Nova generacija relativističkih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće

Novak, Igor

Master's thesis / Diplomski rad

2016

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:688727

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2025-03-24**

Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Igor Novak

NOVA GENERACIJA RELATIVISTIČKIH NUKLEARNIH ENERGIJSKIH FUNKCIONALA GUSTOĆE

Diplomski rad

Zagreb, 2016.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: ISTRAŽIVAČKI SMJER FIZIKE

Igor Novak

Diplomski rad

Nova generacija relativističkih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće

Voditelj diplomskog rada: izv. prof. dr. sc. Tamara Nikšić

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2016.

Zahvaljujem mentorici izv. prof. dr. sc. Tamari Nikšić na ukazanoj prilici za istraživačkim radom, povjerenju, strpljenju i podršci tijekom studija i u izradi ovog rada.
Zahvaljujem doc. dr. sc. Ivici Smoliću i izv. prof. dr. sc. Krešimiru Kumeričkom na savjetima i potpori, kao i svim mojim profesorima. Zahvaljujem obitelji, roditeljima osobito, na bezuvjetnoj potpori na svakom koraku i ljubavi, prijateljima i kolegama na svim lijepim trenucima koje smo proveli zajedno.

Sažetak

U ovom radu razvijamo novi nuklearni relativistički energijski funkcional gustoće. Relativistički energijski funkcionali gustoće su standardni alat u računima nuklearne strukture i daju sveobuhvatan opis nuklearnih osnovnih stanja i kolektivnih pobuđenja. Predloženi funkcional spada u klasu funkcionala s točkastim vezanjem, kod kojih se lagranžijan formulira preko nukleonskih polja i uključuje samo kontaktna vezanja između struja bilinearnih u Diracovom spinornom polju nukleona. Na temelju ovisnosti mikroskopskih nukleonskih vlastitih energija o gustoći u nuklearnoj materiji konstruirana je fenomenološka pretpostavka kako izgleda ovisnost funkcionala vezanja o gustoći. Na model je potom primjenjena optimizacijska shema koja se sastoji od minimizacije odgovarajuće χ^2 kaznene funkcije koristeći svojstva beskonačne nuklearne materije i konačnih jezgara. Nakon minimizacije provedena je i analiza kovarijanci koja uključuje procjene nepouzdanosti i koeficijenata korelacije. Optimizirani funkcional testiran je na nizu ilustrativnih računa svojstava osnovnih stanja sfernih i deformiranih jezgara kao što su energije vezanja, nabojni radijusi i parametri kvadrupolne deformacije. Dobivena teorijska predviđanja uspoređena su s dostupnim eksperimentalnim podacima i predviđanjima srodnog funkcionala iz klase točkastih vezanja, DD-PC1.

New generation of relativistic nuclear energy density functionals

Abstract

In this work we construct a new relativistic nuclear energy density functional. Relativistic energy density functionals are a standard tool for nuclear structure calculations, providing a comprehensive description of nuclear ground states and collective excitations. The proposed functional belongs to a class of point-coupling functionals where a Lagrangian is formulated in terms of nucleon fields and includes only contact couplings between currents bilinear in the Dirac spinor field of the nucleon. Guided by the density dependence of microscopic nucleon self-energies in nuclear matter, a phenomenological ansatz for the density-dependent coupling functionals was constructed. An optimization scheme by minimizing a suitably constructed χ^2 penalty function using properties of infinite nuclear matter and finite nuclei was implemented. After the minimization, a covariance analysis that included uncertainty estimates and correlation coefficients was made. The optimized functional was tested in a series of illustrative calculations of ground-state properties of spherical and deformed nuclei, including binding energies, charge radii and quadrupole deformation parameters. Theoretical predictions were compared to the available experimental data, as well as with the predictions of a similar point-coupling functional DD-PC1.

Sadržaj

1 Uvod **1**

2 Teorijski temelji **4**
2.1 Procjene pogrešaka 4
2.1.1 Procjena statističkih pogrešaka 5
2.1.2 Procjena sistematskih pogrešaka 11
2.2 Teorija srednjeg polja 12
2.2.1 Osnovna svojstva beskonačne nuklearne materije 13
2.2.2 Relativistički modeli srednjeg polja 17
2.2.3 *Point-coupling* modeli 19
2.3 Relativistički Hartree-Bogoliubov model 20

3 Prilagodba parametara **22**

4 Ilustrativni računi **29**

5 Moguće poboljšanje modela - kinetički član **35**

6 Zaključak **37**

Dodaci **39**

A Veza parametara funkcionala s beskonačnom nuklearnom materijom **39**
A.1 Vezanja u izoskalarnom kanalu 40
A.2 Vezanja u izovektorskom kanalu 41

B Razvoj u bazi harmoničkog oscilatora **43**
B.1 Slučaj sferne simetrije 43
B.2 Slučaj aksijalnosimetrične kvadrupolne deformacije 44

C Numerička implementacija optimizacije **46**

1 Uvod

Nuklearni energijski funkcionali gustoće (engl. *energy density functional*; EDF) trenutno predstavljaju najpotpuniji i najtočniji opis svojstava osnovnog stanja, kao i kolektivnih pobuđenja, jezgara diljem cijele karte nuklida. Od mikroskopskih pristupa nuklearnom problemu mnoštva čestica, vjerojatno niti jedna druga metoda ne postiže usporedivu točnost uz iste računske zahtjeve. To je ujedno i jedina metoda koja može opisati evoluciju strukturnih fenomena od relativno laganih sustava do superteških jezgara, te od doline β-stabilnosti do *drip-linea* [1, 2].

U praktičnim implementacijama, EDF pristup se ostvaruje na dvije razine. Osnovna implementacija se ostvaruje u samosuglasnim modelima srednjeg polja (engl. *self-consistent mean-field*; SCMF), u kojima je EDF izgrađen kao funkcional jednočestičnih nukleonskih matrica gustoće koje odgovaraju Slaterovoj determinanti jednočestičnih ili jednokvazičestičnih stanja. SCMF pristup nuklearnoj strukturi je analogan Kohn-Shamovoj teoriji funkcionala gustoće (engl. *density functional theory*; DFT) [3, 4]. DFT omogućava opis kvantnog sustava mnoštva čestica preko univerzalnog energijskog funkcionala gustoće. On je univerzalan u smislu da, za danu međučestičnu interakciju, ima isti funkcionalni oblik za sve sustave. Nuklearni SCMF modeli efektivno preslikavaju problem mnoštva čestica u jednočestični problem. Egzaktni EDF se aproksimira funkcionalima potencija i gradijenata gustoća i struja nukleona u osnovnom stanju, koji predstavljaju raspodjele materije, spina, impulsa i kinetičke energije. Nuklearni EDF, u principu, može u sebi sadržavati korelacije kratkog dosega koje su vezane za odbojnu jezgru međunukleonskih interakcija, kao i korelacije dugog dosega koje prenose nuklearni rezonancijski modovi. Jedan od velikih izazova u nuklearnom EDF pristupu je izgradnja u potpunosti mikroskopskih temelja za univerzalni funkcional gustoće. Pošto uključuje korelacije, samosuglasni Kohn-Sham pristup ide izvan dosega Hartree-Fockove aproksimacije. Korisnost ovog pristupa je, međutim, ovisna o konstrukciji točnih aproksimacija najvažnijeg dijela funkcionala - univerzalnog funkcionala korelacije izmjene [5]. U *ab initio* pristupu mogli bismo krenuti od hamiltonijana koji opisuje raspršenje dva nukleona i više čestica i opservable u vezanom stanju ili možemo koristiti efektivnu teoriju polja niskoenergijskih nukleon-nukleon interakcija u mediju, kako bismo aproksimirali egzaktni funkcional korelacije izmjene [6, 7]. Čak i ako bi se uspio razviti u potpunosti mikroskopski EDF, parametri takvog funkcionala bi se i dalje morali prilagoditi eksperimentalnim podacima. To je tako jer podaci za nukleon-nukleon raspršenje i sustave od malo nukleona ili za svojstva beskonačne nuklearne materije ne mogu odrediti funkcional gustoće do tražene točnosti za kvantitativni opis srednje teških i teških jezgara.

Važna klasa modela nuklearne strukture su relativistički energijski funkcionali gustoće. Nekoliko vrlo uspješnih relativističkih modela srednjeg polja (RMF) su izgrađeni na temeljima kvantne hadrodinamike (QHD). Postoje važne prednosti u korištenju kovarijantnih funkcionala [8]. Najočitija je prirodno uključenje spinskih

stupnjeva slobode nukleona i nuklearnog spin-orbit potencijala koji automatski izvire s empirijskom snagom u kovarijantnoj formulaciji. Empirijska pseudospinska simetrija u nuklearnoj spektroskopiji ima prirodno objašnjenje u relativističkim modelima srednjeg polja [9].

Relativistički modeli srednjeg polja su vrlo uspješni u analizama širokog spektra fenomena nuklearne strukture, ne samo u jezgrama duž doline β-stabilnosti, već i u egzotičnim jezgrama s ekstremnim izospinskim vrijednostima i u blizini *drip linea*. Primjene su dosegle razinu točnosti usporedivu s nerelativističkim Hartree-Fock-Bogoliubov pristupom koji se temelji na *Skyrme* funkcionalima ili Gogny efektivnim interakcijama [2, 10–12]. Relativistički energijski funkcionali gustoće se većinom primjenjuju u opisu svojstava osnovnog stanja i energija pobuđenja gigantskih rezonancija na razini samosuglasnog srednjeg polja. Pritom se uzimaju u obzir korelacije sparivanja u jezgrama otvorenih ljusaka unutar okvira Hartree-Fock-Bogoliubovljevog pristupa i izvode (Q)RPA računi malih amplituda kolektivnog gibanja.

Atomske jezgre, beskonačna nuklearna materija, neutronske zvijezde su složeni sustavi mnoštva čestica kojima vlada jaka nuklearna sila. Iako je kvantna kromodinamika (QCD) fundamentalna teorija jake interakcije, mnoštvo izazova sprječava rješenje teorije u neperturbativnom režimu koji je od važnosti za nuklearne sustave. Do danas se ovi složeni sustavi mogu istraživati samo u okviru efektivne teorije s odgovarajućim stupnjevima slobode. Od efektivnih pristupa najučinkovitijim se pokazala teorija funkcionala gustoće (engl. *density functional theory*; DFT) jer je to jedini mikroskopski pristup koji je primjenjiv na cjelokupni nuklearni krajolik i neutronske zvijezde. Posljednjih nekoliko desetljeća predloženi su brojni nuklearni funkcionali gustoće. Mogu se podijeliti u dvije osnovne skupine: nerelativistički i relativistički. Funkcionali kao npr. *Skyrme* su najpopularniji u nerelativističkom pristupu, gdje nukleoni međudjeluju preko efektivnih potencijala ovisnih o gustoći. S druge strane su relativistički modeli srednjeg polja (RMF), temeljeni na kvantnoj teoriji polja, u kojima nukleoni međudjeluju preko izmjene različitih mezona. Oni se uspješno koriste on 1970-ih godina i pružaju kovarijantan opis beskonačne nuklearne materije i konačnih jezgara [13–18]. Kako se radi o efektivnim teorijama, nerelativistički i relativistički energijski funkcionali gustoće se kalibriraju pomoću eksperimentalnih nuklearnih podataka pod normalnim laboratorijskim uvjetima, tj. nešto ispod točke saturacije i s malim do osrednjim izospinskim asimetrijama [19]. Manjak eksperimentalnih podataka na višim gustoćama i ekstremnim izospinskim asimetrijama ima za posljedicu veliki raspon u predviđanjima modela, čak i kada se kalibriraju istim eksperimentalnim podacima. Zbog tog razloga fundamentalna nuklearna svojstva, poput neutronske gustoće srednje teških i teških jezgara [20–23], protonski i neutronski *drip line* [24, 25] te mnoga svojstva neutronskih zvijezda [26–28] i dalje nisu određena.

Standardna je praksa da se uz eksperimentalne rezultate daju i procjene pogrešaka. Eksperimentalna mjerenja se objavljuju uz pravilno određene stupce po-

greške. Teorijska predviđanja, međutim, često uključuju samo "centralnu vrijednost" bez informacija o nepouzdanostima svojstvenima procesu izračuna. Često takav pristup nije koristan, recimo u ekstrapolacijama efektivnih teorija, važnih u nuklearnoj teoriji, u nepoznata područja. Zato su procjene teorijskih pogrešaka važne u procjeni pouzdanosti ekstrapolacija. Ako su teorijske pogreške velike, tada se može provesti analiza korelacija kako bi se otkrile opservable koje mogu pomoći u smanjenju iznosa nepouzdanosti. Posljednjih godina se naglašava važnost uključivanja procjena nepouzdanosti u člancima koji uključuju teorijske izračune fizikalnih veličina.

U ovom radu bit će prikazana konstrukcija jednog relativističkog nuklearnog energijskog funkcionala *point-coupling* tipa. Isti funkcional će biti podvrgnut statističkoj analizi i optimizacijskom postupku, opisanom u [29], koristeći dostupne eksperimentalne podatke za nuklearnu materiju i širok raspon jezgara.

Rad je organiziran na sljedeći način: u prvom dijelu ovog rada dani su teorijski temelji relativističke teorije srednjeg polja i prikazana je konstrukcija novog relativističkog nuklearnog energijskog funkcionala gustoće. U istom dijelu obrađeni su i statistički alati uz pomoć kojih je, kasnije, testiran novi funkcional - koncepti kaznene funkcije χ^2, funkcije vjerodostojnosti, gaussijanska aproksimacije, hessijanska matrica i matrica kovarijanci. Ti statistički alati nam pomažu dati procjenu teorijskih grešaka predloženog modela. Nakon toga vršimo prilagodbu parametara funkcionala gustoće i statističku analizu na primjeru simetrične beskonačne nuklearne materije. Potom je funkcional testiran na nizu ilustrativnih računa energija vezanja, deformacija jezgara i nabojnih radijusa. Pritom su dobivena teorijska predviđanja uspoređena s dostupnim eksperimentalnim podacima i rezultatima još jednog, srodnog, funkcionala gustoće DD-PC1 [30]. Na kraju dajemo pregled mogućih korekcija funkcionala u vidu kinetičkog člana koji bi se ubacio u početni lagranžijan modela.

2 Teorijski temelji

2.1 Procjene pogrešaka

Ne postoji općeniti recept kako pripisati teoriji stupac pogreške. Nepouzdanosti modela izviru iz raznih izvora, neke iz eksperimentalnih pogrešaka, neke iz manjkavosti samih modela.

Statističke pogreške modela se obično mogu kvantificirati za mnoge modele. Ako se model temelji na parametrima koji se prilagođavaju velikoj količini podataka, kvaliteta prilagodbe je indikator statističke nepouzdanosti predviđanja modela. Najčešći alat koji se primjenjuje za procjenu statističkih pogrešaka je regresijska analiza.

Sistematske pogreške modela nastaju zbog nesavršenog modeliranja: manjkava parametrizacija, krive pretpostavke, fizika koja nedostaje u modelu jer je trenutno nepoznata. Kako u većini slučajeva savršeni (egzaktni, referentni) model nije dostupan, sistematske pogreške je vrlo teško procijeniti. Ne postoji savršena strategija pri procjeni sistematskih pogrešaka, osobito kod velikih ekstrapolacija, jer neke odlike modela koje nisu važne u poznatom području, mogu se pojačati ili čak postati dominantne, u novim, nepoznatim područjima.

U svim problemima optimizacije ključni element je imati prikladnu definiciju tzv. kaznene funkcije. Ova funkcija ovisi o parametrima modela, eksperimentalnim podacima i najčešće o predefiniranim parametrima koje određuju sami modelari. Ona nam daje jednodimenzionalnu mjeru kvalitete prilagodbe. Parametri modela koji vode na manju vrijednost kaznene funkcije se smatraju, po definiciji, boljima od onih koji vode na veću vrijednost. Proces optimizacije se svodi na minimizaciju kaznene funkcije. Ne smije se nikako zaboraviti i na mogući utjecaj definicije same kaznene funkcije na rezultate optimizacije. Kroz definiciju istraživači mogu izvršiti utjecaj na samo modeliranje.

Za egzaktni model zadatak se svodi na problem optimizacije u kojem su parametri modela određeni usporedbom predviđenih opservabli s pažljivo odabranim skupom podataka. Za takav savršeni model sistematska pogreška iščezava, pa je ukupna pogreška statistička, tj. određena je kvalitetom mjerenja podataka ključnih u određivanju modela. Egzaktne modele također odlikuje i neovisnost ili slaba ovisnost konačnog rezultata o definiciji kaznene funkcije [32].

Nuklearni modeli su u praksi nesavršeni, kao i većina efektivnih modela, stoga sistematske pogreške obično dominiraju ukupnom nepouzdanošću. Međutim, postoje dobri razlozi zašto je korisno izračunati i statističke nepouzdanosti takvog modela:

1. Statistička analiza daje nepouzdanosti parametara modela. Proučavanjem statističkih pogrešaka na parametrima može se utvrditi je li skup eksperimentalnih podataka, korišten kako bi se model ograničio, kvalitativno i kvantitativno dovoljan.

2. Statistička analiza može koristiti pri usporedbi različitih matematičkih formu-

lacija ili pretpostavki i biti mjerilo različitih pristupa. U ovom slučaju je važno koristiti isti skup opservabli za prilagodbe.

3. Matrica kovarijance parametara nam govori ima li smisla dodati više podataka. Ako je skup podataka dovoljno raznovrstan (tj. dozvoljava nam da istražimo različite smjerove u parametarskom prostoru modela) i velik, model može postati previše ograničen. Kao posljedica toga statističke nepozdanosti mogu postati malene. U takvom slučaju se može iz ponašanja reziduala (razlika promatranih i predviđenih vrijednosti) procijeniti izvore sistematskih pogrešaka.

4. Statistička metoda pruža mogućnost procjene maksimalne točnosti modela na klasi opservabli. Ako je potrebna veća točnost, potrebno je daljnje usavršavanje modela.

5. Procjenom statističkih pogrešaka ekstrapoliranih veličina može se odrediti nosi li model kakve korisne informacije u nekom nepoznatom području.

6. Matrica kovarijance parametara omogućava izračun korelacija između različitih opservabli za koje model daje predviđanja. Ovo je koristan alat pri izradi novih predviđanja i u budućim eksperimentima [33].

7. Usporedba propagiranih statističkih pogrešaka s rezidualima može biti snažan indikator da modelu nedostaju određeni aspekti [34, 35].

2.1.1 Procjena statističkih pogrešaka

Promotrimo model koji ima N_p parametara $\mathbf{p} = (p_1, \ldots, p_{N_p})$ koje se prilagođava na N_d izmjerenih opservabli $\mathcal{O}_i$ $(i = 1, \ldots, N_d)$. Prvo definiramo kaznenu funkciju, minimiziramo ju obzirom na parametre $\mathbf{p}$ i konstruiramo matricu kovarijance parametara. Potom primijenimo matricu kako bismo procijenili pogreške predviđanja tako što ih povežemo s nepouzdanostima vrijednosti parametara. Najčešće korištena kaznena funkcija je χ^2 objektivna funkcija.

Definiramo χ^2 funkciju za parametre prilagodbe kao [36–38]

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_d} \frac{(\mathcal{O}_i(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{exp})^2}{\Delta\mathcal{O}_i^2}, \tag{2.1}$$

gdje $\mathcal{O}_i(\mathbf{p})$ označava izračunate vrijednosti, $\mathcal{O}_i^{exp}$ eksperimentalne podatke, $\Delta\mathcal{O}_i$ usvojenu pogrešku. Model nije definiran samo jednadžbama koje smo koristili u izračunu opservabli (tj. matematičkom formulacijom i pretpostavljenim prostorom modela), već i skupom eksperimentalnih podataka $\{\mathcal{O}_i^{exp}, i = 1, \ldots, N_d\}$ i usvojenih pogrešaka $\{\Delta\mathcal{O}_i, i = 1, \ldots, N_d\}$ korištenima u određivanju parametara.

Usvojene pogreške su definirane kao suma tri komponente:

$$\Delta\mathcal{O}_i^2 = (\Delta\mathcal{O}_i^{exp})^2 + (\Delta\mathcal{O}_i^{num})^2 + (\Delta\mathcal{O}_i^{the})^2. \tag{2.2}$$

$\Delta\mathcal{O}_i^{exp}$ predstavlja eksperimentalnu pogrešku. $\Delta\mathcal{O}_i^{num}$ predstavlja numeričku pogrešku, koja je vezana za korištenu računalnu metodu. Ostatak, $\Delta\mathcal{O}_i^{the}$, je teorijska pogreška zbog manjkavosti samog modela. Razuman izbor usvojenih pogrešaka $\Delta\mathcal{O}_i^{the}$ je ključni sastojak primjene χ^2 metode u razvoju modela. U praksi, reziduali predviđenih opservabli bi trebali biti ograničeni na interval definiran s $\Delta\mathcal{O}_i^{the}$. Ako su prisutne samo statističke pogreške, reziduali imaju stohastičku raspodjelu. Kako nuklearni modeli nisu savršeni, raspodjela reziduala će imati određene smjerove zbog sistematskih pogrešaka.

