Beschreibung kurzreichweitiger Korrelationen durch unitäre Operatoren

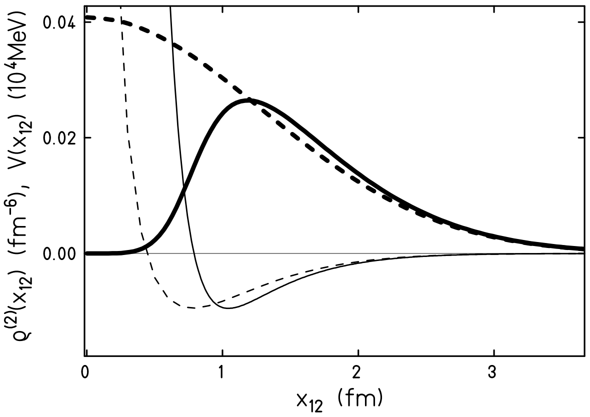
H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth;
GSI & Technische Universität Darmstadt
Jürgen Schnack; Universität Osnabrück

Gliederung:

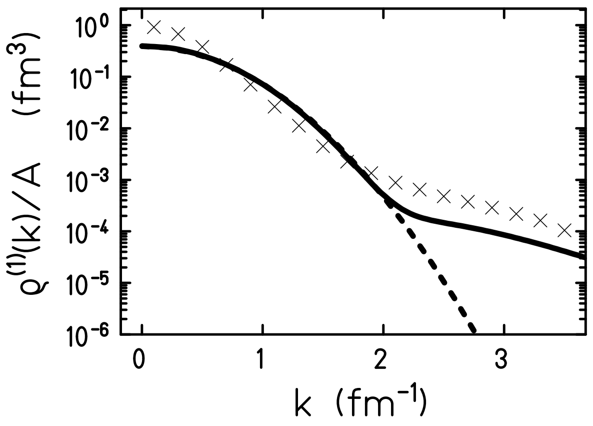
1. Einführung in das Problem
   - Realistische Wechselwirkungen kontra Produktzustand
   - Produktzustand
   - Dichten
2. Mögliche Auswege
3. Methode der unitären Korrelatoren
   - Vorteile
   - Wirkungsweise
   - Clusterentwicklung
   - Wahl der Korrelationsfunktion
   - Beispiele

Problem

Produktzustand kontra kurzreichweitige Abstoßung:



Experimentelle Befunde:



- Grundzuständ: Sättigung der Bindungsenergie und der Einteilchendichte im Ort; hohe Impulskomponenten;

- Reaktionen: harte Stöße bei kurzen Abständen.

Produktzustände

A–Teilchenzustände sind Zustände im A–Teilchen–Hilbertraum. Die einfachsten A–Teilchenzustände sind gerade die Produktzustände mit der entsprechenden Symmetrie.

1. Produktzustände aus A Einteilchenzuständen für unterscheidbare Teilchen:

$$|\,\Psi\,\rangle = |\,\psi_1\,\rangle \otimes |\,\psi_2\,\rangle \otimes \cdots \otimes |\,\psi_A\,\rangle$$

2. Antisymmetrische Produktzustände (Slaterdeterminanten) von A Einteilchenzuständen für identische Fermionen:

$$\begin{aligned} |\,\Psi\,\rangle &= \underset{\sim}{A}(\,|\,\psi_1\,\rangle \otimes |\,\psi_2\,\rangle \otimes \cdots \otimes |\,\psi_A\,\rangle) \\ &= \sum_{\pi} \mathrm{sgn}(\pi)\,|\,\psi_{\pi(1)}\,\rangle \otimes \cdots \otimes |\,\psi_{\pi(A)}\,\rangle \\ |\,\Psi;(i,j)\,\rangle &= -\,|\,\Psi;(j,i)\,\rangle \quad \text{Pauliprinzip} \end{aligned}$$

3. Symmetrische Produktzustände von A Einteilchenzuständen für identische Bosonen:

$$\begin{aligned} |\,\Psi\,\rangle &= \underset{\sim}{S}(\,|\,\psi_1\,\rangle \otimes |\,\psi_2\,\rangle \otimes \cdots \otimes |\,\psi_A\,\rangle) \\ &= \sum_{\pi} |\,\psi_{\pi(1)}\,\rangle \otimes \cdots \otimes |\,\psi_{\pi(A)}\,\rangle \\ |\,\Psi;(i,j)\,\rangle &= |\,\Psi;(j,i)\,\rangle \end{aligned}$$

