeverteilungen (durchgezogene Linien). Auch hier ist eine gute Übereinstimmung zum Experiment zu sehen. Allerdings werden z.T. Ausläufer zu hohen Energien unterschätzt.

Weiterhin ist durch die genaue Kenntnis von Elektroneneinfangraten eine bessere Beschreibung von Supernovae möglich. Im Vergleich zum Independent Particle Model (IPM) ist mit SMMC auch die Bestimmung von EC-Raten bei Kernen jenseits von N=40 möglich.



5. Zusammenfassung

Es wurde anhand des klassischen Schalenmodells die Problematik der vielen Dimensionen diskutiert, die dazu führt, dass für schwerere Kerne die Berechnung nicht möglich ist.

Durch die Betrachtung thermodynamischer Erwartungswerte und der Zeitentwicklung in imaginärer Zeit kann die Auswertung des Hamiltonians näherungsweise auch mit bisher unerreicht großen Modellräumen durchgeführt werden.

Dazu wird die Zweiteilchenkomponente des Hamiltonian in Einteilchendichteoperatoren zerlegt und anschließend mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich Transformation linearisiert.

Zum Lösen der auftretenden Integrale wird auf die Monte-Carlo Integration unter Verwendung des Metropolis-Algorithmus zurückgegriffen.

Zum Schluss wurde noch ein einfacher Lösungsweg für das Vorzeichenproblem bei realistischen Hamiltonians erläutert. Die Wirkung und Nützlichkeit des SMMC wurde an mehreren Beispielen gezeigt.

6. Ausblick

In Zukunft werden Rechnungen mit noch größerem Modellraum möglich sein, um weitere Kenntnisse über Eigenschaften der Dipolriesenresonanz, das Verhalten von Kernen bei Temperaturen über 1.5 MeV und den Einfluss der Schwerpunktsbewegung zu erhalten.

Weiterhin werden weitere Anstrengungen unternommen, das Vorzeichenproblem zu umgehen, um z.B. die Behandlung von uu-Kernen unterhalb von 800 keV zu ermöglichen.

Außerdem werden realistischere EC-Raten und Matrixelemente für den doppelte Betazerfall für weitere Kerne bestimmt werden. Tests für die Modelle IBM und RPA sind auch möglich.