Ako u korištenom skupu eksperimentalnih podataka postoje različite vrste opservabli, tada se i usvojene pogreške moraju definirati za svaku vrstu. Primjerice, tipične nuklearne prilagodbe koriste jednu vrijednost $\Delta\mathcal{O}_i^{the}$ za energije vezanja, a drugu za r.m.s. radijuse. Svaka $\Delta\mathcal{O}_i^{the}$ nosi istu dimenziju kao i opservabla $\mathcal{O}_i(\mathbf{p})$, pa je svaki doprinos χ^2 bezdimenzionalan. Na ovaj način se različiti tipovi opservabli kombiniraju u jednu kaznenu funkciju. Možemo definirati i relativnu težinu W_i s kojom pojedina opservabla $\mathcal{O}_i(\mathbf{p})$ ulazi u problem optimizacije: $W_i = 1/\sqrt{\Delta\mathcal{O}_i}$. Mijenjanjem vrijednosti W_i možemo kontrolirati utjecaj pojedine opservable na konačnu parametrizaciju. Pritom treba imati na umu činjenicu da pri odabiru težine W_i, uvijek postoji određena količina proizvoljnosti, pošto se mogu odabrati pojedinačno, neovisno za svaku opservablu. U mnogim slučajevima se odabiru jednake težine W_i za sve opservable pojedinog tipa, međutim ne postoji očiti izbor vrijednosti [32], mogući su razni optimizacijski protokoli. Ta neodređenost je jedan od glavnih razloga za postojanje mnoštva različitih parametrizacija u teoriji nuklearne strukture.

Pravila statističke analize, međutim, nalažu da ukupna kaznena funkcija u minimumu bude normalizirana na $N_d - N_p$, tj. da bi prosjek $\chi^2(\mathbf{p}_0)$ po stupnju slobode trebao biti jednak jedinici:

$$\frac{\chi^2(\mathbf{p}_0)}{N_d - N_p} \longleftrightarrow 1. \tag{2.3}$$

Ovim uvjetom se uklanja dio proizvoljnosti u odabiru težina.

Osnovna ideja je podesiti $\Delta\mathcal{O}_i^{the}$ tako da bude dosljedna s raspodjelom reziduala, čak i ako je ta raspodjela nestatistička. Relativne težine se, stoga, mogu odrediti iz zahtjeva da prosjek χ^2 za svaki tip bude:

$$\sum_{i\in typ} \frac{(\mathcal{O}_i(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{exp})^2}{\Delta\mathcal{O}_i^2} = N_{typ}\frac{N_d - N_p}{N_d}, \tag{2.4}$$

gdje je N_{typ} broj podataka određenog tipa. Dakle, vrijednosti $\Delta\mathcal{O}_i \approx \Delta\mathcal{O}_i^{the}$ moraju poštovati uvjet normalizacije (2.4) i ne mogu se odabrati na početku, već se moraju odrediti iteracijom tijekom optimizacijskog procesa. U praksi su uvjeti (2.3) i (2.4) rijetko kada egzaktno ispunjeni. Zbog toga se uvodi globalni faktor skaliranja s, takav da vrijedi

$$\chi^2_{norm}(\mathbf{p}_0) = \frac{\chi^2(\mathbf{p}_0)}{s} = N_d - N_p. \tag{2.5}$$

Ovaj postupak se svodi na podešavanje $\Delta\mathcal{O}_i \longrightarrow \Delta\mathcal{O}_i\sqrt{s}$ koje daje točnu normalizaciju za χ^2_{norm}, ali ostavlja relativne težine nepromijenjenima, stoga ga možemo izračunati nakon što odredimo minimum $\mathbf{p}_0$. Ako su eksperimentalne i numeričke pogreške male u usporedbi s teorijskim nepouzdanostima, tj. ako vrijedi $\Delta\mathcal{O}_i = \Delta\mathcal{O}_i^{the}$, pretpostavka (2.5) definira trivijalni faktor skaliranja koji ne utječe na minimum. Pretpostavka (2.5) je ujedno i jedina koja ne ovisi o izboru istraživača. Na taj način je normalizacija χ^2 u njenom minimumu $\mathbf{p}_0$ definicijski fiksirana. Ovo povlači da radimo s modelom koji je fundamentalno netočan i ne može opisati istodobno sve podatke unutar samo eksperimentalnih i numeričkih pogrešaka.

Optimalna parametrizacija $\mathbf{p}_0$ je ona koja minimizira kaznenu funkciju, u našem slučaju χ^2 funkciju, čija je vrijednost u minimumu tada $\chi^2_0 = \chi^2(\mathbf{p}_0)$. Globalni optimizacijski model postaje vrlo složen kada se razmatra nekoliko kategorija opservabli prilagodbe. Svaka optimizacijska procedura je zahtjevna jer traži veliki broj ocjena modela. Zbog tih razloga je korisno imati preliminarne procjene za vrijednosti parametara i njihove pogreške. Jedna učinkovita predoptimizacijska metoda, osobito pogodna ako su opservable linearne funkcije parametara modela, je linearna regresija uz korištenje dekompozicije singularnih vrijednosti (SVD). Ova metoda se koristi pri prilagodbama masa, jednočestičnih energija i predoptimizaciji novih funkcionala. Jedna od prednosti SVD pristupa jest i ta da pruža procjenu efektivne veličine parametarskog prostora modela [39–41].

Koncept od velike važnosti u statistici, usko povezan s funkcijom χ^2, je funkcija vjerodostojnosti koja predstavlja vjerodostojnost da skup parametara $\mathbf{p}$ modela reproducira dani eksperimentalni podatak $\mathcal{O}_n^{exp}$. Funkcija vjerodostojnosti je definirana kao:

$$\mathcal{L}\left(\mathbf{p}|\mathcal{O}_i^{exp}\right) \equiv \mathcal{L}(\mathbf{p}) = \exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2(\mathbf{p})\right) = \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{(\mathcal{O}_i(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{exp})^2}{\Delta\mathcal{O}_i^2}\right]. \tag{2.6}$$

Korist funkcije vjerodostojnosti leži u njenoj relativnoj vrijednosti. Imamo li dva proizvoljna skupa parametara (ili modela) $\mathbf{p}_1$ i $\mathbf{p}_2$, funkcija vjerodostojnosti daje relativnu vjerojatnost da će dani model reproducirati dani eksperimentalni podatak. Optimalni (ili najvjerodostojniji) skup parametara $\mathbf{p}_0$ je, kao što je već rečeno, onaj koja minimizira kaznenu funkciju. Minimizacija kaznene funkcije $\chi^2(\mathbf{p})$ je u potpunosti ekvivalentna maksimizaciji funkcije vjerodostojnosti $\mathcal{L}(\mathbf{p})$, tj. minimizaciji negativnog logaritma funkcije vjerodostojnosti:

$$-\ln\mathcal{L}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\chi^2(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{(\mathcal{O}_i(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{exp})^2}{\Delta\mathcal{O}_i^2}. \tag{2.7}$$

Dakle, taj optimalni skup parametara $\mathbf{p}_0 = (p_1 \ldots, p_F)$ zadovoljava uvjet:

$$\frac{\partial\chi^2(\mathbf{p})}{\partial p_i}\Big|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} \equiv \partial_i\chi^2(\mathbf{p}_0) = 0 \quad (\text{za } i = 1, \ldots, F). \tag{2.8}$$

Iako je metoda maksimalne vjerodostojnosti, uz algoritam za uzorkovanje (npr. Metropolis Monte Carlo algoritam), jednostavna i oslobođena aproksimacija, generacija velikog skupa parametara modela i izračun određenih opservabli unutar takvog pristupa je nepraktičan i računalno vrlo intenzivan. U takvim slučajevima možemo primijeniti gaussijansku aproksimaciju - analitički pristup u kojem se u istraživanju parametarskog prostora zadržavamo u neposrednoj okolici minimuma χ^2. Gaussijanska aproksimacija se sastoji od istraživanja malih, kvadratičnih oscilacija oko χ^2 minimuma:

$$\chi^2(\mathbf{p}) \approx \chi^2(\mathbf{p}_0) + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{F}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0)_i(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0)_j\left(\frac{\partial^2\chi^2}{\partial p_i \partial p_j}\right)_0 \tag{2.9}$$

Pogodno je izraziti odstupanja od minimuma preko bezdimenzionalnih, skaliranih varijabli:

$$x_i \equiv \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0)_i}{(\mathbf{p}_0)_i}. \tag{2.10}$$

Gaussijanska aproksimacija (2.9) sada poprima kompaktniji oblik:

$$\chi^2(\mathbf{p}) = \chi_0^2 + \mathbf{x}^T\hat{\mathcal{M}}\mathbf{x}, \tag{2.11}$$

gdje je $\mathbf{x}$ vektor stupac dimenzije F, $\mathbf{x}^T$ transponirani vektor (redak), a $\hat{\mathcal{M}}$ Hessijan, simetrična matrica drugih derivacija, dimenzije $F \times F$:

$$\mathcal{M}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\chi^2}{\partial x_i \partial x_j}\right)_{\mathbf{x}=0} = \frac{1}{2}\partial_i\partial_j\chi_0^2. \tag{2.12}$$

Svaka opservabla A se može izračunati unutar modela kao $A = A(\mathbf{p})$, uz dani skup parametara $\mathbf{p}$. Vrijednost A varira unutar intervala pouzdanosti, što znači da A ima određenu nepouzdanost ΔA. Jednostavnosti radi, pretpostavimo da opservabla A slabo varira s $\mathbf{p}$ tako da ju možemo linearizirati u nama važnom intervalu

$$A(\mathbf{p}) \simeq A_0 + \partial_{\mathbf{p}}A|_{\mathbf{p}_0}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0) \quad \text{za} \quad A_0 = A(\mathbf{p}_0). \tag{2.13}$$

Raspodjela vjerojatnosti za proizvoljnu opservablu A se u gaussijanskoj aproksimaciji može izračunati u zatvorenoj formi:

$$P(A) = \frac{\int d\mathbf{p}\ \delta(A - A^{th}(\mathbf{p}))\exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2(\mathbf{p})\right)}{\int d\mathbf{p}\ \exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2(\mathbf{p})\right)} \tag{2.14}$$

$$\begin{aligned} P(A) &= \frac{\int d\mathbf{x}\ \delta\left(A - A_0 - x_iA_i\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\hat{\mathcal{M}}\mathbf{x}\right)}{\int d\mathbf{x}\ \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\hat{\mathcal{M}}\mathbf{x}\right)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\left[\frac{Z(\mathbf{J})}{Z(0)}\right]\exp\left(ip(A-A_0)\right), \end{aligned} \tag{2.15}$$

gdje su $A_0 \equiv A_0^{th}$, $A_i \equiv \partial_i A_0^{th}$, $J_i \equiv -ipA_i$. Pritom smo iskoristili svojstvo Diracove delta funkcije:

$$\delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} ds\frac{e^{-its}}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad \delta\left(A - A_0 - x_iA_i\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\exp\left(ip(A - A_0 - x_iA_i)\right). \tag{2.16}$$

Uveli smo i particijsku funkciju

$$Z(\mathbf{J}) = \int d\mathbf{x}\ \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\hat{\mathcal{M}}\mathbf{x} + \mathbf{J}\cdot\mathbf{x}\right) = Z(0)\exp\left(\frac{1}{2}\mathbf{J}^T\hat{\mathcal{M}}^{-1}\mathbf{J}\right). \tag{2.17}$$

Izvrijednili smo gaussijanski integral nadopunjavanjem do potpunog kvadrata. Preostali integral po p je također gaussijanski i riješi se na sličan način, što nam daje rezultat za $P(A)$ u gaussijanskoj aproksimaciji:

$$P(A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_A^2}}\exp\left(-\frac{(A-A_0)^2}{2\sigma_A^2}\right), \tag{2.18}$$

gdje je varijanca opservable A glasi:

$$\sigma_A^2 = \mathbf{A}^T\hat{\mathcal{M}}^{-1}\mathbf{A} = \sum_{i,j=1}^{F}\left(\frac{\partial A}{\partial x_i}\right)_0\hat{\mathcal{M}}_{ij}^{-1}\left(\frac{\partial A}{\partial x_j}\right)_0. \tag{2.19}$$

Varijanca nam govori koliko je opservabla raspršena oko njene prosječne vrijednosti. Zanimljivo je analizirati uzroke tog raspršenja. Za početak, krenimo od matrice drugih derivacija $\hat{\mathcal{M}}$. Kako je ona simetrična, može se prevesti u dijagonalnu formu pomoću ortogonalne transformacije: $\hat{\mathcal{M}} = \hat{O}\hat{\mathcal{D}}\hat{O}^T$. $\hat{O}$ je ortogonalna matrica čije stupce čine normalizirani svojstveni vektor, a $\hat{\mathcal{D}}$ je dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti $\hat{\mathcal{D}} = \mathrm{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_F)$. Sve svojstvene vrijednosti su pozitivne jer kaznena funkcija ima minimum u $\mathbf{x} = 0$, pa (2.19) možemo napisati i na sljedeći način:

$$\sigma_A^2 = \mathbf{A}^T\left(\hat{O}\hat{\mathcal{D}}^{-1}\hat{O}^T\right)\mathbf{A} = (\hat{O}^T\mathbf{A})^T\hat{\mathcal{D}}^{-1}(\hat{O}^T\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{F}\lambda_i^{-1}\left(\frac{\partial A}{\partial \xi}\right)_0^2, \tag{2.20}$$

gdje F-dimenzionalni vektor $\xi = \hat{O}^T\mathbf{x}$ predstavlja točku u parametarskom prostoru, napisan je u novoj, rotiranoj bazi tj. kao linearna kombinacija originalnih parametara modela. Svaka svojstvena vrijednost λ_i utječe na propadanje kvalitete prilagodbe kako se krećemo duž smjera određenog pripadnim svojstvenim vektorom. ”Mekani” ili ”ravni” smjer obilježen je malenom ili iščezavajućom svojstvenom vrijednošću λ_i što ima za posljedicu maleno propadanje u kvaliteti. Linearna kombinacija parametara modela koja definira takav smjer je slabo ograničena izborom opservabli uključenih u definiciju χ^2 funkcije [39]. Ako je opservabla od interesa A osjetljiva na takav smjer, u smislu da je derivacija $\partial A/\partial\xi_i$ iznosom velika, tada će i varijanca σ_A^2 biti velika. Identifikacijom mekanih smjerova možemo unaprijediti naš model, vidjeti koje vrste opservabli bi se trebale dodati u χ^2 kako bi se teorijski model bolje ograničio.

Koncept od temeljne važnosti u analizi korelacija je kovarijanca između dvije opservable A i B - $\mathrm{cov}(A,B)$. Pretpostavimo da imamo M točaka (ili modela) $(\mathbf{x}^{(1)},\ldots,\mathbf{x}^{(M)})$ u okolici optimalnog modela $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$, kovarijanca između A i B je definirana kao:

$$\mathrm{cov}(A,B) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M}\left[(A^{(m)} - \langle A\rangle)(B^{(m)} - \langle B\rangle)\right] = \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle, \tag{2.21}$$

gdje je $A^{(m)} \equiv A(\mathbf{x}^{(m)})$, "$\langle \quad \rangle$" označava statistički prosjek

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} AP(A)dA. \tag{2.22}$$

Pomoću gornje definicije kovarijance možemo definirati koeficijent korelacije (još znan kao Pearsonov produkt-moment koeficijent korelacije):

$$\rho(A, B) = \frac{\text{cov}(A, B)}{\sigma_A \sigma_B}. \tag{2.23}$$

Primjetimo da je varijanca A, $\sigma_A = \text{cov}(A, A)$. Za dvije opservable se kaže da su u potpunosti korelirane ako je $\rho(A, B) = 1$, u potpunosti antikorelirane ako je $\rho(A, B) = -1$ i nema korelacije ako je $\rho(A, B) = 0$. U gaussijanskoj aproksimaciji kovarijancu možemo izraziti na sljedeći način:

$$\text{cov}(A, B) = \text{cov}(B, A) = \mathbf{A}^T \hat{\mathcal{C}} \mathbf{B} = \sum_{i,j=1}^{F} \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \right)_0 \mathcal{C}_{ij} \left(\frac{\partial B}{\partial x_j} \right)_0, \tag{2.24}$$

gdje je $\hat{\mathcal{C}}$ simterična 2×2 matrica kovarijanci:

$$\hat{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} \text{cov}(A, A) & \text{cov}(A, B) \\ \text{cov}(B, A) & \text{cov}(B, B) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_A^2 & \sigma_A \sigma_B \rho_{AB} \\ \sigma_A \sigma_B \rho_{AB} & \sigma_B^2 \end{pmatrix}. \tag{2.25}$$

Kako smo pretpostavili da prilagođene opservable $\mathcal{O}_i$ ovise linearno o parametrima $\mathbf{p}$, matrica kovarijanci se može povezati s Hessijanom:

$$\hat{\mathcal{C}} = s\hat{\mathcal{M}}^{-1} = s \left(\hat{\mathcal{J}}^T \hat{\mathcal{J}} \right)^{-1}, \tag{2.26}$$

gdje je

$$\hat{\mathcal{J}}_{i\alpha} = \frac{\partial_{p_\alpha} \mathcal{O}_i|_{\mathbf{p}_0}}{\Delta \mathcal{O}_i} \tag{2.27}$$

Jacobijeva matrica, koja je inverzno proporcionalna usvojenim pogreškama.

Ako opservable koje se prilagođavaju slabo ovise o nekim parametrima, Hessijan postaje gotovo singularan i matrica kovarijanci loše uvjetovana. U tom slučaju pogreške ili sve predviđene vrijednosti (2.19) postanu nerazumno velike. Zato se opservable koje slabo ovise o parametrima modela ne bi trebale prilagođavati, a parametri koji imaju malen utjecaj na rezultate bi se trebali ukloniti iz modela prikladnim predoptimizacijskim procedurama [42]. Matrice Hessijana ($\hat{\mathcal{M}}$), kovarijanci ($\hat{\mathcal{C}}$) i Jacobijana ($\hat{\mathcal{J}}$) su osnovni elementi pri analizi statističkih pogrešaka i moraju se računati u sklopu optimizacijskog procesa.

Hessijan, $\hat{\mathcal{M}} = \hat{\mathcal{J}}^T \hat{\mathcal{J}}$, se linearno povećava s brojem N_d podataka koje ograničavaju model. U slučaju identičnih opservabli $\mathcal{O}_i \equiv \mathcal{O}$ s identičnim usvojenim pogreškama $\mathcal{O}_i \equiv \mathcal{O}$ imamo:

$$\hat{\mathcal{M}}_{\alpha\beta} = \frac{N_d}{\Delta \mathcal{O}^2} \left(\partial_{p_\alpha} \mathcal{O}|_{\mathbf{p}_0} \right) \left(\partial_{p_\beta} \mathcal{O}|_{\mathbf{p}_0} \right). \tag{2.28}$$

Statistička nepouzdanost se smanjuje s brojem N_d podataka koji ograničavaju model. Ako bi naš model bio egzaktan ($\Delta\mathcal{O}_i^{num} = \Delta\mathcal{O}_i^{the} = 0$), uzimanjem velikog broja N_d modelirane opservable bi bile određene s proizvoljnom točnošću

$$\Delta A = \sqrt{\overline{\Delta A^2}} \sim \frac{\Delta\mathcal{O}^{exp}}{\sqrt{N_d}}, \tag{2.29}$$

a preciznost bi ovisila o korijenu broja mjerenja. Općenito govoreći, kako broj nekoreliranih podataka raste i broj parametara ostaje fiksiran, interval pouzdanosti postaje uži. To ne znači da povećanjem N_d možemo učiniti predviđanja točnijima. U nekom trenutku dodavanje opservabli prilagodbe neće imati smisla jer će ukupnom pogreškom modela dominirati sistematska pogreška.

Preciznost egzaktnog modela se poboljšava smanjenjem neodređenosti eksperimentalnih podataka $\Delta\mathcal{O}^{exp}$. Međutim, kada model nije egzaktan i teorijska pogreška dominira, primjena uvjeta normalizacije (2.5) na opservable istog tipa, uz pretpostavku identičnih težina, daje:

$$\left(\Delta\mathcal{O}^{the}\right)^2 = \frac{N_d}{N_d - N_p}\left(\mathcal{O}(\mathbf{p}_0) - \mathcal{O}^{exp}\right)^2. \tag{2.30}$$

Tipične usvojene teorijske pogreške su reda veličine tipičnog reziduala i ne mogu se dalje smanjiti.

2.1.2 Procjena sistematskih pogrešaka

Sistematske pogreške teorijskog modela su posljedica fizike koja nedostaje i/ili lošeg modeliranja. Kako u većini slučajeva savršeni model nije dostupan, procjena sistematskih pogrešaka je vrlo zahtjevna. Pri procjeni sistematskih nepouzdanosti, osobito u kontekstu ekstrapolacija, mogu se primijeniti sljedeće strategije:

Analiza reziduala - proučavanje raspodjele reziduala za danu opservablu. Za savršeni model raspodjela je statistička. Međutim, u većini praktičnih slučajeva se mogu primjetiti sistematski trendovi koji nam pomažu pri pogađanju kakva fizika nedostaje modelu.