Einteilchendichte

Einteilchendichte in Ortsdarstellung:

$$
\begin{aligned}
& \rho_x^{(1)}(\vec{x},\vec{x}\,') \equiv \langle\, \vec{x} \,|\, \underset{\sim}{\rho}_x^{(1)} \,|\, \vec{x}\,' \,\rangle \\
= \quad & \int \mathrm{d}^3x_2 \;\ldots \mathrm{d}^3x_A \langle\, \Psi \,|\, \vec{x}\,', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_A \,\rangle \langle\, \vec{x}, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_A \,|\, \Psi \,\rangle \\
+ \quad & \int \mathrm{d}^3x_1 \; \mathrm{d}^3x_3 \;\ldots \mathrm{d}^3x_A \langle\, \Psi \,|\, \vec{x}_1, \vec{x}\,', \vec{x}_3, \ldots \rangle \langle\, \vec{x}_1, \vec{x}, \vec{x}_3, \ldots \,|\, \Psi \,\rangle \\
+ \quad & \ldots
\end{aligned}
$$

sei $|\,\Psi\,\rangle$ eine Slaterdeterminante, dann

$$
\begin{aligned}
= \quad & A \int \mathrm{d}^3x_2 \;\ldots \mathrm{d}^3x_A \langle\, \Psi \,|\, \vec{x}\,', \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_A \,\rangle \langle\, \vec{x}, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_A \,|\, \Psi \,\rangle \\
= \quad & \langle\, \Psi \,|\, \underset{\sim}{\Psi}^\dagger(\vec{x}\,') \underset{\sim}{\Psi}(\vec{x}) \,|\, \Psi \,\rangle \\
= \quad & \sum_{k,l}^{A} \langle\, \vec{x} \,|\, \psi_l \,\rangle \mathcal{O}_{lk} \langle\, \psi_k \,|\, \vec{x}\,' \,\rangle \;, \qquad (\mathcal{O})^{-1}_{kl} = \langle\, \psi_k \,|\, \psi_l \,\rangle
\end{aligned}
$$

Impulsdarstellung analog.

Einteilchendichteoperator im Einteilchenhilbertraum:

$$
\underset{\sim}{\rho}^{(1)} \quad = \quad \sum_{k,l}^{A} \,|\, \psi_l \,\rangle \mathcal{O}_{lk} \langle\, \psi_k \,|
$$

Zweiteilchendichte

Zweiteilchendichte in Ortsdarstellung:

$$\rho_x^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{x}_1', \vec{x}_2') \equiv \langle\, \vec{x}_1, \vec{x}_2 \,|\, \underset{\sim}{\rho}_x^{(2)} \,|\, \vec{x}_1', \vec{x}_2' \,\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}^3x_3 \;\ldots \mathrm{d}^3x_A \langle\, \Psi \,|\, \vec{x}_1', \vec{x}_2', \ldots, \vec{x}_A \,\rangle\langle\, \vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_A \,|\, \Psi \,\rangle$$

$$+ \quad \ldots$$

sei $|\, \Psi \,\rangle$ eine Slaterdeterminante, dann

$$= \frac{A(A-1)}{2} \int \mathrm{d}^3x_3 \;\ldots \mathrm{d}^3x_A \langle\, \Psi \,|\, \vec{x}_1', \vec{x}_2', \ldots, \vec{x}_A \,\rangle \times \langle\, \vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_A \,|\, \Psi \,\rangle$$

$$= \langle\, \Psi \,|\, \underset{\sim}{\Psi}^\dagger(\vec{x}_2')\underset{\sim}{\Psi}^\dagger(\vec{x}_1')\underset{\sim}{\Psi}(\vec{x}_1)\underset{\sim}{\Psi}(\vec{x}_2) \,|\, \Psi \,\rangle$$

$$= \sum_{k,l,m,n}^{A} \langle\, \psi_k, \psi_l \,|\, \vec{x}_1', \vec{x}_2' \,\rangle (\mathcal{O}_{mk}\mathcal{O}_{nl} - \mathcal{O}_{nk}\mathcal{O}_{ml}) \langle\, \vec{x}_1, \vec{x}_2 \,|\, \psi_m, \psi_n \,\rangle$$

$$= \sum_{k,l,m,n}^{A} \Big(\langle\, \vec{x}_1 \,|\, \psi_m \,\rangle \mathcal{O}_{mk} \langle\, \psi_k \,|\, \vec{x}_1' \,\rangle\langle\, \vec{x}_2 \,|\, \psi_n \,\rangle \mathcal{O}_{nl} \langle\, \psi_l \,|\, \vec{x}_2' \,\rangle - \langle\, \vec{x}_2 \,|\, \psi_n \,\rangle \mathcal{O}_{nk} \langle\, \psi_k \,|\, \vec{x}_1' \,\rangle\langle\, \vec{x}_1 \,|\, \psi_m \,\rangle \mathcal{O}_{ml} \langle\, \psi_l \,|\, \vec{x}_2' \,\rangle \Big)$$

Wenn sich die Zweiteilchendichte als antisymmetrisches Produkt der Einteilchendichte ergibt, ist sie „unkorreliert“.

