

Das simulierte Dutzend

Monte-Carlo-Methoden erlauben es, den für die Entstehung von Kohlenstoff-12 entscheidenden Hoyle-Zustand ab initio zu berechnen.

Beobachtungen der Elementhäufigkeiten im Universum haben gezeigt, dass im Innern von Sternen offenbar durch Fusionsprozesse mehr Kohlenstoff entsteht, als bei den herrschenden Temperaturen zu erwarten wäre. Als Erklärung schlug Fred Hoyle 1954 vor, dass die Kohlenstoffsynthese in Sternen über einen resonanten Tunnelprozess durch die Coulomb-Barriere verlaufen müsse [1]. Ohne diesen Prozess würde in Sternen nur sehr viel langsamer ^{12}C entstehen, und auf Kohlenstoff basierende Lebensformen hätten sich noch längst nicht entwickelt. Der Tunnelprozess läuft über den Hoyle-Zustand ab, eine Tripel- α -Resonanz: Da der ^8Be -Kern instabil ist, müssen drei α -Teilchen (^4He -Kerne) quasi gleichzeitig zu einem angeregten Zustand von Kohlenstoff fusionieren, der 0,38 MeV oberhalb der Schwelle des α -Zerfalls von ^{12}C liegt. Deshalb zerplatzt das Konglomerat meist wieder, kann aber auch unter Aussendung von Photonen in den gebundenen Grundzustand des Kohlenstoffs ^{12}C übergehen (Abb. 1). Experimentell wurde die Resonanz an der von Hoyle vorhergesagten Energie bei etwa 7,65 MeV oberhalb des ^{12}C -Grundzustands im Kontinuum gefunden [2, 3]. Der Hoyle-Zustand löste damit ein großes Problem der Astrophysik, da er die ^{12}C -Häufigkeit und damit die Grundlage für alles Leben erklärt.



Die „numerischen Kosten“ zur Berechnung des Hoyle-Zustandes auf JUGENE am Forschungszentrum Jülich belaufen sich auf etwa vier Millionen CPU-Stun-

den. Dabei kamen 2048 Prozessoren zum Einsatz, und die Gitterkonfigurationen verschlangen vier Terabyte an Speicherplatz.

Mehr als 50 Jahre nach Hoyles Vorhersage und ihrer experimentellen Bestätigung haben nun Physiker aus Bochum, Bonn und den USA die Tripel- α -Resonanz *ab initio* berechnet [4]. „Ab initio“ bezieht sich hierbei auf ein Vorgehen, welches die im Atomkern ^{12}C wirkenden Zwei- und Dreiteilchenkräfte im Zwei-, Drei- und Vierteilchenproblem bestimmt und das resultierende quantenmechanische Zwölftelchenproblem ohne weitere vereinfachende Annahmen und ohne Bezug auf ein bestimmtes Modell des Atomkerns numerisch löst. Evgeny Epelbaum, Hermann Krebs, Dean Lee und Ulf-G. Meißner entwickelten zu diesem Zweck

eine effektive Theorie der Kernkräfte auf dem Gitter und berechneten Grundzustände und angeregte Zustände leichter Atomkerne mittels der Monte-Carlo-Methode auf dem Jülicher Supercomputer JUGENE.

Die Berechnung der Hoyle-Resonanz ist besonders herausfordernd, da es sich hierbei um einen Kontinuumszustand handelt – d. h. er ist räumlich ausgedehnt und ungebunden –, der denselben Spin und dieselbe Parität wie der Grundzustand besitzt: 0^+ (Abb. 1).¹⁾ Eine wesentliche Bedeutung der neuen Rechnung besteht in dem Nachweis, dass sich selbst komplizierte und entsprechend empfindliche Zustände in Atomkernen modellunabhängig und mit guter Genauigkeit *ab initio* berechnen lassen. Dies stärkt in besonderem Maße das Vertrauen in die zugrunde liegende effektive Feldtheorie, die präzise Beherrschung der resultierenden Kernkräfte und die Effizienz der benutzten numerischen Methode. Die Berechnung des Hoyle-Zustands ist somit ein Meilenstein auf dem langen und erfolgreichen Weg der *ab initio*-Berechnungen von Atomkernen.