Analiza međumodelskih ovisnosti - napravimo određeni broj predviđanja $\mathcal{O}_j$ za opservablu $\mathcal{O}$. Pritom koristimo skup od N_m razumnih i dovoljno različitih modela M_j, $j = 1, \ldots, N_m$, koji su dobro kalibrirani na postojeće podatke i koji se temelje na različitim teorijskim pretpostavkama ili optimizacijskim protokolima. Ako pretpostavimo da različiti modeli imaju međusobno neovisne naklonjenosti, pristranosti, možemo se nadati da će se dogoditi određena nasumična raspodjela sistematskih pogrešaka. Predviđena vrijednost opservable $\mathcal{O}$, usrednjena po modelima, je tada:

$$\overline{\mathcal{O}}_m = \frac{1}{N_m}\sum_{j=1}^{N_m}\mathcal{O}_j, \tag{2.31}$$

uz odgovarajuću sistematsku pogrešku

$$\Delta\mathcal{O}_{syst,m} = \sqrt{\frac{1}{N_m}\sum_{j=1}^{N_m}(\mathcal{O}_j - \bar{\mathcal{O}}_m)^2}, \tag{2.32}$$

koja pruža mjerilo nepouzdanosti modela.

Usporedba s postojećim podacima - sistematske pogreške prilagođenih opservabli se mogu procijeniti iz optimizacije modela uz korištenje velike količine podataka, kako bismo osigurali da je statistička pogreška mala. Tada izračunamo r.m.s. odstupanje $\Delta\mathcal{O}_{rms}$ od poznatih eksperimentalnih podataka za dani tip opservable (npr. masa ili radijus). Sistematska pogreška predviđene opservable $\mathcal{O}$, koja pripada ovom tipu, trebala bi biti najmanje reda veličine $\Delta\mathcal{O}_{rms}$.

Nakon što smo procijenili sistematsku i statističku pogrešku, predviđena opservabla $\mathcal{O}$ se može napisati kao

$$\mathcal{O} = \overline{\mathcal{O}} \pm \Delta\mathcal{O}_{stat} \pm \Delta\mathcal{O}_{syst}. \tag{2.33}$$

Izložena analiza usvojenih pogrešaka i skrivenih sistematskih pogrešaka ne dozvoljava da u potpunosti procjenimo doprinos sistematskih pogrešaka ekstrapolacijama jer dostupni podaci obično ograničavaju samo jedno, konačno područje parametarskog prostora modela.

2.2 Teorija srednjeg polja

Koncept teorije srednjeg polja ima široku primjenu u opisu interagirajućih mnogočestičnih sustava u fizici. Osnovna ideja tog pristupa jest ta da se pri analizi mnogočestičnog sustava ne sumiraju sve dvočestične interakcije čestica u sustavu, već da se opiše interakcija jedne čestice sa svim ostalima pomoću usrednjenog potencijala kojeg stvaraju ostale čestice. U jednom takvom mnogočestičnom sustavu, promotrimo česticu i na položaju $\vec{r}_i$ koja se nalazi u potencijalu U kojeg stvaraju čestice j

$$U(\vec{r}_i) = \sum_j V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \mapsto U\left[\rho(\vec{r}_i)\right]. \tag{2.34}$$

Čestica i osjeća prosječni potencijal koji ovisi o gustoći čestica na njenom položaju

$$\rho(\vec{r}) = \sum_j \Psi_j^*(\vec{r})\Psi_j(\vec{r}). \tag{2.35}$$

Problem se riješava u terminima potencijala srednjeg polja $U\left[\rho\right]$ koji je funkcional gustoće ρ. Teorija srednjeg polja je vrlo učinkovit opis mnogočestičnih sustava poput atomskih jezgara ili beskonačne nuklearne materije. Cilj je naći točan funkcional gustoće $U\left[\rho\right]$ koji minimizira mnogočestični hamiltonijan. Postojanje takvog funkcionala može se dokazati unutar Kohn-Shamove teorije [4, 5]. Kako taj funkcional izgleda, međutim, ovisi o problemu. Postupak pronalaska funkcionala koji je što

moguće bliži egzaktnom rješenju, koje u principu postoji, je vrlo zahtjevan. Također treba imati na umu da je teorem postojanja - Hohenberg-Kohn teorem [43], dokazan za čestice u vanjskom polju, npr. atome u elektromagnetskom polju. Da ovaj teorem vrijedi i za za vezane sustave, poput jezgara, je pretpostavka koja nije eksplicintno dokazana.

2.2.1 Osnovna svojstva beskonačne nuklearne materije

Mnoga teorijska razmatranja nuklearnih problema postaju jednostavnija ako pretpostavimo da je gustoća uniformna kroz cijeli volumen promatranog sustava. Zbog ovoga je stvorena beskonačna nuklearna materija, idealiziran sustav vezanih jezgara, uniformne gustoće, koji aproksimira unutrašnjost teške jezgre. Kako bi se situacija dodatno pojednostavila, pretpostavlja se i da je broj protona jednak broju neutrona. Takav sustav je pogodan za istraživanje nukleon-nukleon interakcija i različitih tehnika riješavanja problema mnoštva čestica. Kako se radi o beskonačnom sustavu, može se zanemariti gibanje centra mase i komplikacije koje proizlaze iz njega, kao u slučaju konačnih jezgara. U takvim istraživanjima se često i zanemaruju elektormagnetske interakcije, pošto je fokus na nuklearnim interakcijama. Neutronske zvijezde su najbliži primjer iz prirode beskonačnoj nuklearnoj materiji.

Energija vezanja u beskonačnoj nuklearnoj materiji se može dobiti koristeći Weizsäckerove masene formule. Za konačnu jezgru, volumen je proporcionalan broju nukleona A, a površina proporcionalna $A^{2/3}$. Omjer površinskog i volumnog člana je proporcionalan $A^{-1/3}$. Stoga, za beskonačnu nuklearnu materiju možemo zanemariti površinski član, jer $A^{-1/3} \longrightarrow 0$. Doprinos Coulombovog odbijanja se također može zanemariti jer ne želimo promatrati elektromagnetske efekte. Energija simetrije također isčezava uz pretpostavku $Z = N$. Energija sparivanja se isto tako može zanemariti jer je A beskonačan, što ostavlja samo volumni član u izrazu za energiju vezanja u beskonačnoj nuklearnoj materiji. Iz studija izvršenih na konačnim jezgrama, imamo rezultat za energiju vezanja po nukleonu u beskonačnoj nuklearnoj materiji:

$$\frac{E_B}{A} = 16 \pm 1 \text{ MeV}. \tag{2.36}$$

Nepouzdanost od 1 MeV odražava varijacije u vrijednostima koje su dobivene na različite načine.

Gustoća beskonačne nuklearne materije se može dobiti iz maksimalne ili *saturacijske* gustoće u konačnim jezgrama. Vrijednost koja se najčešće koristi je

$$\rho_0 = 0.16 \pm 0.02 \text{ nukleona/fm}^3 \tag{2.37}$$

Ona je malo veća od prosječne gustoće $3/(4\pi r_0^3) = 0.14$ nukleona/fm^3, koja se dobiva uz $r_0 = 1.2$ fm. Razlika dolazi zbog toga što ovdje nemamo definiranu površinu sustava, već je on beskonačan.

ρ_0 možemo povezati i s Fermijevim impulsom nukleona. Ako energija pobuđenja nije velika, većina niskoležećih jednočestičnih stanja su zaposjednuta. Zbog toga Paulijev princip isključenja igra važniju ulogu nego nukleon-nukleon interakcija u određivanju gibanja nukleona unutar beskonačne nuklearne materije. U analizi takvog sustava možemo primijeniti model degeneriranog Fermijevog plina kako bismo istražili raspodjelu impulsa nukleona. U ovakvoj aproksimaciji nukleoni se tretiraju kao neinteragirajući fermioni, a osnovno stanje se dobiva popunjavanjem svih dostupnih niskoležećih jednočestičnih stanja.

Za slobodnu česticu u kubičnoj kutiji, duljine stranice L, valna funkcija je dana ravnim valom,

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{2.38}$$

U odsutnosti spinskih i izospinskih stupnjeva slobode, dozvoljene vrijednosti valnih brojeva $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ su dane uvjetom iščezavanja valne funkcije na rubu kutije. To daje vrijednosti,

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \tag{2.39}$$

gdje su n_x, n_y, n_z cijeli brojevi. Broj dozvoljenih stanja u elementu volumena d^3k je

$$dn = 4 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3k \tag{2.40}$$

gdje faktor 4 dolazi zbog činjenice da postoji jednak broj protona i neutrona i da svaki od njih mogu biti u stanju spina gore ili dolje.

Sada možemo povezati nuklearnu gustoću s Fermijevim impulsom. Kako je ukupan broj nukleona A i u osnovnom stanju oni svi popunjavaju niskoležeća stanja do Fermijevog impulsa k_F, to daje sljedeću relaciju

$$A = \int_0^{\epsilon_F} dn = \int_0^{k_F} 4 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3k = 4 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi}{3} k_F^3. \tag{2.41}$$

Gustoća nukleona se dobiva iz broja nukleona u volumenu L^3,

$$\rho_0 = \frac{A}{L^3} = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3. \tag{2.42}$$

Invertirajući prethodnu relaciju, dobiva se Fermijev impuls u ovisnosti o gustoći beskonačne nuklearne materije,

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2}{2}\rho_0\right)^{1/3} = 1.33 \pm 0.05 \text{ fm}^{-1}. \tag{2.43}$$

Prosječna kinetička energija nukleona u beskonačnoj nuklearnoj materiji se može izračunati iz (2.40), koristeći činjenicu da je vrijednost za nukleon $\frac{(\hbar k)^2}{2M_N}$, gdje je M_N masa nukleona. Uzimajući prosjek po svim nukleonima, dobiva se rezultat

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{A} \int_0^{k_F} \frac{(\hbar k)^2}{2M_N} 4 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3k = \frac{3}{5} \frac{(\hbar k_F)^2}{2M_N} = \frac{3}{5}\epsilon_F. \tag{2.44}$$

Vrijednost Fermijeve energije ϵ_F se može pronaći koristeći k_F dobiven u (2.43),

$$\epsilon_F = \frac{(\hbar k_F)^2}{2M_N} \approx 37 \quad \text{MeV}. \tag{2.45}$$

Prosječna energija nukleona je dakle $\bar{\epsilon} \approx 22$ MeV.

Stanje minimalne energije predstavlja stabilnu ravnotežu za beskonačnu nuklearnu materiju u odnosu na male promjene gustoće. Zato promjena energije vezanja po čestici zbog promjena u Fermijevom impulsu, mora iščezavati,

$$\frac{d}{dk_F}\left(\frac{E_B}{A}\right) = 0. \tag{2.46}$$

Derivacija drugog reda E_B/A ovisi o krutosti nuklearne materije u odnosu na promjene u gustoći. To se mjeri modulom kompresije,

$$K = k_F^2 \frac{d^2}{dk_F^2}\left(\frac{E_B}{A}\right)_{\rho=\rho_0} \tag{2.47}$$

što predstavlja nagib promjene energije vezanja po nukleonu, funkcije koja ovisi o k_F. Kako se izvrijednjava u minimumu energije, on je pozitivna veličina. Modul kompresije je ekvivalentan modulu elastičnosti u mehanici, koji opisuje promjenu volumena materijala kao funkciju primijenjenog pritiska. Za nuklearnu materiju vrijedi

$$K \approx 200 \text{ MeV} \tag{2.48}$$

određeno iz npr. energije potrebne za pobuđenje jezgre bez promjene njezinog oblika.

Gustoća čestica je suma svih zaposjednutih stanja unutar volumena $(2\pi)^3$ faznog prostora.

$$\rho = N/V = \sum_{k,\lambda} \Psi^*_{k,\lambda}(\vec{r})\Psi_{k,\lambda}(\vec{r}) \;\mapsto\; \frac{\gamma}{(2\pi)^3}\int d^3k\, n(\vec{k}). \tag{2.49}$$

U granici kontinuuma suma se može zamijeniti integralom preko raspodjele impulsa $n(\vec{k})$. Kako se radi o fermionima, kvantna stanja unutar volumena $(2\pi)^3$ moraju biti različita. Stoga su stanja $\vec{k}$ zaposjednuta do Fermijevog impulsa k_F. Raspodjela zaposjednutih stanja je dana Fermijevom sferom radijusa k_F.

$$n(\vec{k}) = \Theta(k_F - |\vec{k}|). \tag{2.50}$$

Integracija u (2.49) vodi na vezu između gustoće i Fermijevog impulsa

$$\rho = \frac{\gamma}{6\pi^2}k_F^3 \tag{2.51}$$

gdje je γ faktor degeneracije. Za izospinski simetričnu nuklearnu materiju s jednakim brojem protona i neutrona je $\gamma = 4$, što znači da svako impulsno stanje $\vec{k}$ može biti zaposjednuto s četiri stanja (proton i neutron, spina gore ili dolje). Za čistu neutronsku materiju spin-izospin degeneracija je $\gamma = 2$.

Ključna veličina koja opisuje svojstva beskonačne materije je jednadžba stanja, tj. gustoća energije ϵ kao funkcija gustoće čestica. Gustoća energije je suma kinetičke energije i srednjeg polja

$$\epsilon(\rho) = \frac{\gamma}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \frac{\vec{k}^2}{2M} n(\vec{k}) + U[\rho]. \tag{2.52}$$

Jednadžba stanja može se izraziti preko gustoće tlaka umjesto gustoće energije, što je uobičajeno u hidrodinamici pri opisu idealnih fluida. Oba opisa su ekvivalentna jer su gustoća energije i tlaka povezani termodinamičkim relacijama. U nuklearnoj fizici je praktičnije za opis nuklearne materije koristiti gustoću energije ili gustoću po čestici:

$$E/A = \epsilon/\rho = \frac{3k_F^2}{10M} + U[\rho]/\rho. \tag{2.53}$$

U (2.53) je izvrijednjen integral kinetičke energije u nerelativističkom slučaju. Iz činjenice da postoje stabilne jezgre slijedi da energija po čestici E/A mora imati minimum. Ova točka se zove točka saturacije. Ta vrijednost, energija vezanja po nukleonu, se može dobiti iz Weizsäckerove formule mase za konačne jezgre:

$$E = \underbrace{-a_1 A}_{\text{volumni član}} + \underbrace{a_2 A^{\frac{2}{3}}}_{\text{površinski član}} + \underbrace{a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}}}_{\text{Coulombov član}} + \underbrace{a_4 \frac{(A-2Z)^2}{A}}_{\text{član simetrije}} + \underbrace{\lambda \frac{a_5}{A^{3/4}}}_{\text{energija sparivanja}} . \tag{2.54}$$

Weizsäckerova formula sadrži pet članova. Volumni član opisuje uvjete u unutrašnjosti teške jezgre. Površinski član opisuje površinsku napetost. Član simetrije izvire zbog izospinske ovisnosti nuklearnih sila (izmjena izovektorskih mezona) i razmjerna je razlici broja protona i neutrona. Član sparivanja dolazi zbog fenomena superfluidnosti koji postoji i u nuklearnim sustavima.

Kako razmatramo beskonačnu, izotropnu i homogenu nuklearnu materiju, samo volumni član doprinosi pa Weizsäckerova formula daje vrijednost $E/A \simeq -16$ MeV u točki saturacije. Gustoća na kojoj se ovo zbiva, gustoća saturacije, je poznata iz raspršenja elektrona na konačnim jezgrama. To je gustoća u unutrašnjosti teške jezgre, npr. ^{208}Pb i iznosi $\rho_0 \simeq 0.16$ fm^{-3}. Kako bi funkcional gustoće bio realističan, ključno je da zadovolji nuklearna saturacijska svojstva:

$$\rho_0 \simeq 0.16 \text{ fm}^{-3}; \quad k_{F_0} \simeq 1.36 \text{ fm}^{-1} = 260 \text{ MeV}; \quad E/A(\rho_0) \simeq -16 \text{ MeV}. \tag{2.55}$$

Saturacijska gustoća se može shvatiti i na sljedeći intuitivni način: nukleon, radijusa oko 1.2 fm, zauzima volumen oko 8 fm^3 pa je gustoća na kojoj se nukleoni dodiruju 1/8 fm^{-3}. Iz ponašanja nuklearnih sila, sličnog Van der Waalsovim, je intuitivno jasno da je konfiguracija gdje se nukleoni dodiruju energijski najpovoljnija. Tada je doprinos jakih privlačenja srednjeg dosega maksimalan. Ako bi se materiju i dalje komprimiralo, nukleoni bi počeli osjećati odbojni potencijal. Zato u normalnim uvjetima nuklearni sustavi iznad saturacijske gustoće ρ_0 u prirodi ne postoje. Iznimka su neutronske zvijezde u kojima gravitacijski tlak kompresira nuklearnu materiju na gustoću pet do deset puta veću od saturacijske.

2.2.2 Relativistički modeli srednjeg polja

Za opis nuklearne materije, neutronskih zvijezda i jezgara koristimo $\sigma\omega$ - model. $\sigma\omega$ - model sadrži samo dva mezona, skalarni σ i vektorski ω mezon. Ova dva mezona su temelj najjednostavnije verzije kvantne hadrodinamike (QHD) koja opisuje sve važne aspekte relativističke nuklearne dinamike koju je 1974. razvio Walecka [13]. QHD se smatra efektivnom teorijom koja je primjenjiva na razini srednjeg polja. Efektivna je u smislu da se konstante vezanja σ i ω mezona s nukleonom ne određuju iz slobodnog nukleon-nukleon raspršenja, već se smatraju slobodnim parametrima koji se prilagođavaju svojstvima nuklearne materije, posebice nuklearnoj točki zasićenja.

Unutar $\sigma\omega$-modela imamo sljedeće stupnjeve slobode: nukleon, skalarni σ-mezon (izo-skalar), vektorski ω-mezon (izo-skalar) i vektorski ρ-mezon (izo-vektor) kojeg zanemarujemo jer ne doprinosi u beskonačnoj nuklearnoj materiji (iako je važan za vrlo točan opis svojstava konačnih jezagara poput jednočestičnih spektara ili neutronskog skina). Pristup ovakvog efektivnog modela, poput $\sigma\omega$-modela, je da se doprinosi koji su izvan dosega aproksimacije ne tretiraju eksplicitno, već apsorbiraju na neki način u parametre modela, tj. konstante vezanja. Stoga pion nije eksplicitno uključen kao stupanj slobode.

Postoji mnogo proširenja originalnog $\sigma\omega$-modela QHD-I [14] koji unaprijeđuju opis saturacije i konačnih jezgara. Jedno od tih proširenja su i relativistički modeli točkastog vezanja (engl. *relativistic point coupling models*). U tim modelima je napuštena slika izmjene mezona, već se lagranžijan formulira preko nukleonskih polja, a točkasta vezanja se razvijaju u red potencija nukleonskih polja i vrhova. Vrhovi se konstruiraju kontrakcijama Diracovih vrhova (skalara, vektora, tenzora,...) s derivacijama. Sada su derivacije, umjesto mezona, odgovorne za konačan doseg sila.

Teorija funkcionala gustoće (engl. *Density Functional Theory*; DFT) je jedan od najpopularnijih i najuspješnijih *ab initio* pristupa u opisu kvantnih sustava mnoštva čestica (npr. atomi, molekule, krutine) zbog malih računalnih zahtjeva u odnosu na točnost koju daje. Osnovna ideja ovog pristupa je da se svojstva osnovnog stanja stacionarnog kvantnog sustava mnoštva čestica može opisati u potpunosti preko gustoće osnovnog stanja. Gustoća $\rho(\mathbf{r})$ je funkcija samo tri prostorne koordinate, umjesto $3N$ koordinata N-čestične valne funkcije. Zato je DFT računski izvediv i za velike sustave. Većina primjena teorije funkcionala gustoće koristi efektivne jednočestične Kohn-Sham (KS) jednadžbe [3, 4], uvedene za pomoćni sustav N neinteragirajućih čestica. Prema Hohenberg-Kohn teoremu [43] postoji jedinstveni energijski funkcional

$$E_s[\rho] = T_s[\rho] + \int d^3r v_s(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}), \tag{2.56}$$

koji za varijacijsku jednadžbu daje egzaktnu gustoću osnovnog stanja $\rho_s(\mathbf{r})$. $T_s(\mathbf{r})$ je univerzalni funkcional kinetičke energije neinteragirajućeg sustava. KS pristup se temelji pretpostavci da za svaki interagirajući sustav postoji jedinstveni jednočestični lokalni potencijal $v_s(\mathbf{r})$, takav da je egzaktna gustoća osnovnog stanja jednaka gustoći

osnovnog stanja pomoćnog, neinteragirajućeg sustava:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_s(\mathbf{r}) = \sum_i^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \tag{2.57}$$

U (2.57) je ona dana preko N najnižih zaposjednutih jednočestičnih orbitala koja su rješenja Kohn-Shamove jednadžbe:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + v_s(\mathbf{r})\right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \tag{2.58}$$

Jedinstvenost $v_s(\mathbf{r})$ slijedi iz Hohenberg-Kohn teorema i jednočestične orbitale su jedinstveni funkcionali gustoće $\phi_i(\mathbf{r}) = \phi_i([\rho]; \mathbf{r})$.