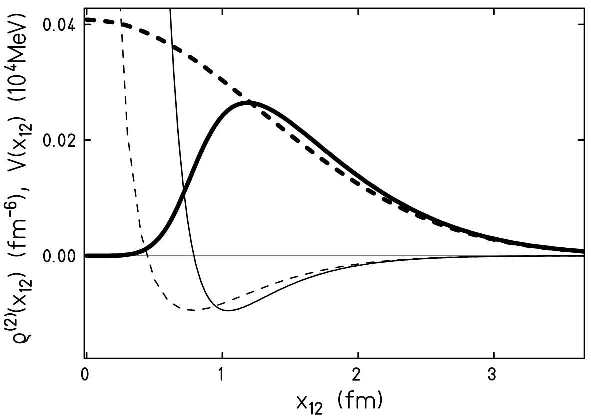
Beispiel ^{4}He

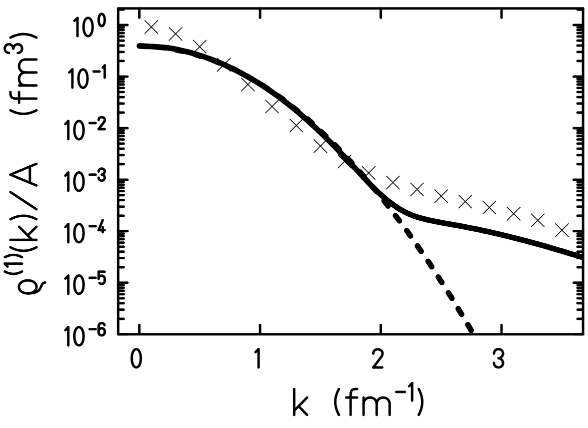
Zustand des ^{4}He:

$$
\begin{aligned}
|\,\Phi\,\rangle &= \frac{1}{\langle\,\widehat{\Phi}\,|\,\widehat{\Phi}\,\rangle^{\frac{1}{2}}}\;|\,\widehat{\Phi}\,\rangle \\
|\,\widehat{\Phi}\,\rangle &= \frac{1}{A!}\sum_{\pi}\mathrm{sgn}(\pi)\;|\,\phi_{\pi(1)}\,\rangle\otimes\cdots\otimes\,|\,\phi_{\pi(A)}\,\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\,\vec{x}\,|\,\phi_k\,\rangle &= \exp\left\{-\frac{(\,\vec{x}-\vec{b}_k\,)^2}{2\,a_k}\right\}\otimes|\,m_s(k)\,\rangle\otimes\,|\,m_t(k)\,\rangle \\
& \quad \forall k: \vec{b}_k = 0,\; a_k = a_0
\end{aligned}
$$

Dichten:





Mögliche Auswege

Superposition von Slaterdeterminanten:

$$|\,\Psi\,\rangle \quad = \quad \sum_n c_n \,|\,\Phi_n\,\rangle$$

Nachteil: zu viele nötig

Jastrow–Korrelationsfunktionen:

$$\langle\,\vec{X}\,|\,\Psi\,\rangle \quad = \quad \langle\,\vec{X}\,|\,\underset{\sim}{C}_{Jastrow}\,|\,\Phi\,\rangle = \prod_{k<l} f(x_{kl})\langle\,\vec{X}\,|\,\Phi\,\rangle$$

$$\langle\,\Psi\,|\,\underset{\sim}{B}\,|\,\Psi\,\rangle \quad = \quad \frac{\langle\,\Phi\,|\,\underset{\sim}{C}^{\dagger}_{Jastrow}\underset{\sim}{B}\underset{\sim}{C}_{Jastrow}\,|\,\Phi\,\rangle}{\langle\,\Phi\,|\,\underset{\sim}{C}^{\dagger}_{Jastrow}\underset{\sim}{C}_{Jastrow}\,|\,\Phi\,\rangle}$$

Nachteil: nicht unitär, d.h., Normierung notwenig (FHNC,...). Zustandsabhängig.

Weitere Methoden:

- G–Matrix–Methode
- Methode der korrelierten Basisfunktionen
- Green's Funktionen Monte Carlo
- Generatorkoordinatenmethode

Unitäre Korrelationsoperatoren

Idee: Der korrelierte Versuchszustand ergibt sich durch eine unitäre, zustandsunabhängige Transformation aus dem unkorrelierten Zustand:

$$|\,\Psi\,\rangle = \underset{\sim}{C}\;|\,\Phi\,\rangle\;, \quad \underset{\sim}{C}^{\dagger}\underset{\sim}{C} = \underset{\sim}{\mathbb{1}}$$

Erwartungswerte oder Matrixelemente:

$$\langle\,\Psi\,|\,\underset{\sim}{B}\,|\,\Psi\,\rangle = \langle\,\Phi\,|\,\underset{\sim}{C}^{\dagger}\underset{\sim}{B}\,\underset{\sim}{C}\,|\,\Phi\,\rangle = \langle\,\Phi\,|\,\underset{\sim}{B}_{\mathrm{eff}}\,|\,\Phi\,\rangle$$