Die früheren Pionierleistungen hatten bereits eindrucksvoll gezeigt, dass sich leichte Atomkerne aus-

1) Das für Fermionen benötigte Vorzeichenproblem bei den Quanten-Monte-Carlo-Simulationen lässt sich wegen einer annähernden $SU(4)$ -Symmetrie im Atomkern ^{12}C weitgehend vermeiden.

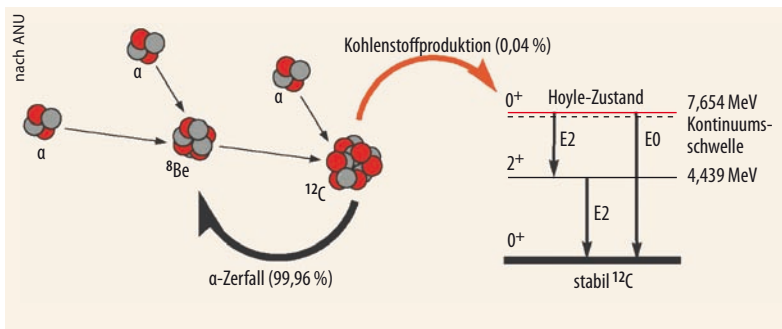


Abb. 1 Da Beryllium-8 instabil ist, muss der Kern nach der Fusion zweier α -Teilchen im Zentrum der Sonne innerhalb der Halbwertszeit von nur $6,7 \times 10^{-17}$ Sekunden ein weiteres α -Teilchen

fangen. Die so gebildete Hoyle-Resonanz des Kohlenstoff-12 geht dann zu einem geringen Prozentsatz in den Kohlenstoff-Grundzustand über, meist zerfällt sie jedoch wieder.

gehend von Protonen, Neutronen und den zwischen ihnen wirkenden Zwei- und Dreiteilchenkräften sehr genau berechnen lassen [5]. Inzwischen ist dieses Programm unter anderem auf Reaktionen leichter Kerne, mittelschwere Atomkerne und exotische Zustände in kurzlebigen Isotopen ausgedehnt worden. *Ab initio*-Rechnungen tragen somit wesentlich zu unserem Verständnis der Kernkräfte bei und bilden die unterste Sprosse auf der Leiter zu einer systematischen und modellunabhängigen Theorie der Atomkerne [6].

Eine robuste und genaue Theorie ist besonders wichtig zum Verständnis kurzlebiger und exotischer Isotope. Diese Atomkerne zeichnen

sich durch ein ungewöhnliches Verhältnis von Protonen- und Neutronenzahl aus, und in ihnen kommen Aspekte der starken Wechselwirkung zum Vorschein, die uns aus stabilen Kernen nur wenig bekannt sind. Ein qualitativ und quantitativ verbessertes Verständnis der Atomkerne ist notwendig, um fundamentale Fragen zu beantworten: Wie viele Neutronen kann ein Isotop höchstens besitzen? (Grenzen der nuklearen Bindung), Wie sind die Elemente zwischen Eisen und Uran entstanden? (Ursprung der auf der Erde vorhandenen chemischen Elemente), Was ist das Ende massereicher Sterne? Die existierenden und zukünftigen Anlagen zur experimentellen Erforschung

der Struktur exotischer Kerne in Europa, Japan, Kanada und den Vereinigten Staaten tragen – im Zusammenspiel mit der Theorie – zur Beantwortung dieser Fragen Wesentliches bei.

Thomas Papenbrock

Prof. Dr. Thomas Papenbrock, Department of Physics and Astronomy, University of Tennessee, and Physics Division, Oak Ridge National Laboratory, USA

- [1] F. Hoyle, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **1**, 121 (1954)
- [2] D. N. F. Dunbar, R. E. Pixley, W. A. Wenzel und W. Whaling, *Phys. Rev.* **92**, 649 (1953)
- [3] C. W. Cook, W. A. Fowler, C. C. Lauritsen und T. Lauritsen, *Phys. Rev.* **107**, 508 (1957)
- [4] E. Epelbaum, H. Krebs, D. Lee und U.-G. Meißner, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 192501 (2011)
- [5] S. C. Pieper und R. B. Wiringa, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **51**, 53 (2001)
- [6] G. F. Bertsch, D. J. Dean und W. Nazarewicz, *SciDAC Review* **6**, 48 (2007)

■ Simulierter Übergang

Erstmals ließ sich ein Quanten-Spin-System mit atomarer Auflösung in einem System ultrakalter Atome simulieren.