Za sustave poput atomske jezgre, energijski funkcional se može rastaviti na tri člana:

$$F[\rho] = T_s[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho], \tag{2.59}$$

gdje je T_s kinetička energija neinteragirajućeg sutava A nukleona, E_H je Hartreejeva energija, a E_{xc} predstavlja energiju izmjene i korelacije, koja, po definiciji, sadrži sve ostale višečestične efekte. Odgovarajući lokalni potencijal izmjene i korelacije je definiran kao:

$$v_{xc}[\rho](\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})}. \tag{2.60}$$

Stoga je lokalni jednočestični potencijal dan s:

$$v_s[\rho](\mathbf{r}) = v_H[\rho](\mathbf{r}) + v_{xc}[\rho](\mathbf{r}). \tag{2.61}$$

Kako efektivni potencijal ovisi o gustoći osnovnog stanja, sustav jednadžbi (2.57), (2.58) i (2.61) se mora riješiti samosuglasno. Opisani postupak je Kohn-Shamova shema teorije funkcionala gustoće. Kohn-Shamova shema ide dalje od Hartree-Fockove aproksimacije pošto uključuje i korelacijske efekte, međutim korisnost ovakovog pristupa ovisi o tome koliko smo sposobni konstruirati dovoljno točnu aproksimaciju egzaktne energije korelacije i izmjene. Pravi funkcional energije korelacije i izmjene je univerzalan te poprima isti funkcionalni oblik u svim sustavima. Jedan mogući pristup je formulacija E_{xc} iz osnovnih načela, korištenjem poznatih egzaktnih ograničenja. No, čak i kad bi se formulirao funkcional s potpuno mikroskopskim temeljima, njegovi bi se parametri i dalje u određenoj mjeri morali prilagođavati eksperimentalnim podacima jer nukleon-nukleon raspršenja i svojstva nuklearne tvari jednostavno ne mogu odrediti funkcional do preciznosti potrebne za opis srednje teških i teških jezgara. Drugi pristup je empirijski - parametarski *ansatz* se optimizira prilagodbom na skup eksperimentalnih podataka.

Hohenberg-Kohn teorem i samosuglasni Kohn-Sham postupak imaju relativističko proširenje. Relativističku Kohn-Sham jednadžbu za pomoćni neinteragirajući sustav u ovom slučaju predstavlja jednočestična Diracova jednadžba s lokalnim četveropotencijalom koji ovisi o četverostrujama u osnovnom stanju.

2.2.3 *Point-coupling* modeli

Osnovni elementi relativističkog nuklearnog energijskog funkcionala gustoće su gustoće i struje bilinearne u Diracovom spinornom polju ψ nukleona: $\bar{\psi}\mathcal{O}_\tau\Gamma\psi$, uz $\mathcal{O}_\tau \in \{1, \tau_i\}$ i $\Gamma \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5\gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}$. τ_i su izospinske Paulijeve matrice, a Γ općenito označava Diracove matrice. Općenito kovarijantni lagranžijan se može napisati kao red potencija struja $\bar{\psi}\mathcal{O}_\tau\Gamma\psi$ i njihovih derivacija. Funkcional točkastog vezanja (engl. *point-coupling*) ili model srednjeg polja s točkastim vezanjem (PC-RMF) je, strukturno gledajući, osobito jednostavan jer uključuje samo kontaktna vezanja između struja. U obzir uzimamo sljedeće kanale: izoskalar-skalar $(\bar{\psi}\psi)^2$, izoskalar-vektor $(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)$ i izovektor-vektor $(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)\cdot(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)$. Lagranžijan PC-RMF modela sadrži četverofermionske (kontaktne) članove interakcije:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = &\bar{\psi}(i\gamma\cdot\partial - m)\psi \\ &- \frac{1}{2}\alpha_s(\hat{\rho}_v)(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_v(\hat{\rho}_v)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) \\ &- \frac{1}{2}\alpha_{tv}(\hat{\rho}_v)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \\ &- \frac{1}{2}\delta_s(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) - e\bar{\psi}\gamma\cdot A\frac{(1-\tau_3)}{2}\psi\end{aligned} \tag{2.62}$$

Zadnji član u izrazu definira vezanje protona na elektromagnetski četveropotencijal. Član s derivacijom u (2.62) je odgovoran za efekte višeg reda iz razvoja matrice gustoće konačnog dosega i korelacijske efekte [44,45]. Iako bi se u svaki spin-izospin kanal mogao uključiti član s derivacijom, u praksi podaci iz osnovnog stanja mogu ograničiti samo jedan član s derivacijom. Naš funkcional implementira taj član u izoskalar-skalar kanalu. Parametri snage α_c interakcijskih članova u (2.62) su ovisni o gustoći i funkcionali su $\sqrt{j^\mu j_\mu}$, gdje je $j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ nukleonska četverostruja. Na niskim brzinama, koje su važne za naše razmatranje, parametri α_c ovise samo o barionskoj gustoći $\hat{\rho}_v = \psi^\dagger\psi$. Jednonukleonska Diracova jednadžba (tj. relativistički analog Kohn-Shamove jednadžbe [5]) se dobiva varijacijom lagranžijana po $\bar{\psi}$. Varijacijom se dobiva:

$$\left[\gamma_\mu(i\partial^\mu - \Sigma^\mu - \Sigma^\mu_R) - (m + \Sigma_S)\right]\psi = 0, \tag{2.63}$$

gdje su nukleonske vlastite energije definirane sljedećim relacijama:

$$\Sigma^\mu = \alpha_v(\rho_v)j^\mu + e\frac{(1-\tau_3)}{2}A^\mu \tag{2.64}$$

$$\Sigma^\mu_R = \frac{1}{2}\frac{j^\mu}{\rho_v}\left\{\frac{\partial\alpha_s}{\partial\rho}\rho_s^2 + \frac{\partial\alpha_v}{\partial\rho}j_\mu j^\mu + \frac{\partial\alpha_{tv}}{\partial\rho}\vec{j}_\mu\vec{j}^\mu\right\} \tag{2.65}$$

$$\Sigma_S = \alpha_s(\rho_v)\rho_s - \delta_s\Box\rho_s \tag{2.66}$$

$$\Sigma^\mu_{TV} = \alpha_{tv}(\rho_v)\vec{j}^\mu. \tag{2.67}$$

Uz doprinose iz izoskalar-vektor četverofermionske interakcije i elektromagnetske interakcije, vlastita energija izoskalar-vektora uključuje i članove Σ^μ_R koji proizlaze iz

varijacije vršnih funkcionala α_s, α_v i α_{tv} po nukleonskim poljima u operatoru vektorske gustoće $\hat{\rho}_v$. Vlastite energije Σ su osobito važne u nerelativističkoj granici [46]. Osobito je zanimljiv odnos između skalarne Σ_S i vektorske komponente Σ^0. Nerelativistički lokalni potencijal srednjeg polja je određen sumom $\Sigma_S + \Sigma^0$, koja je relativno malena jer su ove vlastite energije suprotnih predznaka. Razlika $\Sigma_S - \Sigma^0$, međutim, je velika i objašnjava komparativno velike energijske procjepe između spin-orbit partnerskih stanja [47]. Sume i razlike vlastitih energije izoskalar-skalar i izoskalar-vektor kanala objašnjavaju vrlo različite fizikalne efekte.

Na razini srednjeg polja nuklearno osnovno stanje $|\phi_0\rangle$ je samosuglasno rješenje sustava jednadžbi (2.63)-(2.67), uzimajući u obzir da su izoskalarna i izovektorska četverostruja osnovnog stanja i skalarna gustoća definirane kao očekivane vrijednosti:

$$j_\mu = \langle\phi_0|\bar{\psi}\gamma_\mu\psi|\phi_0\rangle = \sum_{k=1}^{N} v_k^2 \bar{\psi}_k \gamma_\mu \psi_k, \tag{2.68}$$

$$\vec{j}_\mu = \langle\phi_0|\bar{\psi}\gamma_\mu\vec{\tau}\psi|\phi_0\rangle = \sum_{k=1}^{N} v_k^2 \bar{\psi}_k \gamma_\mu \vec{\tau} \psi_k, \tag{2.69}$$

$$\rho_s = \langle\phi_0|\bar{\psi}\psi|\phi_0\rangle = \sum_{k=1}^{N} v_k^2 \bar{\psi}_k \psi_k, \tag{2.70}$$

gdje su ψ_k Diracovi spinori, suma ide preko popunjenih jednočestičnih orbitala pozitivne energije, a v_k^2 su odgovarajući faktori koji opisuju popunjenost pojedine orbitale. Jednonukleonske Diracove jednadžbe se riješavaju samosuglasno u "*no-sea*" aproksimaciji kojom se isključuju doprinosi rješenja negativne energije [14, 46, 48].

U fenomenološkoj konstrukciji relativističkog energijskog funkcionala gustoće počinje se od pretpostavke, *ansatza*, ovisnosti vlastitih energija nukleona u srednjem polju o mediju u kojem se nalaze. Potom se slobodni parametri prilagođavaju izravno na poznate podatke o jezgrama u osnovnom stanju. U ovom radu koristimo sljedeći *ansatz* za funkcionalni oblik vezanja, temeljen na mikroskopskoj ovisnosti vektorskih i skalarnih vlastitih energija o gustoći [49]:

$$\alpha_i(\rho) = a_i + b_i\left(1 - e^{-d_i(x-1)}\right) + c_i(x-1)e^{-d_i(x-1)}, \quad i = s, v, tv \tag{2.71}$$

uz $x = \rho/\rho_0$, gdje ρ_0 označava gustoću nukleona u točki saturacije simetrične nuklearne materije.

2.3 Relativistički Hartree-Bogoliubov model

Relativistički energijski funkcionali gustoće se uspješno primjenjuju u analizama svojstava osnovnih i pobuđenih stanja u sfernim i deformiranim jezgrama. Kako bi se napravio kvantitativni opis jezgara otvorenih ljusaka moraju se uzeti u obzir i korelacije sparivanja. Relativistički Hartree-Bogoliubov (RHB) model, koji predstavlja

relativističko proširenje konvencionalne Hartree-Fock-Bogoliubov teorije, pruža ujedinjeni opis čestica-šupljina (ph) i čestica-čestica (pp) korelacija na razini srednjeg polja. Pritom se koriste dva usrednjena potencijala: samosuglasno srednje polje koje uključuje dugodosežne ph korelacije i polje sparivanja $\hat{\Delta}$ koje sumira pp korelacije. Osnovno stanje jezgre je opisano generaliziranom Slaterovom determinantom $|\Phi\rangle$ koja predstavlja vakuum obzirom na nezavisne kvazičestice. Kvazičestični operatori su definirani unitarnom Bogoliubovljevom transformacijom jednonukleonskih operatora stvaranja i poništenja:

$$\alpha_k^\dagger = \sum_l U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l, \tag{2.72}$$

gdje su U i V Hartree-Bogoliubovljeve valne funkcije. One su određene rješenjem RHB jednadžbe koja se dobiva varijacijom energijskog funkcionala:

$$\begin{pmatrix} h_D - m - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h_D^* + m + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \tag{2.73}$$

h_D odgovara jednonukleonskom Diracovom hamiltonijanu iz jednadžbe (2.63), m je masa nukleona, λ kemijski potencijal, a Δ polje sparivanja. Polje sparivanja Δ je dano relacijom

$$\Delta_{ab}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2} \sum_{c,d} V_{abcd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \kappa_{cd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \tag{2.74}$$

gdje su $V_{abcd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ matrični elementi dvočestične interakcije sparivanja, a indeksi a,b,c i d označavaju kvantne brojeve kojima su određeni Diracovi indeksi spinora. Vektor stupci u (2.73) predstavljaju kvazičestične valne funkcije, a E_k kvazičestične energije.

Jednočestičnu matricu gustoće i tenzor sparivanja je moguće izraziti preko kvazičestičnih valnih funkcija

$$\rho_{cd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{k>0} V_{ck}^*(\mathbf{r}) V_{dk}(\mathbf{r}') \tag{2.75}$$

$$\kappa_{cd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{k>0} V_{ck}^*(\mathbf{r}) U_{dk}(\mathbf{r}'). \tag{2.76}$$

Njih računamo u *no-sea* aproksimaciji, označenu s $k > 0$. Sumacija ide preko svih kvazičestičnih stanja k pozitivnih kvazičestičnih energija $E_k > 0$, ali se izostavljaju stanja koja potječu iz Diracovog mora. Ta stanja karakteriziraju kvazičestične energije veće od procjepa između Diracovog i Fermijevog mora (≈ 1200 MeV).

Jednadžbe (2.73) se riješavaju razvojem jednočestičnih nukleonskih spinora u bazu 3D harmoničkog oscilatora u Kartezijevim koordinatama. Pregled takvog razvoja za sferne i deformirane jezgre dan je u dodatku B.

3 Prilagodba parametara

Parametre a_i, b_i i c_i u ansatzu (2.71) smo povezali s veličinama koje opisuju svojstva simetrične beskonačne nuklearne materije u točki saturacije - nukleonska gustoća ρ_0, energija vezanja ϵ_0, modul kompresibilnosti K_∞, Diracova masa m_D, energija simetrije a_4, nagib energije simetrije L_0. Uz njih imamo još konstantu vezanja derivacije izoskalar-skalar kanala u lagranžijanu δ_s i početne parametre d_s i d_v koje smo ostavili slobodnima. Te veličine, "pseudopodaci" će biti novi parametri našeg modela. Postoji par prednosti ovakvom pristupu parametrima funkcionala. Prvo, za lagranžijanske parametre postoji jedinstveno algebarsko rješenje, izraženo preko svojstava beskonačne nuklearne materije, što čini teoriju dobro definiranom. Drugo, parametri su se razvili od apstraktnih konstanti vezanja do veličina s preciznim fizikalnim značenjem i vrijednostima koje su eksperimentalno vrlo dobro određene. Usto, kako se optimizacijska shema oslanja na eksperimentalne podatke, na kraju te procedure dobivamo prava teorijska predviđanja svih *bulk* svojstava i njima svojstvene stupce pogrešaka. Ta predviđanja se potom mogu usporediti s drugim teorijskim pristupima koji bi mogli premostiti *ab initio* račune i fenomenološke pristupe [19]. Veza između početnih, lagranžijanskih parametara i ovih veličina izvedena je u dodatku A. Odabrani skup parametara je prilagođen sukladno optimizacijskoj shemi iznesenoj u potpoglavlju 2.1 koristeći programski paket `MINUIT` [50]. Više o numeričkoj implementaciji optimizacijske sheme može se naći u dodatku C. Rezultati minimizacije su dani u tablici 3.1.

Tablica 3.1: Vrijednosti parametara predstavljenog relativističkog energijskog funkcionala gustoće. Vrijednost mase nukleona je fiksirana na $m = 939$ MeV.

PARAMETAR	p_i	σ_i
ρ_0 (fm^{-3})	0.1495	0.0004
ϵ_0 (MeV)	-15.99	0.02
K_∞ (MeV)	218	2
m_D/m	0.585	0.003
a_4 (MeV)	32.2	0.5
L_0 (MeV)	64	5
d_s	1.53	0.03
d_v	0.74	0.05
δ_s (fm^4)	-0.838	0.006

Minimum kaznene funkcije χ^2 tj. točka $\mathbf{p}_0$ u F-dimenzionalnom parametarskom prostoru predstavlja optimalni model nad kojim ćemo provesti statističku analizu. Kako bismo promotrili jedinstvenost modela (definirana u [42]) analizirat ćemo jednostavan sustav za koji energijski funkcional gustoće daje definitivna predviđanja -

beskonačnu nuklearnu materiju. Definiramo skup opservabli ovog sustava pomoću kojih će se izračunati $\chi^2(\mathbf{p})$. Model je jedinstven ako su sve svojstvene vrijednosti $F \times F$ matrice drugih derivacija $\hat{\mathcal{M}}$ u (2.12) velike, tj. ako svi svojstveni vektori odgovaraju tvrdim smjerovima u parametarskom prostoru. Duž takvih smjerova funkcija χ^2 se brzo povećava pa su odgovarajuće linearna kombinacije parametara čvrsto ograničene odabranim opservablama.

U tablici 3.2 prikazane su energije vezanja i nabojni radijusi u osnovnom stanju za jezgre uključene u optimizacijski proces novog funkcionala. Eksperimentalni podaci za energije vezanja preuzeti su sa [51], a za nabojne radijuse iz [52]. Vidimo da naš model daje izvrsna predviđanja i za energije vezanja i nabojne radijuse u osnovnom stanju.

Tablica 3.2: Eksperimentalni podaci za energije vezanja i nabojne radijuse u osnovnom stanju [51, 52] jezgara korištenih u optimizaciji. U tablici su također prikazani i teorijski rezultati dobiveni pomoću novog funkcionala.

Jezgra	Opservabla	Eksperiment	Model
^{16}O	E_{tot} (MeV)	-127.62	-127.52
	r_c (fm)	2.70	2.74
^{40}Ca	E_{tot} (MeV)	-342.05	-343.00
	r_c (fm)	3.48	3.46
^{48}Ca	E_{tot} (MeV)	-416.00	-416.10
	r_c (fm)	3.48	3.49
^{68}Ni	E_{tot} (MeV)	-590.40	-591.99
	r_c (fm)	-	3.88
^{90}Zr	E_{tot} (MeV)	-783.89	-782.21
	r_c (fm)	4.27	4.27
^{100}Sn	E_{tot} (MeV)	-825.30	-826.33
	r_c (fm)	-	4.47
^{116}Sn	E_{tot} (MeV)	-988.68	-985.37
	r_c (fm)	4.63	4.62
^{132}Sn	E_{tot} (MeV)	-1102.84	-1104.04
	r_c (fm)	4.71	4.73
^{144}Sm	E_{tot} (MeV)	-1195.73	-1194.77
	r_c (fm)	4.95	4.96
^{208}Pb	E_{tot} (MeV)	-1636.43	-1634.08
	r_c (fm)	5.50	5.53

Simetrična 9×9 matrica $\mathcal{M}$ drugih derivacija $\chi^2(\mathbf{p})$ u točki $\mathbf{p}_0$ je dijagonalizirana pomoću ortogonalne transformacije. Dijagonalni matrični elementi u padajućem redoslijedu vrijednosti, kao i komponente odgovarajućih svojstvenih vektora, prikazani

su na slici 3.1. Tvrdi smjerovi u parametarskom prostoru su obilježeni velikim svojstvenim vrijednostima, tj. funkcija χ^2 brzo raste duž tih smjerova. To znači da su te linearne kombinacije parametara koje odgovaraju tvrdim svojstvenim vektorima čvrsto ograničene opservablama u tablici 3.1. S druge strane, male svojstvene vrijednosti odgovaraju mekanim smjerovima u parametarskom prostoru, duž kojih mjera kvalitete χ^2 pokazuje maleno propadanje. Odgovarajuće linearne kombinacije parametara koje definiraju energijski funkcional gustoće su slabo ograničene.

Prvim, najtvrđim modom s najvećom svojstvenom vrijednošću na slici 3.1 dominira energija vezanja ϵ_0. Drugi mod je obilježen mješavinom četiri parametra, saturacijska gustoća ρ_0, energija vezanja ϵ_0, efektivna Diracova masa m_D i parametar δ_s, koji osciliraju u fazi. Treći mod je obilježen oscilacijama izvan faze energije vezanja i Diracove mase. Četvrtim modom izrazito dominira modul kompresibilnosti K_∞. Peti mod je određen s parametrima d_s i δ_s. Šestim modom izrazito dominira energija simetrije a_4, dok je sedmi mod mješavina parametara d_s i m_D te K_∞ i δ_s koji se nalaze izvan faze.

Osmim modom gotovo u cjelosti dominira parametar d_v uz malu primjesu d_s u protufazi, dok najmekanijim, devetim modom u cjelosti dominira nagib energije simetrije L_0. Iz ovoga se može zaključiti da su d_v i L_0 slabo ograničeni korištenim opservablama.