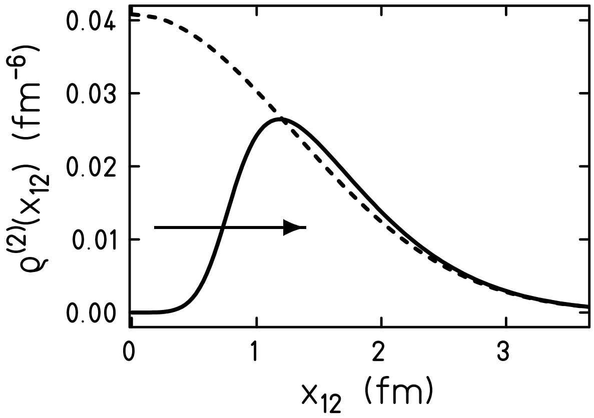
Wegen Zustandsunabhängigkeit gilt:

$$\begin{aligned}
i\,\frac{d}{dt}\;|\,\Psi(t)\,\rangle &= \underset{\sim}{H}\,|\,\Psi(t)\,\rangle \\
i\,\frac{d}{dt}\,\underset{\sim}{C}\,|\,\Phi(t)\,\rangle &= \underset{\sim}{H}\underset{\sim}{C}\,|\,\Phi(t)\,\rangle \\
i\,\frac{d}{dt}\;|\,\Phi(t)\,\rangle &= \underset{\sim}{C}^{\dagger}\underset{\sim}{H}\underset{\sim}{C}\,|\,\Phi(t)\,\rangle = \underset{\sim}{H}_{\mathrm{eff}}\,|\,\Phi(t)\,\rangle
\end{aligned}$$

Neben der anschaulichen Funktion des Korrelators $\underset{\sim}{C}$, „Löcher“ in den Versuchszustand zu machen, kann man die Transformation auch als approximatives oder Vordiagonalisieren verstehen.

Problem

Verschiebung:



Globaler Schiebeoperator:

$$\langle \vec{x} \,|\, \mathrm{e}^{-i\vec{s}\cdot\underset{\sim}{\vec{k}}} \,|\, \phi \rangle \quad = \quad \mathrm{e}^{-\vec{s}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{x}}} \,\langle \vec{x} \,|\, \phi \rangle = \langle \vec{x} - \vec{s} \,|\, \phi \rangle$$

$\underset{\sim}{\vec{k}}$ ist ein Einteilchenoperator.

Unitärer Korrelationsoperator:

- Verschiebung in der Relativkoordinate $\vec{x}_{12}$,
  $\underset{\sim}{\vec{k}}_{12}$ ist ein Zweiteilchenoperator!
- Ortsabhängige Verschiebung $\mathrm{e}^{-i\vec{s}(x_{12})\cdot\underset{\sim}{\vec{k}}_{12}}$
- radiale Verschiebung $\mathrm{e}^{-is(x_{12})\underset{\sim}{k}_{12}}$

Ansatz

Hermitescher Generator:

$$\underset{\sim}{C} = \exp\{-i\underset{\sim}{G}\} \quad , \quad \underset{\sim}{G}^\dagger = \underset{\sim}{G}$$

$\underset{\sim}{G}$ ist wenigstens ein Zweiteilchenoperator!

Weyl–Darstellung:

$$\underset{\sim}{G} = \frac{1}{(2\pi)^6} \int \mathrm{d}^3x_1\ \mathrm{d}^3x_2\ \mathrm{d}^3k_1\ \mathrm{d}^3k_2 \int \mathrm{d}^3u_1\ \mathrm{d}^3u_2\ \mathrm{e}^{i\vec{k}_1\cdot\vec{u}_1}\mathrm{e}^{i\vec{k}_2\cdot\vec{u}_2}$$

$$\times O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2)\ \underset{\sim}{\Psi}^\dagger(\vec{x}_1 + \frac{\vec{u}_1}{2})\underset{\sim}{\Psi}^\dagger(\vec{x}_2 + \frac{\vec{u}_2}{2})\underset{\sim}{\Psi}(\vec{x}_2 - \frac{\vec{u}_2}{2})\underset{\sim}{\Psi}(\vec{x}_1 - \frac{\vec{u}_1}{2})$$

Translations–, Rotations– und Galileiinvarianz:

$$O(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{k}_1, \vec{k}_2) = O(\vec{x}_{12}; \vec{k}_{12}) = s(x_{12})\ \frac{\vec{x}_{12}}{x_{12}} \cdot \vec{k}_{12}$$

Ortsdarstellung:

$$\langle\, \vec{x}_1\ \vec{x}_2 \,|\, \underset{\sim}{C} \,|\, \Phi \,\rangle$$

$$= \exp\left\{ -\frac{1}{2}\ \frac{\partial\, s(x_{12})}{\partial\, x_{12}} - \frac{s(x_{12})}{x_{12}} - s(x_{12})\ \frac{\partial}{\partial\, x_{12}} \right\} \langle\, \vec{x}_1\ \vec{x}_2 \,|\, \Phi \,\rangle$$

Der $\underset{\sim}{C}$ bewirkt eine radiale Verschiebung in der Relativkoordinate $\vec{x}_{12} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$, die von der Verschiebefunktion $s(x_{12})$ abhängt.