Die Rechenkapazität konventioneller Computer verhindert ein tieferes Verständnis der Quantendynamik durch numerische Simulationen. So gelang es zwar kürzlich mit einem der zehn leistungstärksten Supercomputer (JUGENE in Jülich), ein Quantensystem mit 42 Quanten-Bits, äquivalent zu 42 Spin-1/2-Teilchen, zu simulieren. Das Hinzufügen jedes weiteren Teilchens würde die ohnehin beeindruckende erforderliche Rechenleistung aber verdoppeln. 1982 schlug Richard Feynman als Ausweg aus diesem Dilemma vor, ein zweites, präzise kontrollierbares Quantensystem zu nutzen, um damit das interessierende System zu simulieren und zu untersuchen. Das Ziel solcher Quantensimulationen ist es nicht, das zu untersuchende System vollständig abzubilden. Vielmehr soll untersucht werden, ob sich bestimmte beobachtbare Phänomene bereits mit vereinfachten Modellen erklären lassen. Damit hofft man, ein tiefer gehendes Verständnis für die wichtigen Zusammenhänge zu gewinnen.

Um sich als Quantensimulator zu eignen, muss ein System drei

Anforderungen erfüllen:

- Sein Anfangszustand muss sich exakt einstellen lassen.
- Die relevanten Parameter müssen präzise manipulierbar sein.
- Die wichtigen Charakteristika des Endzustands müssen sich effizient analysieren lassen.

Für die Simulation von Quanten-Spin-Systemen bieten sich insbesondere Ionen in Paul-Fallen [1], Josephson-Kontakte [2] oder ultrakalte Atome in optischen Gittern an. Mit letzteren gelang es nun der Gruppe von Markus Greiner an der Harvard Universität, das sog. Quanten-Ising-Modell in einer Dimension mit atomarer Auflösung zu simulieren [3]. Das Modell beschreibt eine Kette von Spin-1/2-Teilchen, die der Wechselwirkung mit einem transversalen Magnetfeld B sowie der Spin-Spin-Wechselwirkung J mit ihren Nachbarn unterliegen. Bei einer sehr großen Anzahl von Spins (thermodynamischer Grenzfall) tritt beim Durchstimmen des Ordnungsparameters J/B ein Quantenphasenübergang zwischen der para- und der ferromagnetischen Ordnung auf. Die Forscher beobachteten diesen Übergang an

sechs Atomen (Abb. 1). Für die Analyse des Zustands haben sie, und unabhängig davon eine Gruppe am MPI für Quantenoptik, ein Mikroskop entwickelt, mit dem sich die optischen Kristalle mit atomarer Auflösung untersuchen [4] und individuell adressieren lassen [5].

Um das System zu initialisieren, erzeugen die Wissenschaftler aus Harvard ein zweidimensionales optisches Gitter, in dem jeder Gitterplatz genau mit einem Atom besetzt ist. Hierfür generieren sie zunächst ein Bose-Einstein-Kondensat aus Rubidium-87-Atomen [6] und laden das Quantengas anschließend in das optische Gitter um. In diesem superfluiden Zustand ist jedes Atom über das gesamte Gitter delokalisiert. Die Intensität der Laserstrahlen, die das optische Gitter formen, ist so gewählt, dass die Atome lediglich entlang einer Dimension tunneln können. Wird der Einschluss entlang dieser Dimension erhöht und damit das Tunneln sukzessive unterbunden, entwickelt sich das System zu einem Mott-Isolator [6]. Bei diesem ist jeder Gitterplatz genau einmal besetzt, da das System so die zu-