Nepouzdanosti, varijance parametara modela su dane matricom kovarijanci tj. dijagonalnim elementima inverza matrice $\hat{\mathcal{M}}^{-1}$ drugih derivacija χ^2

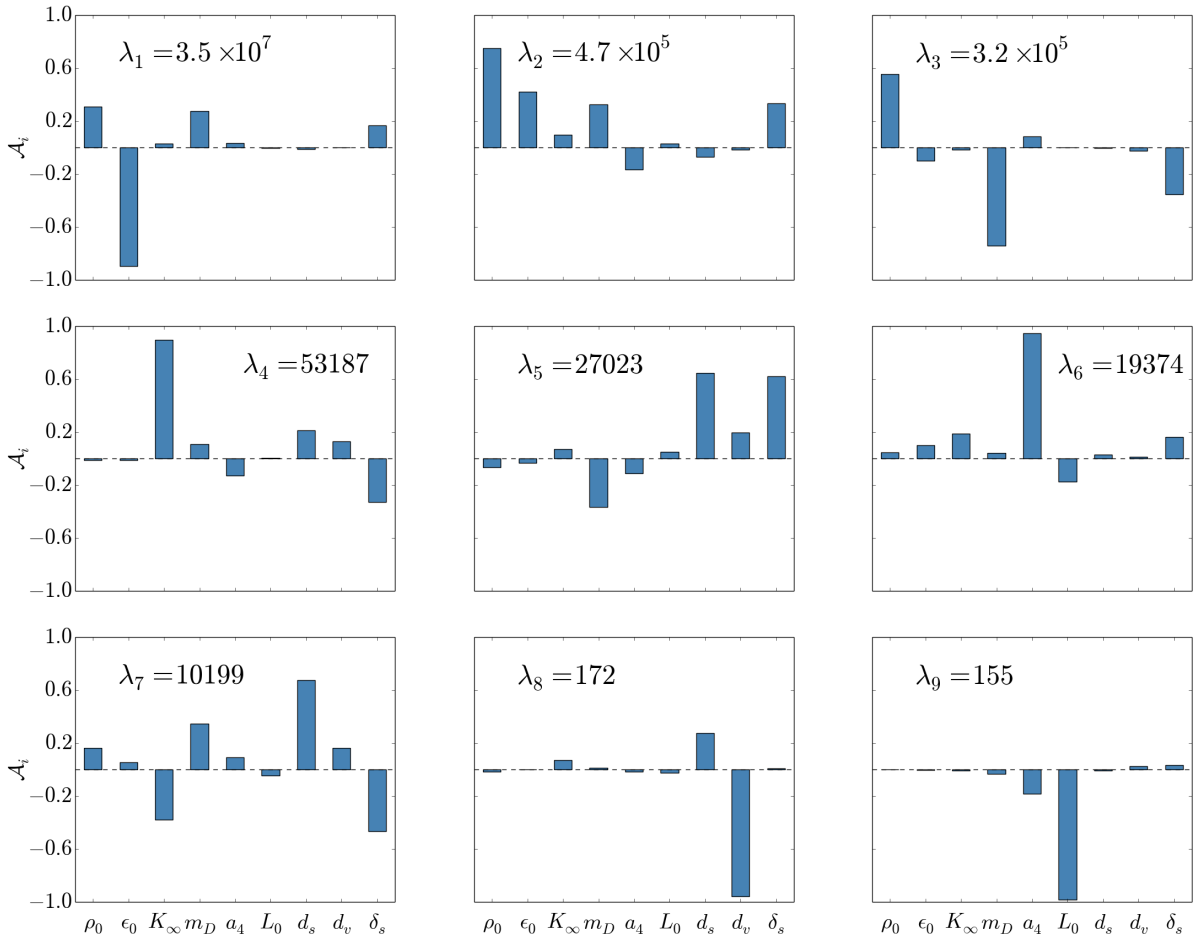
$$\sigma_i^2 = \left(\hat{\mathcal{M}}^{-1}\right)_{ii} = \left(\hat{O}\hat{\mathcal{D}}^{-1}\hat{O}^T\right)_{ii} = \sum_{j=1}^{9} \hat{O}_{ij}\lambda_j^{-1}. \tag{3.1}$$

Na slici 3.2 je za svaki parametar $p_i = p_{0i}(1 \pm \sigma_i)$ nepouzdanost σ_i izražena u postocima. Može se vidjeti da su nepouzdanosti najveće za parametre L_0 i d_v ($\approx 7 - 8\%$), upravo one parametre koji dominiraju najmekanijim modovima, dok su nepouzdanosti najmanje za parametre ρ_0 i ϵ_0 ($\leq 1\%$) koji dominiraju najtvrđim modovima. Iz ovih rezultata se da vrlo jasno isčitati kako određen izbor, *ansatz* ovisnosti funkcionala vezanja o gustoći može dovesti do velikih nepouzdanosti modela.

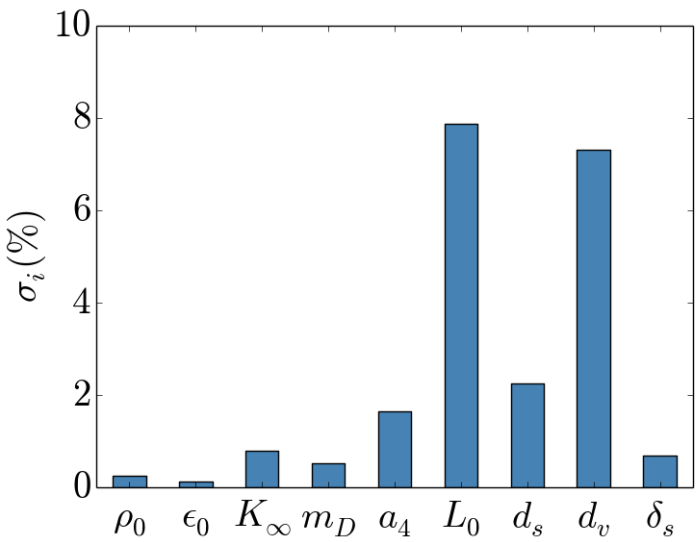
Korelacijske koeficijente između parametara modela određuju nedijagonalni elementi matrice kovarijanci:

$$\rho(p_i, p_j) = \frac{\hat{\mathcal{M}}_{ij}^{-1}}{\sqrt{\hat{\mathcal{M}}_{ii}^{-1}\hat{\mathcal{M}}_{jj}^{-1}}}. \tag{3.2}$$

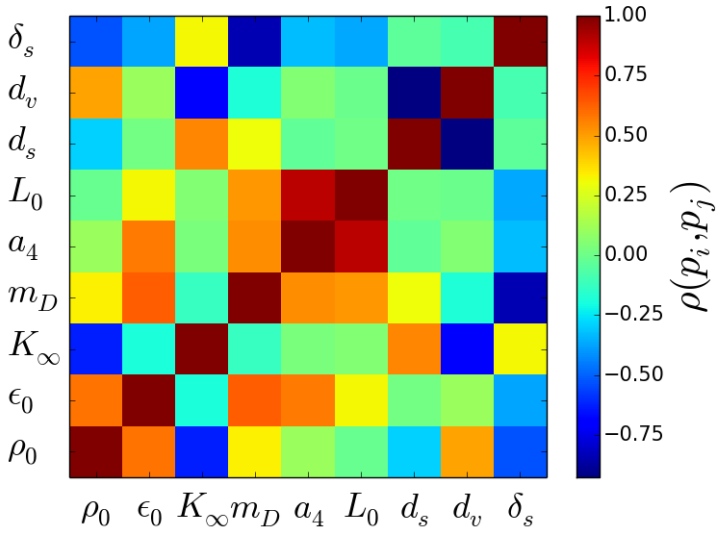
Na slici 3.3 prikazane su vrijednosti 36 nezavisnih koeficijenata korelacije parametara modela. Mogu se primjetiti jake korelacije između energije simetrije a_4 i njenog nagiba L_0, što je bilo očekivano, kao i jaka antikorelacija između parametara d_v i d_s. Također se može primjetiti značajna antikorelacija između Diracove mase i parametra δ_s. Umjerene korelacije su primjetne između energije vezanja i Diracove mase,



Slika 3.1: Svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori matrice $\hat{\mathcal{M}}$ drugih derivacija $\chi^2(\mathbf{p})$ za kombinaciju simetrične nuklearne tvari i konačnih jezgara za predstavljeni funkcional.



Slika 3.2: Nepouzdanosti σ_i parametara modela prikazane u postocima. Rezultati odgovaraju izračunu u kombinaciji opservabli beskonačne nuklearne materije i konačnih jezgara.



Slika 3.3: Prikaz 36 nezavisnih korelacijskih koeficijenata za 9 parametara modela koji doprinose izračunima beskonačne nuklearne materije i konačnih jezgara.

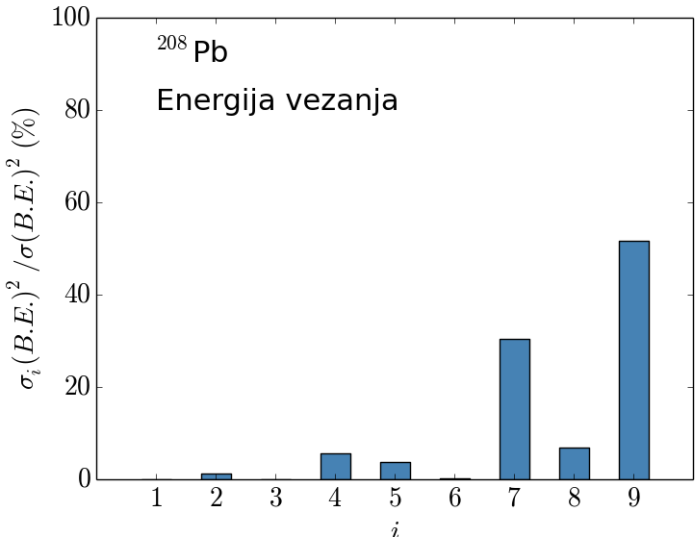
zbog doprinosa mase nukleona u izrazu za energiju, kao i između energije vezanja i gustoće saturacije.

Model je na sličan način analiziran i na opservablama konačnih jezgara u osnovnom stanju. Analiza je provedena na primjeru jezgre ^{208}Pb. U tablici 3.3 dan je skup od 6 odabranih opservabli jezgre ^{208}Pb u osnovnom stanju, njihove vrijednosti te varijance generirane novim funkcionalom. Na slici 3.4 prikazan je relativni doprinos devet linearnih kombinacija parametara modela koji odgovaraju svojstvenim vektorima matrice drugih derivacija $\hat{\mathcal{M}}$ varijancama energije vezanja. Vidljivo je kako najveći doprinos daje deveti mod koji je najmekaniji i kojim dominira nagib energije simetrije L_0. Sljedeći po veličini doprinos daje sedmi mod koji je također među najmekanijim modovima i koji odgovara doprinosima izvan faze parametra d_s i Diracove mase m_D s jedne strane i δ_s i modula kompresibilnosti K_∞ s druge strane. Uz ta dva moda, nešto izraženiji doprinos daje i osmi mod, drugi po mekanosti, kojim dominira parametar modela d_v. Činjenica da najveće doprinose varijancama daju najmekaniji modovi, tj. kombinacije parametara koje su slabo ograničene skupom opservabli iskorištenima u određivanju $\chi^2(\mathbf{p})$ funkcije ukazuje na moguće mane odabira *ansatza* za ovisnost funkcionala vezanja o gustoći.

Slično analizi korelacija parametara, na slici 3.5 prikazane su vrijednosti korelacijskih koeficijenata za opservable jezgre ^{208}Pb, iz tablice 3.3. Očite su jake korelacije između protonskog radijusa r_p i difrakcijskog radijusa r_{dif} te protonskog radijusa i debljine površine t. To nam govori da bismo iz poznavanja jedne od ovih opservabli mogli odmah dobiti informacije i o drugom, bez potrebe da obje opservable mjerimo. Uz njih, primjetna je značajna korelacija između debljine površine i difrakcijskog radijusa te umjerena korelacija između neutronskog radijusa r_n i razlike radijusa protona i neutrona $r_n - r_p$. Jaka antikorelacija je vidljiva između ukupne

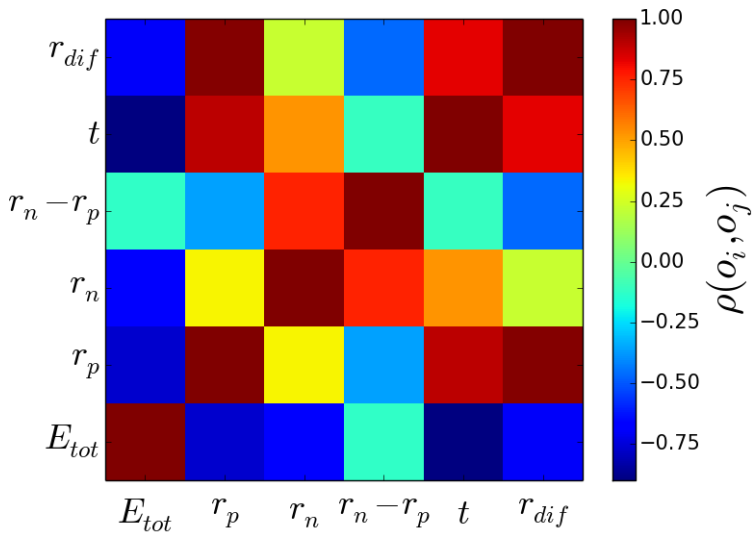
Tablica 3.3: Vrijednosti i varijance skupa opservabli jezgre ^{208}Pb dobivene novim funkcionalom gustoće.

OPSERVABLA	o_i	σ_i
E_{tot} (MeV)	-1634	12
r_p (fm)	5.471	0.007
r_n (fm)	5.663	0.009
$r_n - r_p$ (fm)	0.192	0.009
t (fm)	0.9115	0.0006
r_{dif} (fm)	6.828	0.001



Slika 3.4: Relativni doprinosi, izraženi u postocima, devet linearnih kombinacija parametara modela koji odgovaraju svojstvenim vektorima matrice drugih derivacija $\hat{\mathcal{M}}$ (slika 3.1) varijanci energije vezanja jezgre ^{208}Pb.

energije E_{tot} i debljine površine. Umjerene antikorelacije postoje između energije te protonskog, neutronskog i difrakcijskog radijusa.



Slika 3.5: Prikaz korelacijskih koeficijenata za reprezentativni skup opservabli jezgre ^{208}Pb. Skup opservabli uključuje energiju vezanja E_{tot}, protonski r_p i neutronski r_n radijus, njihovu razliku $r_n - r_p$, debljinu površine t i difrakcijski radijus r_{dif}.

4 Ilustrativni računi

U ovom poglavlju predstavljeni su rezultati ilustrativnih računa energija vezanja, deformacija, nabojnih radijusa u osnovnom stanju niza nuklida kojima je testiran novi funkcional. Rezultati su uspoređeni s dostupnim eksperimentalnim podacima i predviđanjima funkcionala DD-PC1 [30], koji je također iz porodice funkcionala s točkastim vezanjem.

Na slici 4.6 prikazane su devijacije izračunatih energija vezanja po nukleonu od eksperimentalnih vrijednosti kao funkcije izospinske asimetrije

$$\alpha^2 = \frac{(N-Z)^2}{A^2} \tag{4.3}$$

i masenog broja A. Rezultati našeg novog funkcionala se mogu usporediti s istovjetnim računima za 64 aksijalno deformirane jezgre srodnog funkcionala DD-PC1 na slici 4.7. Kod oba funkcionala se ne može primjetiti vidljiva izotopska ili masena ovisnost devijacija. Međutim, vidljiva je razlika u redu veličine devijacija između novog funkcionala i DD-PC1. Dok su devijacije kod DD-PC1 do 1 MeV, kod novog funkcionala one ne prelaze 0.08 MeV.

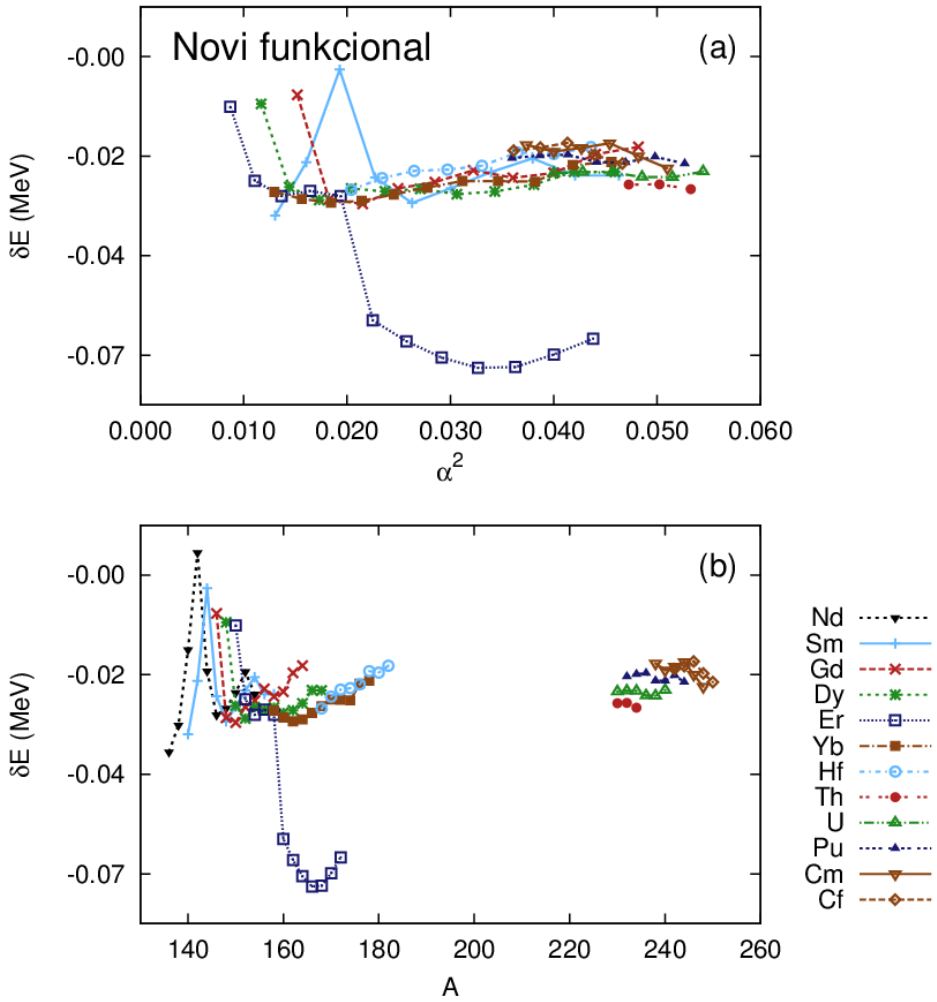
Funkcional je potom testiran izračunima svojstava aksijalno deformiranih srednje teških i teških jezgara u osnovnom stanju, kao što su nabojni radijus i parametar kvadrupolne deformacije. Nabojni radijus je izračunat pomoću formule:

$$r_c = \sqrt{r_p^2 + 0.64} \quad \text{(fm)}, \tag{4.4}$$

gdje r_p označava r.m.s. radijus raspodjele gustoće protona, dok je član 0.64 fm^2 uključen zbog konačne veličine protona.

Deformacije jezgara se često opisuju Hill-Wheelerovim varijablama β i γ. Parametar β daje mjeru deformacije, a γ odstupanje od aksijalne simetrije. Najčešće i najjednostavnije deformacije atomskih jezgara su kvadrupolne. Njih opisujemo parametrom deformacije β_2. U slučaju aksijalne simetrije za pozitivne vrijednosti $\beta_2 > 0$ jezgra je ispupčena na polovima, duž osi simetrije, ima oblik cigare (engl. *prolate shape*), dok je za negativne vrijednosti $\beta_2 < 0$ ispupčena na ekvatoru, spljoštena poput palačinke (engl. *oblate shape*).

Na slikama 4.8 i 4.9 dane su vrijednosti parametra deformacije β_2 i nabojnog radijusa r_c dobivene samosuglasnim 3D RHB računima za izotopske lance Th, U, Pu, Cm i Cf u osnovnom stanju. Kako se Dirac-Hartree-Bogoliubov jednadžbe (2.73) riješavaju razvojem u bazi 3D harmoničkog oscilatora, bitno je uzeti dovoljan broj oscilatorskih ljusaka. U našem slučaju to je $N_{max} = 16$ ljusaka. Rezultati su uspoređeni s dostupnim eksperimentalnim podacima [51, 52]. Može se primjetiti kako vrijednosti predviđene novim funkcionalom reproduciraju smjer kretanja empirijskih vrijednosti parametra deformacije u izotopskim lancima, te su u većini slučajeva u dobrom ili izvrsnom slaganju s njima. S druge strane, kod rezultata za nabojni radijus vidimo da model za sve izotopske lance predviđa vrijednosti veće od empirijskih. To je najviše

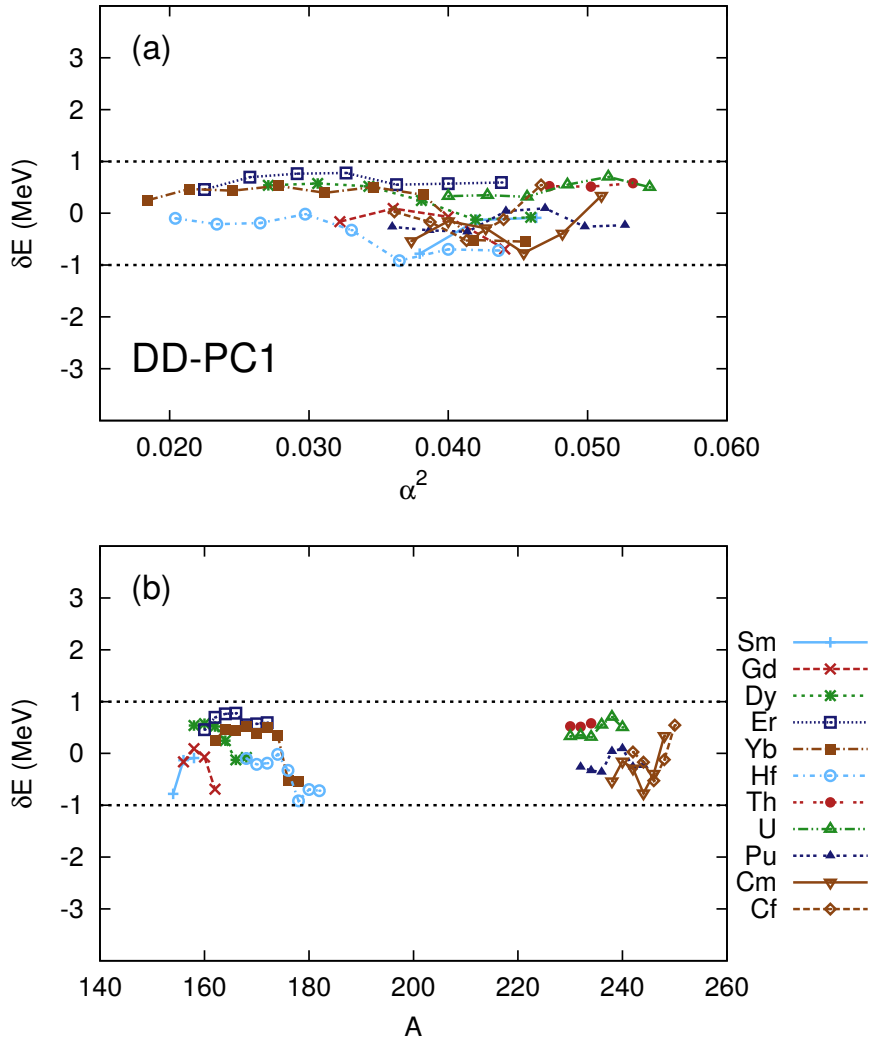


Slika 4.6: Devijacije izračunatih energija vezanja po nukleonu E/A od eksperimentalnih vrijednosti [51] 111 jezgara, kao funkcije koeficijenta asimetrije (a) i masenog broja (b). Linije povezuju jezgre koje pripadaju istim izotopskim lancima, prikazanima na legendi.

izraženo kod Cm gdje su odstupanja do 0.13 fm. Unatoč tome i naš model reproducira rastući smjer kretanja vrijednosti s porastom masenog broja za svaki izotopski lanac.