Wirkungsweise – 1

Korrelierte Zweiteilchenrelativwellenfunktion:

$$\langle\, \vec{x} \,|\, \underset{\sim}{C} \,|\, \phi \,\rangle \;=\; \exp\left\{ -\frac{1}{2}\,\frac{\partial\, s(x)}{\partial\, x} - \frac{s(x)}{x} - s(x)\,\frac{\partial}{\partial\, x} \right\} \langle\, \vec{x} \,|\, \phi \,\rangle$$

$$= \frac{1}{x\sqrt{s(x)}}\, \exp\left\{ -s(x)\frac{\partial}{\partial\, x} \right\} x\sqrt{s(x)}\, \langle\, \vec{x} \,|\, \phi \,\rangle$$

$s(x)\frac{\partial}{\partial\, x} = \frac{\partial}{\partial\, y}$ Definition einer neuen Koordinate $y = Y(x)$, in der um eine Konstante verschoben wird. Koordinatentransformationen:

$$Y(x) = \int^{x} \frac{\mathrm{d}t}{s(t)} \quad , \quad y = \int^{R(y)} \frac{\mathrm{d}t}{s(t)}$$

Korrelierte Wellenfunktion:

$$\langle\, \vec{x} \,|\, \underset{\sim}{C} \,|\, \phi \,\rangle \;=\; \Theta\big(R(Y(x)-1)\big)\, \frac{R(Y(x)-1)}{x} \sqrt{\frac{s(R(Y(x)-1))}{s(x)}}$$

$$\times \langle\, R(Y(x)-1)\frac{\vec{x}}{x} \,|\, \phi \,\rangle$$

$R(Y(x)-1)$: Transformation auf neue Koordinate y, Verschiebung um 1, Rücktransformation auf x.

Wirkungsweise – 2

Kombinierte Hin- und Rücktransformation:

$$R_\pm(x) = R(Y(x) \pm 1) \quad : \quad \int_x^{R_\pm(x)} \frac{\mathrm{d}t}{s(t)} = \pm 1$$

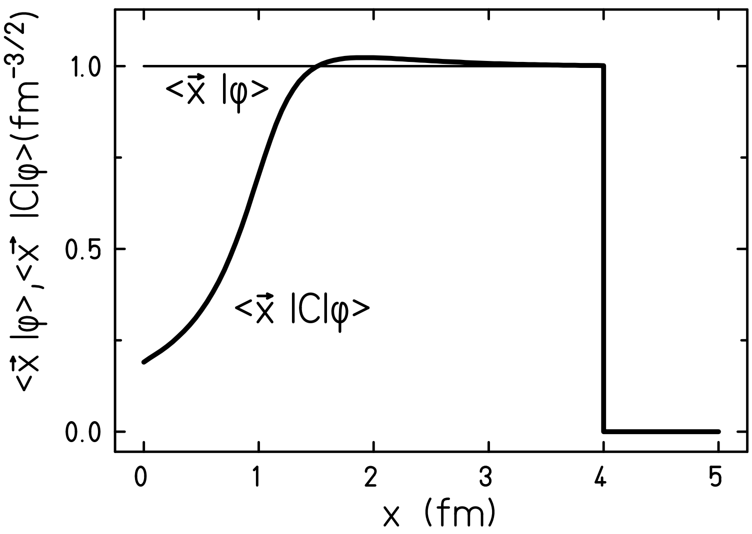
$$R_\pm(R_\mp(r)) = r$$

Korrelierte Relativwellenfunktion:

$$\langle \vec{x} \,|\, \underset{\sim}{C} \,|\, \phi \rangle \quad = \quad \Theta\big(R_-(x)\big) \, \frac{R_-(x)\sqrt{R'_-(x)}}{x} \, \langle R_-(x)\frac{\vec{x}}{x} \,|\, \phi \rangle$$

Beispiel:

$$R_+(r) = r + \alpha \left(\frac{r}{\beta}\right) \mathrm{e}^{-\left(\frac{r}{\beta}\right)}, \;\; \alpha = 1.0\mathrm{fm}, \beta = 0.5\mathrm{fm}$$



Eigenschaften

Anschauliche Bedeutung von $R_\pm$:

$$\begin{aligned} R_\pm(x) &= R(Y(x) \pm 1) = R(Y(x)) \pm R'(Y(x)) + \cdots \\ &= x \pm s(x) + \cdots \end{aligned}$$