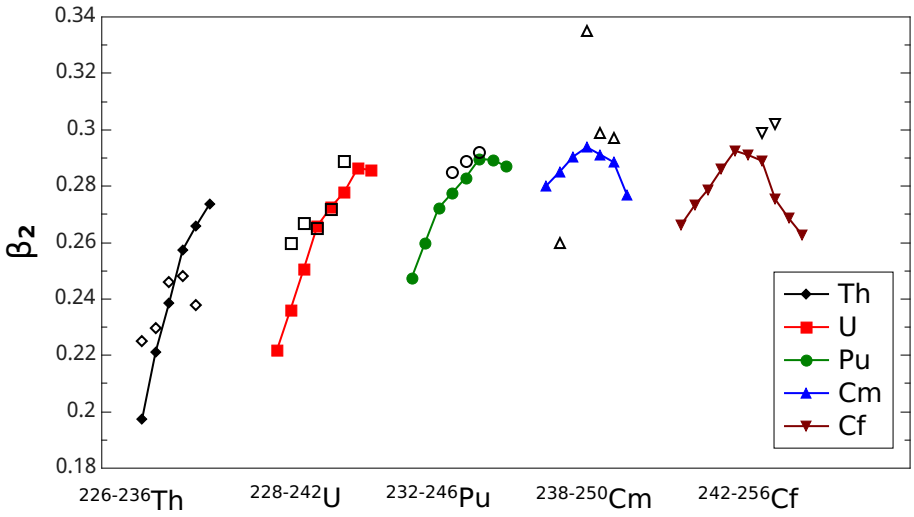
Na slikama (4.10) i (4.11) prikazane su predviđene vrijednosti nabojnog radijusa i parametra deformacije za izotopske lance elemenata rijetkih zemalja - Nd, Sm, Gd, Dy, Er i Yb. Vrijednosti su uspoređene s eksperimentalnim vrijednostima [53, 54] i predviđanjima funkcionala DD-PC1. Teorijske vrijednosti nabojnih radijusa su u dobrom slaganju s eksperimentalnim podacima, no vidljivo je da su ponešto više od njih. DD-PC1 daje nešto bolja predviđanja za nabojni radijus, iako i taj funkcional daje nešto viša predviđanja, što je vidljivo kod težih izotopa Er i Yb.

Teorijska predviđanja vrijednosti kvadrupolnog parametra deformacije je u izvrsnom slaganju s eksperimentalnim podacima. Usto, novi funkcional daje nešto bolja

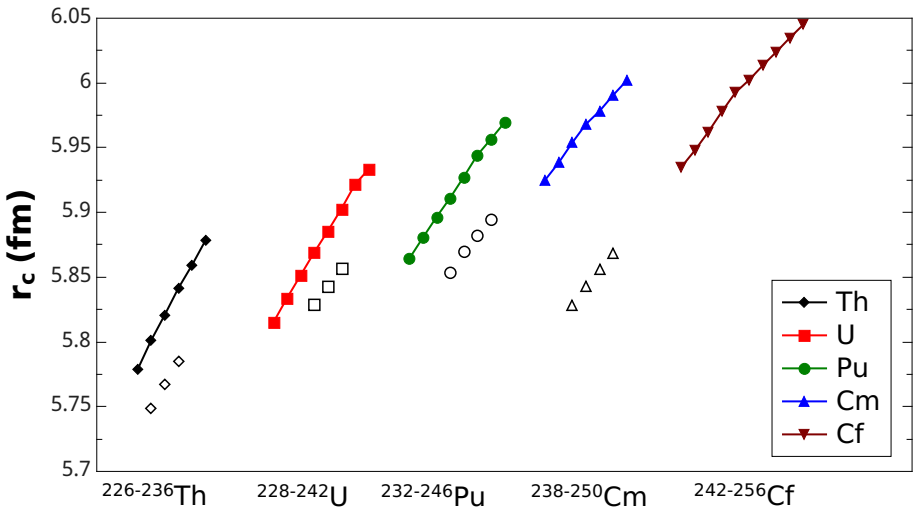


Slika 4.7: Devijacije izračunatih energija vezanja po nukleonu E/A od eksperimentalnih vrijednosti 64 aksijalno deformiranih jezgara, kao funkcije koeficijenta asimetrije (a) i masenog broja (b). Linije povezuju jezgre koje pripadaju istim izotopskim lancima, prikazanima na legendi. Teorijske vrijednosti energija vezanja izračunate su pomoću relativističkog funkcionala gustoće DD-PC1. Preuzeto iz [30].

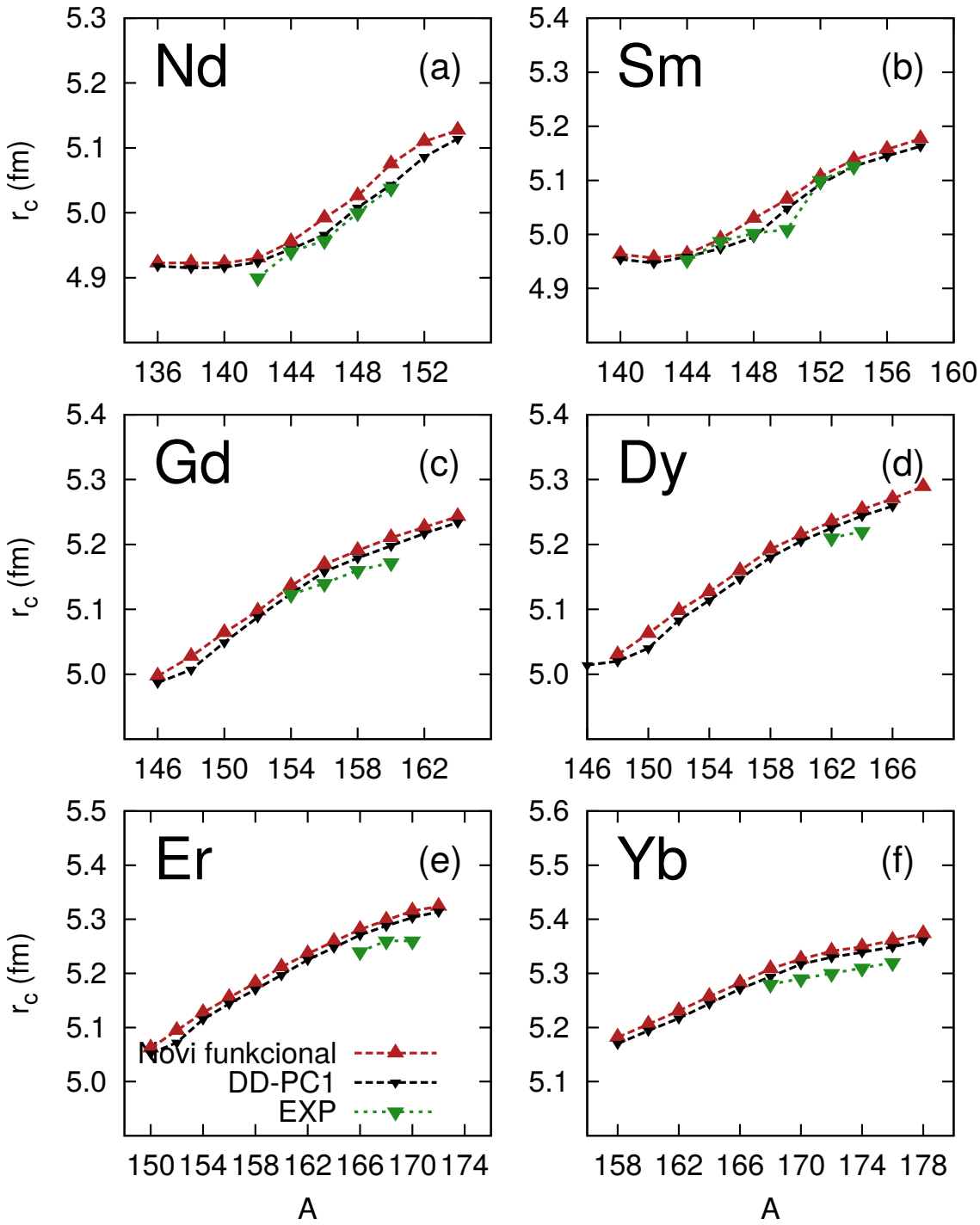
predviđanja od DD-PC1. Uočljiva odstupanja se nalaze oko $N = 82$ zatvorene ljuske Nd i Sm izotopa, gdje oba funkcionala predviđaju sferni oblik ili vrlo blagu deformaciju *oblate* vrste, dok eksperimentalni podaci ukazuju na blagu deformaciju *prolate* vrste. Radi se o jezgrama s blagom potencijalnom plohom, što može dovesti do koegzistencije oblika (sferni-deformirani ili prolate-oblate oblici). Opis koegzistirajućih oblika mora uključivati dugodosežne korelacije i zahtijeva projekciju angularnog momenta i miješanje konfiguracija [55, 56].



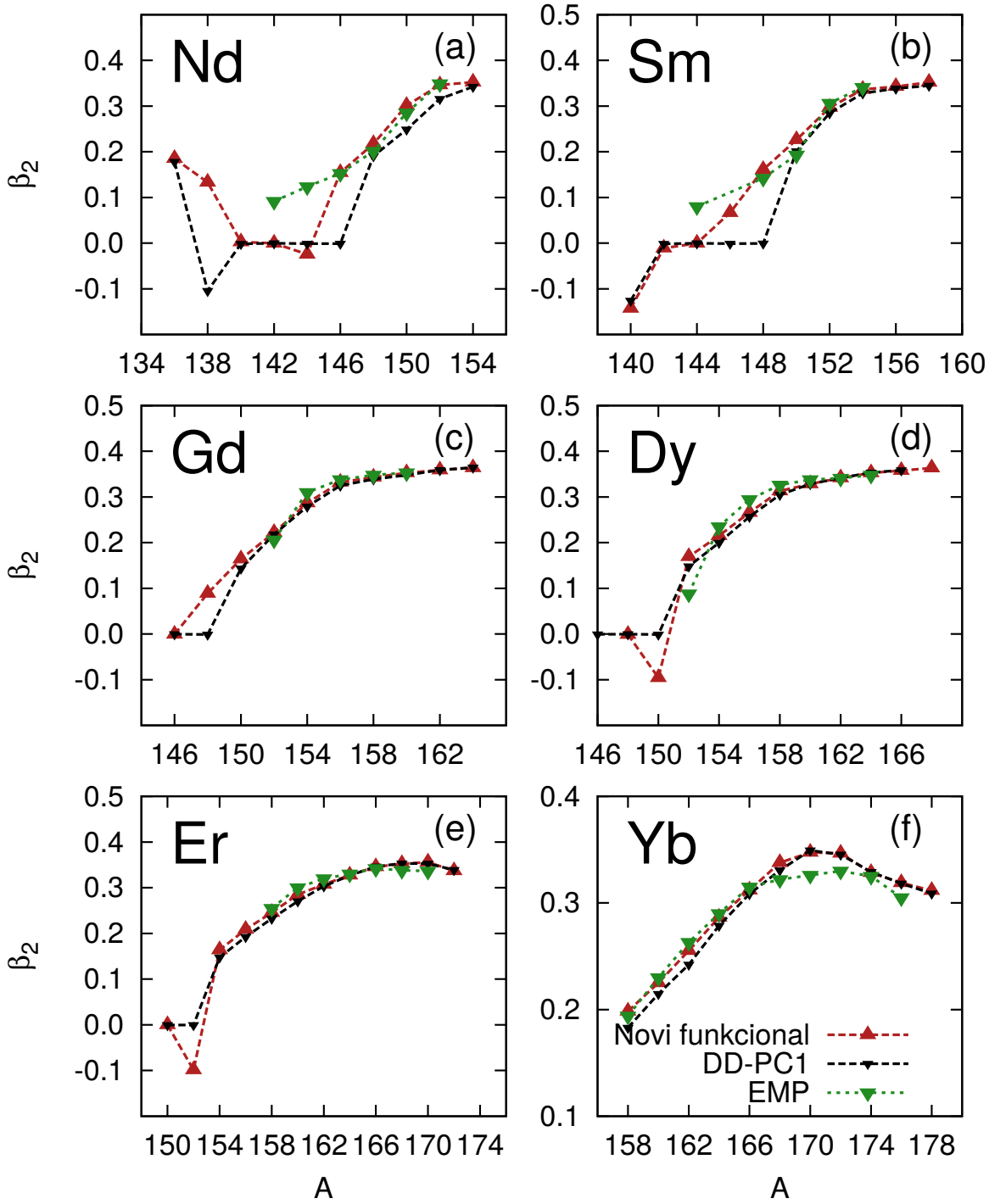
Slika 4.8: Parametar kvadrupolne deformacije β_2 za RHB osnovna stanja izotopskih lanaca Th, U, Pu, Cm i Cf u usporedbi s eksperimentalnim podacima [51] (otvoreni simboli).



Slika 4.9: Nabojni radijus r_c za RHB osnovna stanja izotopskih lanaca Th, U, Pu, Cm i Cf u usporedbi s eksperimentalnim podacima [52] (otvoreni simboli).



Slika 4.10: Nabojni radijusi r_c za izotopske lance elemenata rijetkih zemalja Nd, Sm, Gd, Dy, Er i Yb. Dobiveni rezultati pomoću RHB izračuna su uspoređeni s eksperimentalnim podacima [53].



Slika 4.11: Parametar kvadrupolne deformacije β_2 za izotopske lance elemenata rijetkih zemalja Nd, Sm, Gd, Dy, Er i Yb. Dobiveni rezultati pomoću RHB izračuna su uspoređeni s eksperimentalnim podacima [54].

5 Moguće poboljšanje modela - kinetički član

Jedan primjetan nedostatak većine samosuglasnih modela srednjeg polja može se vidjeti u rezultatima računa jednonukleonskih protonskih i neutronskih spektara. Na slici 5.12 uspoređeni su eksperimentalne vrijednosti i teorijska predviđanja koja da je novi funkcional za jednonukleonske spektre protona (gornja slika) i neutrona (donja slika) jezgre ^{208}Pb. Eksperimentalni spektri odgovaraju jednonukleonskim energijama separacije izmjerenima u [57]. Treba primjetiti kako su jednonukleonske orbitale rješenja relativističkih Kohn-Sham jednadžbi i odgovarajuće svojstvene vrijednosti, uvedene samo kao Lagrangeovi multiplikatori, nemaju izravnu fizikalnu interpretaciju (tj. ne mogu se egzaktno identificirati s nukleonskim energijama separacije [5]). Međutim, za nekoliko posljednjih popunjenih orbitala u blizini Fermijeve površine, Kohn-Shamove svojstvene vrijednosti aproksimativno odgovaraju fizikalnim jednonukleonskim energijama. Kao i kod većine samosuglasnih modela srednjeg polja, računi reproduciraju općenitu strukturu i redoslijed jednonukleonskih nivoa, ali ne i gustoću nivoa oko procjepa glavnih ljusaka. Zbog niske efektivne nukleonske mase, veličina procjepa sfernih ljusaka između zaposjednutih i nezaposjednutih stanja je prevelika. Kao što se vidi na slici 5.12, teorijski predviđeni nivoi su značajno niži, dublji od odgovarajućih empirijskih jednonukleonskih stanja. To za posljedicu ima preveliko vezanje masa sfernih jezgara u računima nerelativističkih i relativističkih modela srednjeg polja [58].

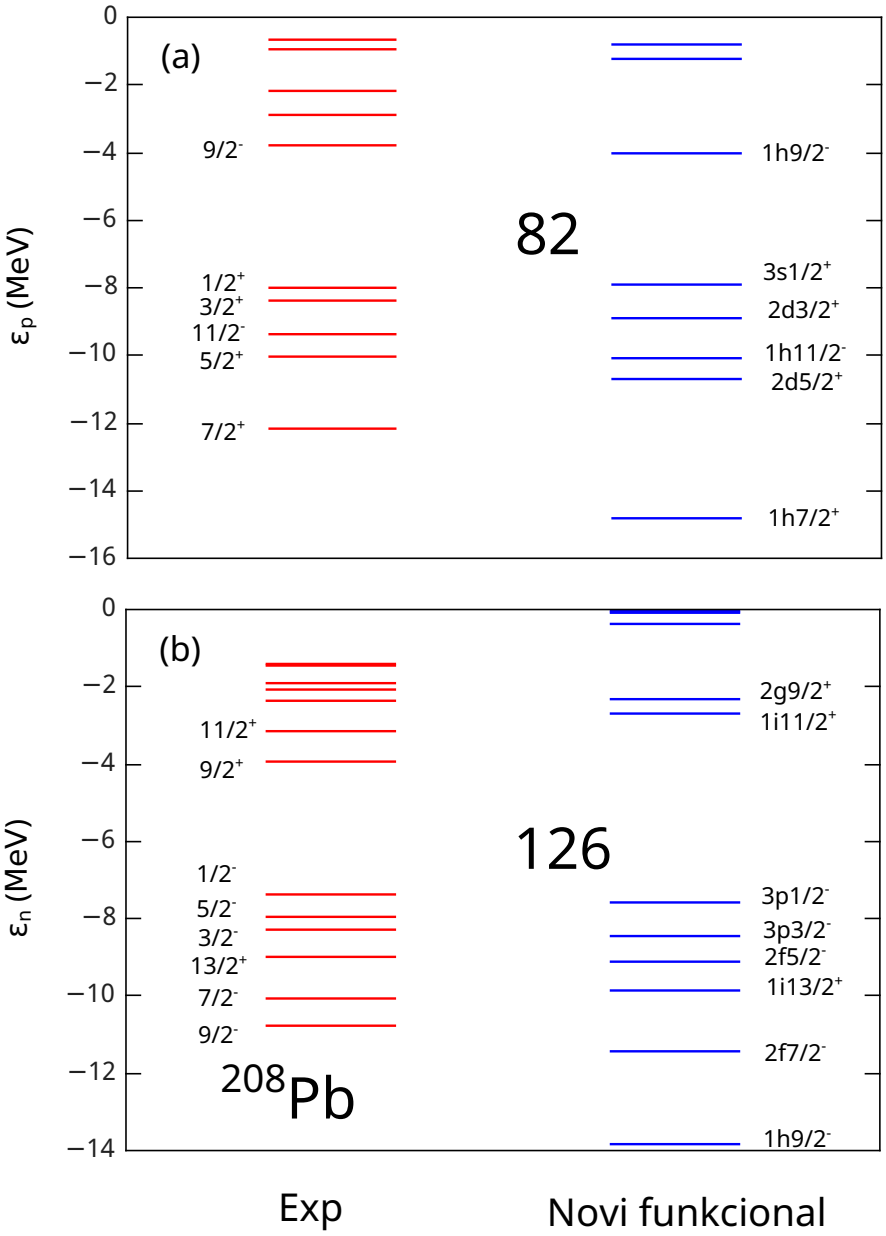
Kako bi se riješio problem potrebno je povećati nerelativističku efektivnu (Landau) masu nukleona. Jedan od načina kako se to može postići jest i dodavanje kinetičkog člana konstruiranom nuklearnom energijskom funkcionalu gustoće. Kinetičku gustoću u relativističkoj teoriji definiramo kao:

$$\rho_k \equiv i\bar{\psi}\gamma_\mu\partial^\mu\psi = \frac{i}{2}\left[\bar{\psi}\gamma_\mu\partial^\mu\psi - (\partial^\mu\bar{\psi})\gamma_\mu\psi\right]. \tag{5.5}$$

Kako je kinetička gustoća ρ_k Lorentzov skalar, ona se, u najnižem redu, može vezati na dvije različite gustoće - skalarnu gustoću ρ_s i pseudoskalarnu gustoću $\bar{\psi}\gamma^5\psi$. Uzmimo prvu mogućnost. Lagranžijan sada glasi:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = {} & \bar{\psi}(i\gamma\cdot\partial - m)\psi \\
& - \frac{1}{2}\alpha_s(\hat{\rho}_v)(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_v(\hat{\rho}_v)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) \\
& - \frac{1}{2}\alpha_{tv}(\hat{\rho}_v)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \\
& - \frac{1}{2}\delta_s(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) - e\bar{\psi}\gamma\cdot A\frac{(1-\tau_3)}{2}\psi \\
& - \alpha_k(i\bar{\psi}\gamma_\mu\partial^\mu\psi)(\bar{\psi}\psi)
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Za α_k, novu konstantu vezanja, pretpostavljamo da je neovisna o gustoći. Problem ovakvog pristupa jest taj što uvođenje kinetičkog člana može negativno utjecati na predviđanja za spin-orbit interakciju. Stoga postoji određena dilema - treba li ovaj



Slika 5.12: Usporedba eksperimentalnih podataka (lijevo) i teorijskih predviđanja novog funkcionala (desno) za jednonukleonske spektre protona (a) i neutrona (b) za jezgru ^{208}Pb. Eksperimentalni podaci su preuzeti iz [57].

problem riješavati na razini srednjeg polja ili u proširenju izvan srednjeg polja (npr. vezanje na vibracije jezgre), što predstavlja zanimljivo pitanje za postojeći model u budućnosti.

6 Zaključak

Teorijska fizika nuklearne strukture je u posljednjim desetljećima doživjela veliki napredak zbog mnoštva novih eksperimentalnih podataka, razvoja u fenomenologiji nuklearne astrofizike i teorijskim dostignućima u srodnim područjima. Cilj ovog polja je pronaći dosljedni mikroskopski opis strukture atomskih jezagara koji će, s jedne strane, povezati teoriju jake interakcije i fenomenologiju konačnih jezgara, a s druge strane pružiti jedinstven opis svojstava, pobuđenja i reakcija duž karte nuklida.

Nuklearni energijski funkcionali gustoće trenutno predstavljaju jedini sveobuhvatni pristup nuklearnoj strukturi. Prednost ovog pristupa se očituje u primjeni metode samosuglasnog srednjeg polja čiji se rezultati mogu na intuitivan način interpetirati i univerzalnosti funkcionala koja omogućuje primjenu na sve jezgre. Ovo je osobito važno u slučaju egzotičnih nestabilnih jezgara za koje postoji malo ili gotovo ništa eksperimentalnih podataka pa moramo pribjeći ekstrapolacijama. Relativistički energijski funkcionali gustoće imaju izvor u vrlo uspješnim fenomenološkim modelima relativisičkog srednjeg polja, koje su uveli Walecka i Serot [13, 14], a kasnije primjenile i razvile mnoge skupine. Ovaj pristup je reinterpretiran u analogiji s relativističkom Kohn-Shamovom teorijom funkcionala gustoće.

U ovom radu smo istražili određenu klasu relativističkih energijskih funkcionala gustoće u kojoj su samo nukleonski stupnjevi slobode eksplicitno iskorišteni u izgradnji članova efektivne interakcije. Izmjena teških mezona, kakva je predstavljena u originalnim relativističkim modelima srednjeg polja, predstavlja samo jednu moguću reprezentaciju efektivnih međudjelovanja između nukleona u mediju i ne predstavlja nikakvu određenu prednost na niskim energijama koje su karakteristične za nuklearna vezanja i niskoležeća pobuđenja. Kako je povezana s dinamikom na malim udaljenostima koja nije razlučiva na niskim energijama, može se zamijeniti odgovarajućim lokalnim kontaktnim međudjelovanjem nukleona. Na temelju razmatranja mikroskopskih nukleonskih vlastitih energija napravljen je fenomenološki *ansatz* za ovisnost funkcionala vezanja o gustoći. Odgovarajući parametri su prilagođeni, koristeći programski paket `MINUIT`, sukladno optimizacijskoj shemi opisanoj u [29] , χ^2 prilagodbom parametara na svojstva beskonačne nuklearne materije i svojstva 10 sfernih jezgara u osnovnom stanju. Optimizacijska shema i kalibracija novog funkcionala počiva na fizikalnim opservablama koje se mogu izmjeriti u laboratoriju ili ekstrapolirati iz promatranja. Optimizacija ovog funkcionala je provedena u prostoru "pseudopodataka" što je velika prednost u odnosu na parametre modela iz lagranžijana jer imaju jasnu fizikalnu interpretaciju. Ukupni broj parametara novog funkcionala je 9, što je tipično i za nerelativističke funkcionale *Skyrme* tipa.

Analizirali smo ponašanje χ^2 funkcije u okolici minimuma kako bismo izračunali nepouzdanosti parametara modela i koeficijente korelacije između parametara, kao i svojstvene vektore i svojstvene vrijednosti matrice drugih derivacija χ^2. Ovo nam je omogućilo da odredimo tvrde i mekane smjerove u parametarskom prostoru kako

bismo vidjeli koje kombinacije parametara modela su loše ograničene χ^2 funkcijom. Za opservable korištene u optimizaciji izračunata su teorijska predviđanja vrijednosti i pogrešaka. Uz ovo su analizirane nepouzdanosti i kovarijance opservabli konačnih jezgara, na primjeru jezgre ^{208}Pb. Ovo može biti važno pri ekstrapolaciji modela u nepoznata područja. Analiza korelacija može otkriti snažne međuovisnosti između opservabli i tako eliminirati potrebu da neke od njih mjerimo ili, ako je neka on njih eksperimentalno nedostupna, omogućiti nam uvid u njihove vrijednosti. U našem slučaju analiza otkriva kako, iako funkcional daje predviđanja u skladu s eksperimentalnim podacima, određene kombinacije parametara modela su slabo ograničene i daju velik doprinos nepouzdanosti opservabli konačnih jezgara.

Optimizirani energijski funkcional gustoće je potom testiran na nizu ilustrativnih računa svojstava deformiranih jezgara - energija vezanja, nabojnih radijusa i kvadrupolnih parametara deformacije izotopskih lanaca elemenata rijetkih zemalja i elemenata Cf, Cm, U, Pb, Th. Rezultati su uspoređeni s dostupnim eksperimentalnim podacima i predviđanjima funkcionala DD-PC1, također iz klase točkastih vezanja. Može se zaključiti da su teorijska predviđanja novog funkcionala u dobrom slaganju s eksperimentalnim podacima te u nekim slučajevima daje bolje rezultate nego DD-PC1. Izuzetak su predviđanja za nabojne radijuse Th, U, Pb i Cm gdje teorijska predviđanja daju veće vrijednosti od eksperimentalnih. Odstupanja rastu za teže elemente, ali prate generalni trend rasta eksperimentalnih vrijednosti nabojnog radijusa s porastom masenog broja.

Na kraju smo analizirali manu modela koja se očituje u nemogućnosti reprodukcije jednonukleonskih spektara u skladu s eksperimentalnim podacima. Na primjeru jezgre ^{208}Pb analizirana su teorijska predviđanja jednonukleonskih neutronskih i protonskih spektara s eksperimentalnim vrijednostima. Primjećeno je kako, kao i kod većine samosuglasnih modela srednjeg polja, računi reproduciraju općenitu strukturu i redoslijed jednonukleonskih nivoa, ali ne i gustoću nivoa oko procjepa glavnih ljusaka. Uzrok je u niskoj efektivnoj nukleonskoj masi unutar modela. Moguće rješenje ovog problema nalazi se u vidu kinetičkog člana koji bi se uključio u funkcional gustoće. Mogući problem ovog pristupa je taj što ne znamo kako će kinetički član utjecati na spin-orbit interakciju unutar modela. Ako bi on djelovao negativno, postavlja se dilema treba li model dalje korigirati unutar okvira teorije srednjeg polja ili izvan njega. To ostaje otvoreno pitanje za buduća proširenja ovog modela.

Dodaci

Dodatak A Veza parametara funkcionala s beskonačnom nuklearnom materijom

U ovom dodatku ćemo pokazati vezu između odabrane parametrizacije funkcionala tj. ovisnosti vezanja o barionskoj gustoći i veličina koje opisuju simetričnu beskonačnu nuklearnu materiju. Krenimo od izračuna gustoća za svaki od kanala u našem PC-RMF modelu. Uzimamo kao pomoćnu bazu rješenja Diracove jednadžbe u beskonačnoj nuklearnoj materiji i prebacimo se u bazu u kojoj je gustoća matrice dijagonalna $\rho_i j = \delta_i j$. Lokalne gustoće (koje ne ovise o prostornovremenskim koordinatama u slučaju izotropne homogene materije) u tom slučaju glase:

- Izoskalar-vektor gustoća:

$$\begin{aligned}\rho_v &= \sum_{s=\uparrow,\downarrow;q=n,p} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} u^\dagger(\mathbf{p},s,q)u(\mathbf{p},s,q) \\ &= \frac{1}{3\pi^2}\sum_{q=n,p} p_{F,q}^3 = \frac{2}{3\pi^2}p_F^3\end{aligned} \tag{A.1}$$

- Izovektor-vektor gustoća:

$$\begin{aligned}\rho_{tv} &= \sum_{s=\uparrow,\downarrow;q=n,p} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} u^\dagger(\mathbf{p},s,q)\tau_3 u(\mathbf{p},s,q) \\ &= \frac{1}{3\pi^2}[p_{F,n}^3 - p_{F,p}^3] = 0\end{aligned} \tag{A.2}$$

- Izoskalar-skalar gustoća:

$$\begin{aligned}\rho_s &= \sum_{s=\uparrow,\downarrow;q=n,p} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} u^\dagger(\mathbf{p},s,q)\gamma_0 u(\mathbf{p},s,q) \\ &= \frac{1}{\pi^2}\sum_{q=n,p}\int_0^{p_{F,q}} dp\, p^2 \frac{m^*}{\mathcal{E}^*} = \frac{2}{\pi^2}\int_0^{p_F} dp\, p^2 \frac{m^*}{\mathcal{E}^*}\end{aligned} \tag{A.3}$$

gdje zadnji članovi odgovaraju slučaju simetrične nuklearne materije. Pritom vrijedi:

$$m^* = m + \Sigma_S = m + \alpha_s(\rho_v)\rho_s \tag{A.4}$$

$$\mathcal{E}^* = \mathcal{E} - \Sigma_0 = \mathcal{E} - \alpha_v\rho_v + \frac{1}{2}\left[\frac{d\alpha_s}{d\rho_v}\rho_s^2 + \frac{d\alpha_v}{d\rho_v}\rho_v^2\right] = \sqrt{m^{*\,2} + p^2}. \tag{A.5}$$

Gustoće ovise o samoenergijama koje i same ovise o gustoćama, što predstavlja samosuglasni problem. Rješenje problema se dobiva iterativnim postupkom. Barionsku gustoću možemo odmah izračunati:

$$\rho_v = \frac{2}{3\pi^2}p_F^3. \tag{A.6}$$

A.1 Vezanja u izoskalarnom kanalu

Ako znamo gustoću saturacije $\rho_v = \rho_0$ i Diracovu masu na gustoći saturacije $m^*(\rho_0) \equiv m_D$, možemo izraziti skalarno vezanje u točki saturacije kao

$$\alpha_{s,0} \equiv \alpha_s(\rho_0) = \frac{m_D - m}{\rho_{s,0}}, \quad \rho_{s,0} = \frac{2m_D}{\pi^2}\int_0^{p_F} \frac{p^2 dp}{\sqrt{m^{*\,2} + p^2}}. \tag{A.7}$$

U postupku povezivanja parametara funkcionala sa veličinama koje opisuju simetričnu beskonačnu nuklearnu materiju bit će nam bitne derivacije raznih veličina obzirom na ρ_v. Za početak možemo izračunati derivaciju Fermijevog impulsa:

$$p_F = \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{1/3} \rho_v^{1/3} \quad \Rightarrow \quad \frac{dp_F}{d\rho_v} = \frac{\pi^2}{2p_F^2}. \tag{A.8}$$

Derivacija Diracove mase će nam također biti potrebna:

$$\frac{dm^*}{d\rho_v} = \alpha_s'(\rho_v)\rho_s + \alpha_s(\rho_v)\frac{d\rho_s}{d\rho_v}. \tag{A.9}$$

Derivacija skalarne gustoće (A.3) iznosi:

$$\begin{aligned}\frac{d\rho_s}{d\rho_v} &= \frac{dm^*}{d\rho_v}\frac{2}{\pi^2}\int_0^{p_F} \frac{p^2 dp}{\sqrt{m^{*\,2} + p^2}} + m^*\frac{2}{\pi^2}\frac{p_F^2}{\sqrt{m^{*\,2} + p^2}}\frac{dp_F}{d\rho_v} \\ &- \frac{1}{2}m^*\frac{2}{\pi^2}\int_0^{p_F} \frac{p^2 dp}{(m^{*\,2} + p^2)^{3/2}} 2m^*\frac{dm^*}{d\rho_v}.\end{aligned} \tag{A.10}$$

Prethodni izraz možemo pojednostaviti ako iskoristimo relacije (A.3) i (A.6):

$$\frac{d\rho_s}{d\rho_v} = \frac{\rho_s}{m^*}\frac{dm^*}{d\rho_v} + \frac{m^*}{\sqrt{m^{*\,2} + p^2}} - m^{*\,2}\frac{dm^*}{d\rho_v}\frac{2}{\pi^2}\int_0^{p_F} \frac{p^2 dp}{(m^{*\,2} + p^2)^{3/2}} \tag{A.11}$$

Kombinacijom jednadžbi (A.9) i (A.11) dobivamo:

$$\begin{aligned}\frac{d\rho_s}{d\rho_v}\left[\frac{m}{m^*} + \frac{2m^{*\,2}}{\pi^2}\alpha_s(\rho_v)\int_0^{p_F} \frac{p^2 dp}{(m^{*\,2} + p^2)^{3/2}}\right] &= \alpha_s'(\rho_v)\frac{\rho_s^2}{m^*} + \frac{m^{*\,2}\alpha_s(\rho_v)}{\sqrt{m^{*\,2} + p^2}} \\ &- \frac{2m^{*\,2}}{\pi^2}\alpha_s'(\rho_v)\rho_s\int_0^{p_F} \frac{p^2 dp}{(m^{*\,2} + p^2)^{3/2}}\end{aligned} \tag{A.12}$$

Ako znamo gustoću saturacije i Diracovu masu pri saturacijskoj gustoći, tada možemo izračunati derivacije $dm^*/d\rho_v$ i $d\rho_s/d\rho_v$ u točki saturacije.

Vezanje izoskalar-vektor kanala možemo izračunati iz energije vezanja simetrične nuklearne materije:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{kin} + m(\rho_s - \rho_v) + \frac{1}{2}\alpha_s(\rho_v)\rho_s^2 + \frac{1}{2}\alpha_v(\rho_v)\rho_v^2, \tag{A.13}$$

gdje kinetička energija iznosi

$$\mathcal{E}_{kin} = \frac{2}{\pi^2}\int_0^{p_F} p^2\sqrt{m^{*\,2} + p^2}dp. \tag{A.14}$$

Ako znamo gustoću saturacije, Diracovu masu i energiju vezanja ($\mathcal{E}^{sat}$) pri gustoći saturacije, možemo dobiti sljedeći izraz za vezanje:

$$\alpha_{v,0} = \frac{2}{\rho_0^2}\left[\mathcal{E}^{sat} - \mathcal{E}_{kin}^{sat} - \frac{1}{2}\alpha_{s,0}\rho_{s,0}^2\right]. \tag{A.15}$$

Kako bismo izračunali derivacije vezanja, iskoristimo formulu za tlak simetrične nuklearne materije:

$$p = p_{kin} + \frac{1}{2}\alpha_s(\rho_v)\rho_s^2 + \frac{1}{2}\alpha_v(\rho_v)\rho_v^2 + \frac{1}{2}\alpha_v'(\rho_v)\rho_v^3 + \frac{1}{2}\alpha_s'(\rho_v)\rho_s^2\rho_v. \tag{A.16}$$

Tlak iščezava u točki saturacije pa vrijedi sljedeća relacija:

$$\alpha_{v,0}' + \alpha_{s,0}'\frac{\rho_{s,0}^2}{\rho_0^2} = -\frac{2p_{kin,0}}{\rho_0^3} - \frac{1}{2}\alpha_{v,0}\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{2}\alpha_{s,0}\frac{\rho_{s,0}^2}{\rho_0^3}. \tag{A.17}$$

Kako bismo mogli izračunati derivacije vezanja skalarnih i vektorskih vezanja pri saturacijskoj gustoći trebamo još iskoristiti formulu za inkompresibilnost pri gustoći saturacije

$$K = K_{kin} + 9\alpha_{v,0}\rho_0 + 18\alpha_{v,0}'\rho_0^2 + \frac{1}{2}\alpha_{s,0}''\rho_{v,0}^2\rho_0^3 + \frac{1}{2}\alpha_{s,0}''\rho_{s,0}^2\rho_0 + 9\alpha_{s,0}'\frac{d\rho_s}{d\rho_v}\rho_{s,0}\rho_0. \tag{A.18}$$

Iz jednadžbe (A.12) se može vidjeti kako se derivacija skalarne gustoće može pisati u obliku

$$\frac{d\rho_s}{d\rho_v} = X\alpha_{s,0}' + Y, \tag{A.19}$$

gdje su X i Y poznate veličine u točki saturacije. Nadalje, pretpostavili da vezanja imaju takav oblik da vrijedi sljedeća relacija

$$\alpha_{s,0}'' = \xi_s\alpha_{s,0}' \quad \text{i} \quad \alpha_{v,0}'' = \xi_v\alpha_{v,0}'. \tag{A.20}$$

Pomoću relacija (A.17-A.20) dobivamo kvadratnu jednadžbu za $\alpha_{s,0}'$ koja se može riješiti analitički. Jedno od rješenja je nefizikalno i može se izbaciti iz razmatranja. Nakon što smo izračunali $\alpha_{s,0}'$, lako možemo naći i $\alpha_{v,0}'$.

A.2 Vezanja u izovektorskom kanalu

Pogledajmo izovektor-vektor kanal međudjelovanja. Njega možemo najlakše parametrizirati pomoću energije simetrije i njenog nagiba u točki saturacije. Za energiju simetrije nuklearne materije vrijedi:

$$S(\rho_v) = S^{kin}(\rho_v) + \frac{1}{2}\alpha_{tv}\rho_v = \frac{p_F^2}{6\sqrt{m^{*\,2} + p^2}} + \frac{1}{2}\alpha_{tv}\rho_v. \tag{A.21}$$

Energiju simetrije u točki saturacije označimo kao $a_4 = S(\rho_0)$. Nagib energije simetrije je definiran kao:

$$L = 3\rho_0\frac{dS}{d\rho} \tag{A.22}$$

Stoga, vezanje izovektor-vektor kanala i derivacija vezanja u točki saturacije su dane sljedećim jednadžbama:

$$\alpha_{tv,0} = \frac{2}{\rho_0}(a_4 - S_{sat}^{kin}) \tag{A.23}$$

$$\alpha'_{tv,0} = \frac{2}{\rho_0}\left[\frac{L}{3\rho_0} - \frac{dS^{kin}}{d\rho_v}\bigg|_{\rho_0} - \frac{1}{2}\alpha_{tv,0}\right]. \tag{A.24}$$

Iskoristimo li relaciju (A.9), dobivamo:

$$\frac{dS^{kin}}{d\rho_v} = \frac{\pi^2}{12}\frac{2m^{*\,2} + p_F^2}{p_F(p_F^2 + m^{*\,2})^{3/2}} - \frac{1}{6}\frac{m^* p_F^2}{(p_F^2 + m^{*\,2})^{3/2}}\frac{dm^*}{d\rho_v}. \tag{A.25}$$

Sada trebamo povezati vezanja izražena preko svojstava simetrične nuklearne materije pri saturaciji s odabranom parametrizacijom. Prisjetimo se pretpostavljene ovisnosti funkcionala vezanja o gustoći (2.71):

$$\alpha(\rho) = a + b\left(1 - e^{-d(x-1)}\right) + c(x-1)e^{-d(x-1)} \tag{A.26}$$

gdje je $x = \frac{\rho}{\rho_0}$, a ρ_0 predstavlja gustoću nukleona u točki saturacije. Vidljivo je da u samoj točki saturacije $\rho = \rho_0$, $x = 1$ vrijedi:

$$\alpha(\rho_0) = a \tag{A.27}$$

Deriviramo li po gustoći ρ dobivamo:

$$\alpha'(\rho) = \frac{bd}{\rho_0}e^{-d(x-1)} - \frac{cd}{\rho_0}(x-1)e^{-d(x-1)} + \frac{c}{\rho_0}e^{-d(x-1)} \tag{A.28}$$

$$\alpha''(\rho) = -\frac{bd^2}{\rho_0^2}e^{-d(x-1)} - \frac{cd}{\rho_0^2}e^{-d(x-1)} + \frac{cd^2}{\rho_0^2}(x-1)e^{-d(x-1)} - \frac{cd}{\rho_0^2}e^{-d(x-1)} \tag{A.29}$$

$$\alpha'(\rho_0) = \frac{bd}{\rho_0} + \frac{c}{\rho_0} \tag{A.30}$$

$$\alpha''(\rho_0) = -\frac{bd^2}{\rho_0^2} - \frac{2cd}{\rho_0^2} \tag{A.31}$$

Kako bismo smanjili broj slobodnih parametara, namećemo ograničavajući uvjet $\alpha'(0) = 0$, što znači da vrijedi relacija

$$\alpha'(0) = \frac{bd}{\rho_0}e^d + \frac{cd}{\rho_0}e^d + \frac{c}{\rho_0}e^d = 0. \tag{A.32}$$

Ovim potezom smo eliminirali parametar c:

$$c(d+1) = -bd \quad \Rightarrow \quad c = -b\frac{d}{d+1}. \tag{A.33}$$

Sada možemo povezati parametre a, b, c i d s vrijednostima vezanja i njihovih derivacija u točki saturacije:

$$\alpha(\rho_0) = a, \quad \alpha'(\rho_0) = \frac{bd^2}{\rho_0(d+1)}, \quad \alpha''(\rho_0) = -\frac{bd^2}{\rho_0^2}\frac{d-1}{d+1}. \tag{A.34}$$

Dodatak B Razvoj u bazi harmoničkog oscilatora

B.1 Slučaj sferne simetrije

Za sustave koji su invarijanti na rotaciju koristimo sferne koordinate

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \quad y = r\sin\theta\sin\phi, \quad z = r\cos\theta. \tag{B.1}$$