Korrelierter lokaler Operator, z.B. Wechselwirkung:

$$\langle\, \psi_1 \,|\, \underset{\sim}{b} \,|\, \psi_2 \,\rangle = \int x^2 \mathrm{d}x \, \mathrm{d}\Omega \;\; \langle\, \psi_1 \,|\, \vec{x} \,\rangle \; b(\vec{x}) \; \langle\, \vec{x} \,|\, \psi_2 \,\rangle$$

$$= \int x^2 \mathrm{d}x \, \mathrm{d}\Omega \;\; \langle\, \phi_1 \,|\, \underset{\sim}{C}^\dagger \,|\, \vec{x} \,\rangle \; b(\vec{x}) \; \langle\, \vec{x} \,|\, \underset{\sim}{C} \,|\, \phi_2 \,\rangle$$

$$= \int x^2 \mathrm{d}x \, \mathrm{d}\Omega \;\; \left(\frac{R_-(x)}{x} \right)^2 R'_-(x)$$

$$\langle\, \psi_1 \,|\, R_-(x) \frac{\vec{x}}{x} \,\rangle \; b(\vec{x}) \; \langle\, R_-(x) \frac{\vec{x}}{x} \,|\, \psi_2 \,\rangle$$

$$= \int x_-^2 \mathrm{d}x_- \mathrm{d}\Omega_- \;\; \langle\, \psi_1 \,|\, \vec{x}_- \,\rangle \; b\left(R_+(x_-) \frac{\vec{x}_-}{x_-} \right) \; \langle\, \vec{x}_- \,|\, \psi_2 \,\rangle$$

$$= \int x^2 \mathrm{d}x \mathrm{d}\Omega \;\; \langle\, \psi_1 \,|\, \vec{x} \,\rangle \; b\left(R_+(x) \frac{\vec{x}}{x} \right) \; \langle\, \vec{x} \,|\, \psi_2 \,\rangle$$

Clusterentwicklung

Erwartungswert eines beliebigen Operators $\underset{\sim}{O}$:

$$\langle \Psi \,|\, \underset{\sim}{O} \,|\, \Psi \rangle = \langle \Phi \,|\, \underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{O}\, \underset{\sim}{C} \,|\, \Phi \rangle$$

$\underset{\sim}{C}$ enthält Operatoren zu alles Teilchenzahlen. $\underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{O}\, \underset{\sim}{C}$ kann nach diesen Teilchenzahlen geordnet werden.

Clusterentwicklung von $\underset{\sim}{O}_{\text{eff}} = \underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{O}\, \underset{\sim}{C}$:

$$\underset{\sim}{O}_{\text{eff}} = \sum_{n=0}^{\infty} \underset{\sim}{O}_{\text{eff}}^{(n)}$$

$$\underset{\sim}{O}_{\text{eff}}^{(n)} = \frac{1}{n!} \sum_{k_1,\dots,k_n} \sum_{l_1,\dots,l_n} \langle k_1 \cdots k_n \,|\, \underset{\sim}{O}_{\text{eff}} - \sum_{m=0}^{n-1} \underset{\sim}{O}_{\text{eff}}^{(m)} \,|\, l_1 \cdots l_n \rangle \times \underset{\sim}{a}_{k_1}^\dagger \cdots \underset{\sim}{a}_{k_n}^\dagger \underset{\sim}{a}_{l_n} \cdots \underset{\sim}{a}_{l_1}$$

$$\Rightarrow \quad \langle \Psi \,|\, \underset{\sim}{O} \,|\, \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{A} \mathrm{Tr}\left(\underset{\sim}{O}_{\text{eff}}^{(n)} \underset{\sim}{\rho}_0^{(n)} \right)$$

Zweiteilchennäherung ($n = 0, 1, 2$):

$$\langle \underset{\sim}{T} \rangle = \sum_{n=0}^{2} \mathrm{Tr}\left(\underset{\sim}{T}_{\text{eff}}^{(n)} \underset{\sim}{\rho}_0^{(n)} \right) = \mathrm{Tr}\left(\underset{\sim}{T}\, \underset{\sim}{\rho}_0^{(1)} \right) + \mathrm{Tr}\left(\left\{ \underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{T} \underset{\sim}{C} - \underset{\sim}{T} \right\} \underset{\sim}{\rho}_0^{(2)} \right)$$

$$\langle \underset{\sim}{V} \rangle = \sum_{n=0}^{2} \mathrm{Tr}\left(\underset{\sim}{V}_{\text{eff}}^{(n)} \underset{\sim}{\rho}_0^{(n)} \right) = \mathrm{Tr}\left(\underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{V}\, \underset{\sim}{C}\, \underset{\sim}{\rho}_0^{(2)} \right) = \mathrm{Tr}\left(\underset{\sim}{V}\, \underset{\sim}{C}\, \underset{\sim}{\rho}_0^{(2)} \underset{\sim}{C}^\dagger \right)$$

Zweiteilchennäherung

Ein- und Zweiteilchenanteil des korrelierten Hamiltonoperators:

$$
\begin{aligned}
&\left(\underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{H}\underset{\sim}{C}\right)^{[1]} + \left(\underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{H}\underset{\sim}{C}\right)^{[2]} \\
= \quad & \sum_{i}^{A} \underset{\sim}{t}(i) + \sum_{i<j}^{A} \left[\underset{\sim}{k}^\dagger_{r\,ij} \, \frac{1}{2\mu_r(x_{ij})} \, \underset{\sim}{k}_{r\,ij} + \frac{1}{2\mu(r_{ij}) x_{ij}^2} \, \underset{\sim}{\vec{l}}\,^2_{ij} \right] \\
& + \sum_{i<j}^{A} \left[\underset{\sim}{u}^{[2]}(i,j) + \left(\underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{V}\underset{\sim}{C}\right)^{[2]}(i,j) \right]
\end{aligned}
$$

Reduzierte Massen:

$$
\begin{aligned}
\mu_r(x) &= \frac{m}{2} \left[\frac{1}{(R'_+(x))^2} - 1 \right]^{-1} \\
\mu(x) &= \frac{m}{2} \left[\frac{x^2}{(R_+(x))^2} - 1 \right]^{-1}
\end{aligned}
$$

Lokaler Teil von $\left(\underset{\sim}{C}^\dagger \underset{\sim}{T}\underset{\sim}{C}\right)^{[2]}$**:**

$$
\underset{\sim}{u}^{[2]}(i,j) =
$$

$$
\frac{1/m}{(R'_+(x_{ij}))^2} \left\{ 2 \frac{R''_+(x_{ij})}{x_{ij} R'_+(x_{ij})} - \frac{5}{4} \left(\frac{R''_+(x_{ij})}{R'_+(x_{ij})} \right)^2 + \frac{1}{2} \, \frac{R'''_+(x_{ij})}{R'_+(x_{ij})} \right\}
$$

Wahl des Korrelators

Ritz:

$$| \Psi \rangle = \underset{\sim}{C}(\alpha, \beta, \gamma, \dots) \ | \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_A \rangle$$

Der korrelierte Versuchszustand enthält im Vergleich zum unkorrelierten im Sinne des Ritzschen Variationsverfahrens zusätzliche Freiheitsgrade, diese sind im Produktzustand nicht verfügbar. Der beste Korrelator ergibt sich durch Minimieren der Energie.
Problem: rein abstoßende Potentiale.

Weitere Möglichkeiten:

- Anpassung am Zweiteilchensystem (Deuteron)
- Anpassung an den klassischen Umkehrpunkt
- Forderung nach Kurzreichweitigkeit

Energieminimierung
Beispiel ^{4}He

Lokale Zweiteilchenwechselwirkung:

$$\frac{V(x)}{\text{MeV}} = -10.5\frac{e^{-\mu x}}{\mu x} + 105.5\frac{e^{-2\mu x}}{\mu x} - 3187.8\frac{e^{-4\mu x}}{\mu x} + 9924.3\frac{e^{-6\mu x}}{\mu x}$$

$$-98.0\exp\left\{-\frac{x^2}{(1.4\text{fm})^2}\right\} \quad , \quad \text{with} \quad \mu = 0.7\text{fm}^{-1}$$

Ansatz für die Transformation:

$$R_+(r) = r + \alpha\left(\frac{r}{\beta}\right)^{\frac{1}{3}} \exp\left\{-\frac{r}{\beta}\right\}$$

Energieminimum für ^{4}He:

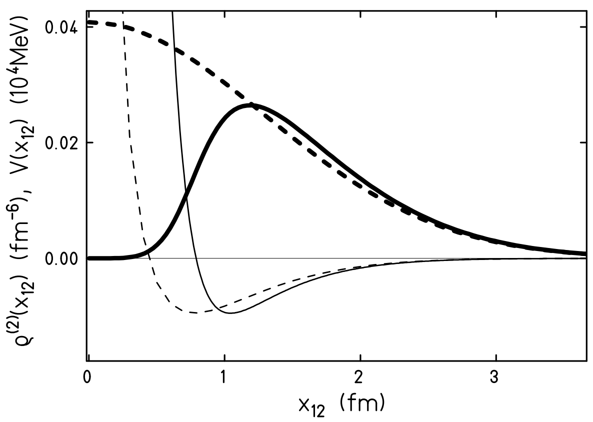
$$\mathcal{H}(\alpha,\beta,a) = \langle\,\Phi\,|\,\underset{\sim}{C}^\dagger(\alpha,\beta)\,\underset{\sim}{H}\,\underset{\sim}{C}(\alpha,\beta)\,|\,\Phi\,\rangle$$