Nukleonske gustoće i polja ovise samo o radijalnoj koordinati r. Spinor je obilježen nukleonskim angularnim momentom j_i, njegovom projekcijom m_i, paritetom π_i i izospiskom projekcijom $t_i = \pm 1/2$ za neutrone i protone

$$\psi_i(\mathbf{r}, s, t) = \begin{pmatrix} f_i(r)\Phi_{l_i j_i m_i}(\theta, \phi, s) \\ i g_i(r)\Phi_{\tilde{l}_i j_i m_i}(\theta, \phi, s) \end{pmatrix} \chi_{t_i}(t) \tag{B.2}$$

Orbitalni angularni momenti koji odgovaraju velikoj (l_i) i maloj ($\tilde{l}_i$) komponenti spinora su određeni ukupnim angularnim momentom j_i i paritetom π_i

$$l = j \pm \frac{1}{2}, \quad \tilde{l} = j \mp \frac{1}{2}, \quad \pi = (-)^{j\pm\frac{1}{2}}, \quad \kappa = \pm\left(j + \frac{1}{2}\right). \tag{B.3}$$

χ_{t_i} označava izospinsku valnu funkciju, a Φ_{ljm} je dvodimenzionalni spinor s kvantnim brojevima angularnog momenta ljm. Ovisnost o kutovima je analitička pa se problem svodi na riješavanje skupa vezanih običnih diferencijalnih jednadžbi u radijalonj varijabli r za veliku i malu komponentu Diracovog spinora

$$(m_D(r) + V(r))f_i(r) + \left(\partial_r - \frac{\kappa_i - 1}{r}\right) g_i(r) = \epsilon_i f_i(r), \tag{B.4}$$

$$-\left(\partial_r + \frac{\kappa_i + 1}{r}\right) f_i(r) - (m_D(r) - V(r))g_i(r) = \epsilon_i g_i(r), \tag{B.5}$$

gdje je $m_D = m + \Sigma_S$ Diracova masa, a $V(r)$ vektorski potencijal definiran kao

$$V(\mathbf{r}) = \alpha_v(\rho_v)\rho_v + \alpha_{tv}\tau_3\rho_{tv} + e\frac{1-\tau_3}{2}A_0 + \Sigma_0^R, \tag{B.6}$$

uz

$$\Sigma_0^R = \frac{1}{2}\frac{\partial\alpha_v}{\partial\rho_v}\rho_v^2 + \frac{\partial\alpha_{tv}}{\partial\rho_v}\rho_{tv}^2 + \frac{\partial\alpha_s}{\partial\rho_v}\rho_s^2. \tag{B.7}$$

Iako bi se trebalo uzeti potpunu bazu, u praktičnim računima ona mora biti odrezana nakon konačnog broja glavnih oscilatorskih ljusaka, N_{max}. Razvijamo velike i male komponente Diracovog spinora (B.2), $f_i(r)$ i $g_i(r)$, preko radijalnih valnih funkcija $R_{nl}(r)$ sfernog harmoničkog oscilatora, oscilatorske frekvencije $\hbar\omega_0$ i odgovarajuće oscilatorske duljine $b_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$, gdje je m masa nukleona,

$$f_i(r) = \sum_{n=0}^{n_{max}} f_n^{(i)} R_{nl_i}(r), \quad g_i(r) = \sum_{\tilde{n}=0}^{\tilde{n}_{max}} g_{\tilde{n}}^{(i)} R_{\tilde{n}\tilde{l}_i}(r). \tag{B.8}$$

Radijalna valna funkcija je definirana kao

$$R_{nl}(r) = \frac{N_{nl}}{\sqrt{b_0}^3} \xi^l L_n^{l+1/2}(\xi^2) e^{-\xi^2/2}, \tag{B.9}$$

gdje je $\xi = r/b_0$ radijalna koordinata u jedinicama oscilatorske duljine, a $L_n^m(\xi^2)$ pridruženi Laguerrovi polinomi. Normalizacijski faktor iznosi

$$N_{nl} = \sqrt{2n!/(l+n+1/2)!}. \tag{B.10}$$

Gornje granice n_{max} i $\tilde{n}_{max}$ u jednadžbi (B.8) su radijalni kvantni brojevi i određeni su odgovarajućim brojem oscilatorske ljuske $N_{max} = 2n_{max} + l_i$ i $\tilde{N}_{max} = 2\tilde{n}_{max} + \tilde{l}_i$. Male komponente se razvijaju do $\tilde{N}_{max} = N_{max} + 1$ kako bi se izbjegli prividni doprinosi rješenju Diracove jednadžbe [**?**].

B.2 Slučaj aksijalnosimetrične kvadrupolne deformacije

Za deformirane jezgre rotacijska simetrija je slomljena, pa ukupni angularni moment više nije dobar kvantni broj. Međutim, većina takvih jezgara posjeduje aksijalnu simetriju tj. postoji invarijantnost na rotacije oko osi simetrije. Ako os simetrije postavimo kao z-os sustava, cilindrični sustav postaje prikladan način opisivanja jezgre. Cilindrične koordinate su povezane s kartezijevim koordinatama relacijama,

$$x = r_\perp \cos\phi, \quad y = r_\perp \sin\phi, \quad z = z. \tag{B.11}$$

U slučaju kvadrupolnih deformacija s aksijalnom simetrijom, treća komponenta ukupnog angularnog momenta, njegova projekcija na os simetrije, J_z je očuvana veličina i definira kvantni broj

$$\Omega = \Lambda + m_s \tag{B.12}$$

pri čemu su Λ i m_s projekcije orbitalnog angularnog momenta i spina na os simetrije, z-os. Jednočestični nukleonski spinori u ovom slučaju glase

$$\psi_i(\mathbf{r}, s, t) = \begin{pmatrix} f_i^+(r_\perp, z) e^{i\Lambda_- \phi} \\ f_i^-(r_\perp, z) e^{i\Lambda_+ \phi} \\ g_i^+(r_\perp, z) e^{i\Lambda_- \phi} \\ g_i^-(r_\perp, z) e^{i\Lambda_+ \phi} \end{pmatrix} \chi_{t_i}(t). \tag{B.13}$$

Uz projekciju angularnog momenta na os simetrije Ω, očuvane veličine su paritet i treća komponenta izospina. Nukleonske valne funkcije se razvijaju u bazi svojstvenih funkcija jednočestičnog hamiltonijana za potencijal aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora:

$$V_{osc}(r_\perp, z) = \frac{1}{2} m\omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2} m\omega_\perp^2 r_\perp^2. \tag{B.14}$$

Ukupni volumen mora biti očuvan pa se oscilatorske frekvencije $\hbar\omega_\perp$ i $\hbar\omega_z$ mogu izraziti preko parametra deformacije β_2 i oscilatorske frekvencije $\hbar\omega_0$:

$$\hbar\omega_z = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_2}, \quad \hbar\omega_\perp = \hbar\omega_0 e^{\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_2}. \tag{B.15}$$

Odgovarajuće oscilatorske duljine su

$$b_z = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}}, \quad b_\perp = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\perp}}. \tag{B.16}$$

Iz očuvanja volumena slijedi $b_\perp^2 b_z = b_0^2$. Baza je sada određena konstantama $\hbar\omega_0$ i β_2. Svojstvene funkcije potencijala deformiranog harmoničkog oscilatora označavamo skupom kvantnih brojeva:

$$|\alpha\rangle = |n_z n_r \Lambda m_s\rangle, \tag{B.17}$$

gdje n_z i $n_\perp$ označavaju broj čvorova valne funkcije u z i $r_\perp$ smjeru. Svojstvene funkcije potencijala aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora glase:

$$\Phi_\alpha(r_\perp, z, \phi, s) = \varphi_{n_z}(z)\varphi_{n_\perp}^\Lambda(r_\perp)\frac{e^{i\Lambda\phi}}{\sqrt{2\pi}}\chi(s). \tag{B.18}$$

Za paritet stanja Φ_α vrijedi relacija $\pi = (-)^{n_z+\Lambda}$. Svojstvena funkcija $\Phi_\alpha(r_\perp, z, \phi, s)$ u sebi sadrži dva faktora, jedan od kojih odgovara svojstvenoj funkciji u z-smjeru:

$$\phi_{n_z}(z) = \frac{N_{n_z}}{\sqrt{b_z}} H_{n_z}(\xi) e^{-\xi^2/2}, \tag{B.19}$$

a drugi svojstvenoj funkciji za $r_\perp$-smjer:

$$\phi_{n_\perp}^\Lambda(r_\perp) = \frac{N_{n_\perp}^\Lambda}{b_\perp}\sqrt{2}\eta^{|\Lambda|/2} L_{n_\perp}(\eta) e^{\eta/2}, \tag{B.20}$$

gdje su $\xi = z/b_z$ i $\eta = r_\perp^2/b_\perp^2$ bezdimenzionalne varijable. $H_{n_z}(\xi)$ i $L_{n_\perp}^{|\Lambda|}(\eta)$ označavaju Hermiteove polinome i pridružene Laguerrove polinome. Normalizacijski faktori glase:

$$\mathcal{N}_{n_z} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^{n_z} n_z!}} \quad \text{i} \quad \mathcal{N}_{n_\perp}^\Lambda = \sqrt{\frac{n_\perp!}{(n_\perp + |\Lambda|)!}}. \tag{B.21}$$

Razvoj velikih i malih komponenti Diracovog spinora preko oscilatorskih svojstvenih funkcija je dan s:

$$f_i(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_i^+(r_\perp, z)e^{i\Lambda_-\phi} \\ f_i^-(r_\perp, z)e^{i\Lambda_+\phi} \end{pmatrix} = \sum_\alpha^{\alpha_{max}} f_\alpha^{(i)} \Phi_\alpha(\mathbf{r}, s)\chi_{t_i}(t), \tag{B.22}$$

$$g_i(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_i^+(r_\perp, z)e^{i\Lambda_-\phi} \\ f_i^-(r_\perp, z)e^{i\Lambda_+\phi} \end{pmatrix} = \sum_{\tilde{\alpha}}^{\tilde{\alpha}_{max}} g_{\tilde{\alpha}}^{(i)} \Phi_{\tilde{\alpha}}(\mathbf{r}, s)\chi_{t_i}(t). \tag{B.23}$$

Kako bi se izbjegla pojava nefizikalnih spurioznih stanja, kvantni brojevi α_{max} i $\tilde{\alpha_{max}}$ odabrani na takav način da odgovarajući glavni kvantni brojevi $N = 2n_\perp + |\Lambda| + n_z$ nisu veći od N_{max} u razvoju velikih komponenti i $N_{max} + 1$ u razvoju malih komponenti.

Dodatak C Numerička implementacija optimizacije

Pri numeričkoj optimizaciji novokonstruiranog funkcionala korišen je programski paket MINUIT [50]. MINUIT je u CERN-u napisao Fred James u razdoblju 1975-1980. Progmamski paket je isprva napisan u Fortranu i glavna primjena mu je bila u statističkoj analizi eksperimentalnih podataka skupljenih u CERN-u.

MINUIT je alat kojim se pronalazi minimalna vrijednost višeparametarske funkcije (zvane FCN) i analizira oblik funkcije oko minimuma. Glavna primjena paketa je statistička analiza funkcija χ^2 ili logaritma funkcije vjerodostojnosti kako bi se izračunale vrijednosti parametara i njihove nepouzdanosti, kao i korelacije između parametara u najboljoj prilagodbi, tj. one vrijednosti za koje se minimizira dana funkcija, FCN. Širina minimuma funkcije, općenitije govoreći, oblik funkcije u okolini minimuma, daje informacije o nepouzdanosti najboljih vrijednosti parametara. Kako bi se pronašla najbolja prilagodba, korišten je jedan od već postojećih minimizacijskih algoritama ugrađenih u sam programski paket - MIGRAD. MIGRAD je najbolji minimizator za gotovo sve funkcije. Temelji se na Davidon-Fletcher-Powell (DFP) metodi varijabilne metrike i provjerava pozitivnu definitnost. DFP metoda je iterativni proces koji pretpostavlja da se gradijent funkcije koju minimiziramo FCN obzirom na parametre prilagodbe može izračunati eksplicitno. Zato je važno točno izračunati prve derivacije, u protivnom postupak minimizacije propada. Na kraju postupka minimizacije MIGRAD izbacuje matricu pogrešaka. Ta matrica je inverz matrice drugih derivacija funkcije FCN, koju se transformira, ako je potrebno, u vanjski koordinatni prostor. Kvadratni korijeni dijagonalnih elemenata ove matrice su pogreške parametara koje dobivamo primjenom MINUIT-a.

Kako su se pri minimizaciji parametara koristile opservable niza jezgara (njih 10) sami programski kod je paraleliziran koristeći programski paket OpenMP (više o njemu na [60]) kako bi se povećala učinkovitost dostupnih računalnih resursa i smanjilo ukupno vrijeme trajanja numeričkih izračuna. Kod paralelnog izvođenja poslova, obrada velikog broja podataka cijepa se na manje poslove (obrada manjeg dijela podataka) koje mogu raditi pojedini procesori ili druga računala u grozdu paralelno. OpenMP (engl. *Open Multi-Processing*) je komunikacijska biblioteka za paralelno izvođenje poslova na SMP računalu (engl. *Symmetric multiprocessing*; računalo sa zajedničkom memorijom). Računala građena od procesora baziranih na više jezgara ili mogućnošcu izvršavanja više niti/poslova (*dual-core*, *quad-core*,...,*multithreading*, *hyperthreading*) mogu se tretirati kao SMP računala. OpenMP nije novi programski jezik već vrsta notacije koja se dodaje sekvencijalnom programu u Fortranu, C-u ili C++, kako bi se opisao posao koji se dijeli između niti koje se izvode na različitim procesorima ili jezgrama i kako bi se moglo pristupiti dijeljenim podacima po potrebi. Pravilan način uključivanja OpenMP značajki u sekvencijalni program omogućava mnogim aplikacijama da se okoriste paralelno izvedenom arhitekturom dijeljene memorije, često uz minimalnu izmjenu teksta programa. OpenMP uvodi ins-

trukcijske niti za izvođenje. Jedna nit sastoji se od niza instrukcija za izvršavanje, a svaka nit veže se na jedan od dostupnih procesora u SMP računalu poput pojedinog UNIX ili Windows procesa. Niti dijele zajednički memorijski prostor i većinu varijabli programa. Niti mogu surađivati tijekom izvršavanja paralelnog programa, a njihovi nizovi instrukcija mogu se također i vremenski usklađivati ili sinkronizirati.

Literatura

[1] G. A. Lalazissis, P. Ring, D. Vretenar, Extended Density Functionals in Nuclear Structure Physics, Lecture Notes in physics 641, Springer, Heidelberg, (2004)

[2] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121 (2003)

[3] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965)

[4] W. Kohn, Rev. Mod. Phys., Vol. 71, No. 5 (1999)

[5] R. Dreizler, E. Gross, Density Functional Theory, Plenum Press, New York, 1995.

[6] J. E. Drut, R. J. Furnstahl, L. Platter, Prog. Part. Nucl. Phys. 64, 120 (2010)

[7] D. Vretenar, Eur. Phys. J. ST 156, 37 (2008)

[8] R. J. Furnstahl, B. D. Serot, Comments Nucl. Part. Phys. 2, A23 (2000)

[9] J. N. Ginocchio, Phys. Rep. 414, 165 (2005)

[10] D. Vretenar, A. V. Afanasjev, G. A. Lalazissis, P. Ring, Phys. Rep. 409, 101 (2005)

[11] J. Meng, H. Toki, S. G. Zhou, S. Q. Zhang, W. H. Long, L. S. Geng, Prog. Part. Nucl. Phys. 57, 470 (2006)

[12] N. Paar, D. Vretenar, E. Khan, G. Colò, Rep. Prog. Phys. 70, 691 (2007)

[13] J. D. Walecka, Ann. Phys. 83, 497 (1974)

[14] B. D. Serot, J. D. Walecka, Adv. Nucl. Phys. 16, 1 (1986)

[15] C. J. Horowitz, B. D. Serot, Nucl. Phys. A 368, 503 (1981)

[16] G. A. Lalazissis, J. Konig, P. Ring, Phys. Rev. C 55, 540 (1997)

[17] G. A. Lalazissis, S. Raman, P. Ring, At. Data Nucl. Data Tables 71, 1 (1999)

[18] B. G. Todd-Rutel, J. Piekarewicz, Phys. Rev. Lett. 95, 122501 (2005)

[19] W.-C. Chen, J. Piekarewicz, Phys. Rev. C 90, 044305 (2014)

[20] B. A. Brown, Phys. Rev. Lett. 85, 5296 (2000)

[21] R. J. Furnstahl, Nucl. Phys. A 706, 85 (2002)

[22] M. Centelles, X. Roca-Maza, X. Vinas, M. Warda, Phys. Rev. Lett. 102, 122502 (2009)

[23] X. Roca-Maza, M. Centelles, X. Vinas, M. Warda, Phys. Rev. Lett. 106, 252501 (2011)

[24] J. Erler, N. Birge, M. Kortelainen, W. Nazarewicz, E. Olsen, A. M. Perhac, M. Stoitsov, Nature 486, 509 (2012)

[25] A. V. Afanasjev, S. E. Agbemava, D. Ray, P. Ring, Phys. Lett. B 726, 680 (2013)

[26] J. M. Lattimer, M. Prakash, Science 304, 536 (2004)

[27] P. Demorest, T. Pennucci, S. Ransom, M. Roberts, J. Hessels, Nature 467, 1081 (2010)

[28] J. Antoniadis, P. C. C. Freire, N. Wex, T. M. Tauris, R. S. Lynch et al., Science 340, 1233232 (2013)

[29] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P.-G. Reinhard, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 41, 074001 (2014)

[30] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 78, 034318 (2008)

[31] S. S. M. Wong, Introductory Nuclear Physics, 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim (2004)

[32] J. Toivanen, J. Dobaczewski, M. Kortelainen, K. Mizuyama, Phys. Rev. C 78, 034306 (2008)

[33] P.-G. Reinhard, J. Piekarewicz, W. Nazarewicz, B. K. Agrawal, N. Paar, X. Roca-Maza, Phys. Rev. C 88, 034325 (2013)

[34] Y. Gao, J. Dobaczewski, M. Kortelainen, J. Toivanen, D. Tarpanov, Phys. Rev. C 87, 034324 (2013)

[35] M. Kortelainen, J. Erler, W. Nazarewicz, N. Birge, Y. Gao, E. Olsen, Phys. Rev. C 88, 031305 (2013)

[36] P. R. Bevington, D. K. Robinson, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, McGraw-Hill, 2003.

[37] S. Brandt, Statistical and computational methods in data analysis, Springer, New York, 1997.

[38] A. Tarantola, Inverse problem theory and methods for model parameter estimation, SIAM, Philadelphia, 2005.

[39] G. F. Bertsch, B. Sabbey, M. Uusnäkki, Phys. Rev. C 71, 054311 (2005)

[40] M. Kortelainene, J. Dobaczewski, K. Mizuyama, J. Toivanen, Phys. Rev. C 77, 064307 (2008)

[41] M. Stoitsov, M. Kortelainen, S. K. Bogner, T. Duguet, R. J. Furnstahl, B. Gebremariam, Phys. Rev. C 84, 064302 (2011)

[42] F. J. Fattoyev, J. Piekarewicz, Phys. Rev. C 84, 064302 (2011)

[43] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136, 864 (1964)

[44] J. W. Negele, D. Vautherin, Density-matrix expansion for an effective nuclear hamiltonian. C5:1472-1492 (1972)

[45] P.-G. Reinhard, C. Toepffer, Correlations in nuclei and nuclear dynamics, Int. J. Mod. Phys. E, 3:435-521 (1994)

[46] P.-G. Reinhard, Rep. Prog. Phys., 52:439-514 (1989)

[47] H.-P. Duerr, Relativistic effects in nuclear forces, Phys. Rev., 103:469-480 (1956)

[48] P. Ring, Prog. Part. Nucl. Phys., 37:193-263 (1996)

[49] D. R. Entem, R. Machleidt, Phys. Rev. C 68, 041001(R) (2003)

[50] F. James, M. Roos, Comput.Phys.Commun., 10:343-367 (1975)

[51] Brookhaven National Laboratory, National Nuclear Data Center, Chart of Nuclides `http://www.nndc.bnl.gov/chart/`, 20. 1. 2016.

[52] I. Angeli, K. P. Marinova, At. Data Nucl. Data Tables 99, 1 (2013)

[53] E. G. Nadjakov, K. P. Marinova, Yu. P. Gangrsky, At. Data Nucl. Data Tables 56, 133 (1994)

[54] S. Raman, C. Nestor, P. Tikkanen, At. Data Nucl. Data Tables 78, 1 (2001)

[55] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 73, 034308 (2006)

[56] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 74, 064309 (2006)

[57] V. I. Isakov, K. I. Erokhina, H. Mach, M. Sanchez-Vega, B. Fogelberg, Phys. Atom. Nucl. 67 (2004) 1823-1828, Yad. Fiz. 67 (2004)

[58] M. Bender, G. F. Bertsch, and P.-H. Heenen, Phys. Rev. C 73, 034322 (2006)

[59] P. Ring, Y. Gambhir, G. Lalazissis, Comp. Phys. Comm. 105, 77 (1997)

[60] `http://www.openmp.org/`, 20. 1. 2016.