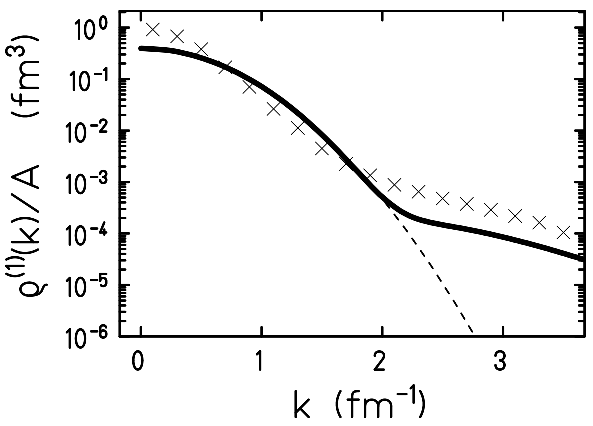
$$= \sum_k^A \langle\,\phi_k\,|\,\underset{\sim}{T}\,|\,\phi_k\,\rangle\mathcal{O}_{kk} + \frac{1}{2}\sum_{k\neq l}\langle\,\phi_k,\phi_l\,|\,\left(\underset{\sim}{C}^\dagger\underset{\sim}{T}\,\underset{\sim}{C} - \underset{\sim}{T}\right)\,|\,\phi_k,\phi_l\,\rangle\mathcal{O}_{kk}\mathcal{O}_{ll}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{k\neq l}\langle\,\phi_k,\phi_l\,|\,\underset{\sim}{C}^\dagger\underset{\sim}{V}\,\underset{\sim}{C}\,|\,\phi_k,\phi_l\,\rangle\mathcal{O}_{kk}\mathcal{O}_{ll}$$

$$\mathcal{H}(\alpha = 0.76\text{fm}, \beta = 0.73\text{fm}, a = 1.69\text{fm}^2) = -28.5\ \text{MeV}$$

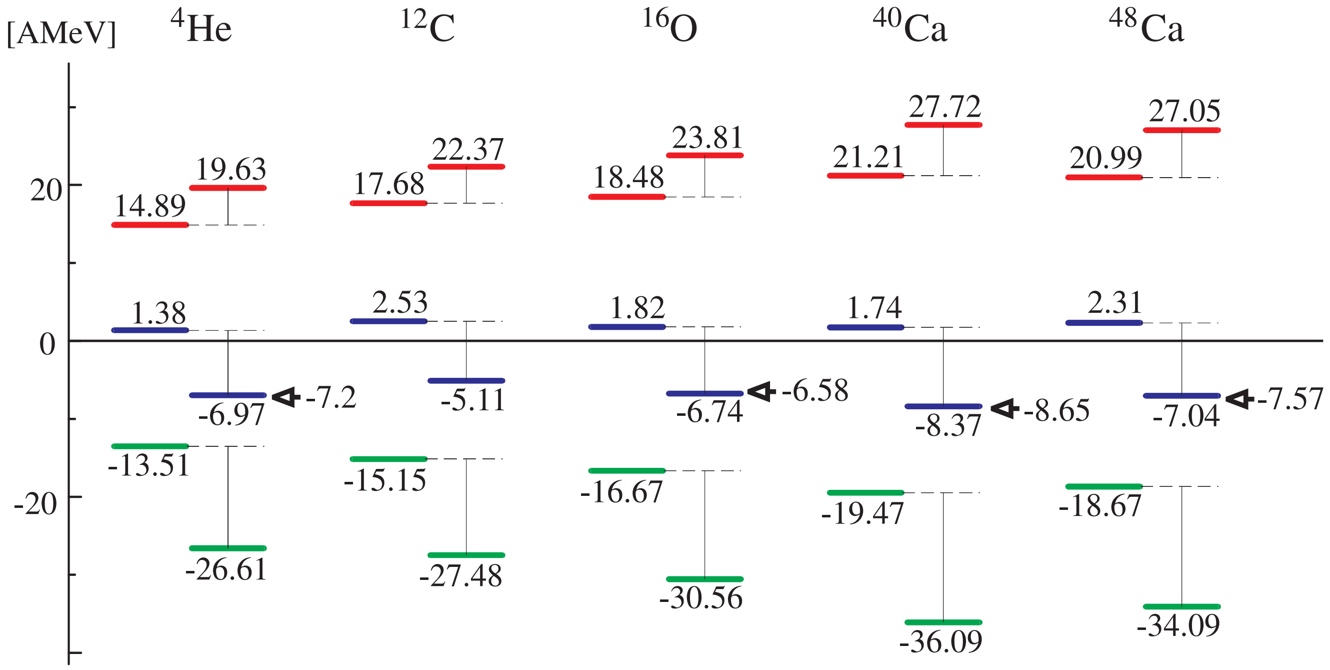
Densities:





Ergebnisse

Modellwechselwirkung von Afnan und Tang:



Unkorrelierte und korrelierte kinetische, potentielle und Gesamtenergie für das modifizierte Afnan-Tang-S3-Potential. Die Pfeile geben die als exakt anzusehenden Resultate wieder: Yakubovski für ^{4}He, FHNC Für ^{16}O und CBF für ^{40,48}Ca.

Zusammenfassung

Methode der unitären Korrelatoren (UCOM):

- unitäre Abbildung des Produktzustandes auf einen korrelierten Zustand — approximatives Diagonalisieren,
- zusätzliche Variationsfreiheitsgrade im Ritzschen Variationsverfahren,
- Verwendung realistischer Potentiale möglich,
- Bindung und Sättigung(!),
- Problem: Zweiteichennäherung nur für kurzreichweitige Korrelationsfunktionen geeignet (Korrelationsvolumen).