

Multipolna pobuđenja deformiranih atomskih jezgri

Bjelčić, Antonio

Master's thesis / Diplomski rad

2018

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://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:220236>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-04-01**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Antonio Bjelčić

MULTIPOLNA POBUĐENJA DEFORMIRANIH
ATOMSKIH JEZGRI

Diplomski rad

Zagreb, 2018.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ
FIZIKA; SMJER ISTRAŽIVAČKI

Antonio Bjelčić

Diplomski rad

**Multipolna pobuđenja deformiranih
atomske jezgri**

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

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2018.

Sažetak

Kvazičestična aproksimacija slučajnih faza predstavlja jedan od najčešće korištenih modela za opis kolektivnih pobuđenja u atomskim jezgrama. Veličina kvazičestičnog prostora dosad je ograničavala račune u deformiranim teškim jezgrama. Nedavno predložena metoda konačnih amplituda (FAM - *Finite Amplitude Method*) omogućava takve račune uz mnogo manje zahtjeve za računalnim resursima. Metoda je dosad uglavnom korištena u opisu monopolnog odziva dok su primjene na više multipole bile manje zastupljene. U okviru ovog diplomskog rada razvijena je implementacija metode konačnih amplituda temeljena na relativističkom energijskom funkcionalu gustoće prikladna za opis viših multipola. Razvijeni model i numerička implementacija testirani su na nekoliko ilustrativnih primjera deformiranih atomskih jezgara.

Ključne riječi:

- Finite Amplitude Method
- Quasiparticle Random-Phase Approximation
- Relativistički Hartree-Bogoliubovljev model
- Multipolna pobuđenja
- Nuklearni energijski funkcional gustoće
- Deformirane jezgre

Multipole excitations of deformed atomic nuclei

Abstract

The Quasiparticle Random-Phase Approximation (QRPA) based on energy density functionals is a leading framework for describing collective excitations of atomic nuclei. As the space of quasiparticle excitations can become very large in open-shell heavy nuclei, the standard matrix solution of the QRPA equation is often computationally prohibitive, especially for deformed nuclei. Recently, the Finite Amplitude Method (FAM) was proposed as a feasible method for a solution of the QRPA equation. The method has mainly been used for monopole isoscalar and isovector excitations. In this thesis, efficient implementation based on the relativistic nuclear energy density functional theory, suitable for higher multipole excitations, has been developed, tested and applied on excitations of deformed atomic nuclei.

Keywords:

- Finite Amplitude Method
- Quasiparticle Random-Phase Approximation
- Relativistic Hartree-Bogoliubov model
- Multipole excitations
- Nuclear energy density functional theory
- Deformed atomic nuclei

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Teorijski formalizam	2
2.1	Relativistički nuklearni energijski funkcional gustoće	2
2.2	Vremenski ovisan relativistički Hartree-Bogoliubovljev model	4
2.3	Oscilacije malenih amplituda - QRPA	6
2.4	FAM metoda	9
3	Numerička implementacija	12
3.1	Osnovno stanje	12
3.1.1	Statična RHB jednađžba	12
3.1.2	Baza harmoničkog oscilatora	13
3.1.3	Gaussova mreža integracijskih čvorova	14
3.2	Simplex-y baza	15
3.2.1	Operator simplex-y simetrije	15
3.2.2	Matrice U i V u simplex-y bazi	16
3.3	Multipolni operator perturbacije \hat{F}	17
3.4	Invarijantni simplex blokovi	18
3.4.1	Rastav operatora $\hat{F}(\omega)$ i $\delta\hat{H}(\omega)$ na simplex blokove	18
3.4.2	Rastav jednađžbe linearnog odziva na simplex blokove	20
3.5	Samosuglasni postupak u rješavanju FAM jednađžbi	20
3.5.1	Iterativan postupak	20
3.5.2	Modificirana Broydenova metoda	21
3.6	Odzivna funkcija	22
3.7	Testovi FAM kôda	23
3.7.1	Usporedba s matričnom QRPA implementacijom	23
3.7.2	Kvadrupolna pobuđenja sferne jezgre	24
4	Ilustrativni računi	26
4.1	Dipolna E1 pobuđenja jezgre ^{20}Ne	26
4.2	Inducirana gustoća	28
5	Zaključak	31

Dodaci	32
A Inducirana matrica gustoće	32
A.1 Bogoliubovljeve $U(t)$ i $V(t)$ matrice	32
A.2 Matrica gustoće $\hat{\rho}(t)$	33
A.3 Prikaz operatora $\delta\hat{\rho}(\omega)$ u simplex-y bazi	34
B Računanje vremenski ovisnih gustoća i struja	35
B.1 Razvoj spinora u simplex-y bazi	35
B.2 Vremenski ovisne inducirane gustoće	36
B.3 Vremenski ovisne inducirane struje	38
B.4 Tehnički detalji	42
C Inducirani jednočestični Hamiltonijan	43
C.1 Funkcionalna derivacija $\delta\hat{h}_D(\omega)$	43
C.2 Prikaz operatora $\delta\hat{h}_D(\omega)$ u simplex-y bazi	45
D Računanje elektromagnetske interakcije	47
D.1 Laplacijani baznih funkcija	47
D.2 Metoda Greenove funkcije	48
Literatura	50

1 Uvod

Moderna teorija kvantne kromodinamike (QCD) uspješno opisuje međunukleonsku jaku interakciju pa bi se teorijska nuklearna fizika naivno mogla klasificirati kao posebno područje unutar QCD-a. Pokazuje se da su konkretni računi u nuklearnoj fizici primjenom QCD formalizma daleko od izvedivih. Danas se izuzetno složeni nuklearni sustavi mogu proučavati samo efektivnim modelima koji koriste fundamentalne teorije za mikroskopske temelje pri konstrukciji efektivnih interakcija. Najučinkovitiji pristup je do sada je već dobro razvijena teorija energijskih funkcionala gustoće, koja se koristi u raznim granama fizike gdje je prisutan kvantni mnogočestični problem. Jedan od glavnih izazova moderne teorijske nuklearne fizike je konstrukcija efektivnog energijskog funkcionala gustoće koji bi sa zadovoljavajućom točnošću reproducirao eksperimentalne podatke za sve jezgre duž mape nuklida. Takav funkcional bi se tada mogao vjerodostojno koristiti u raznim istraživanjima gdje eksperimentalni podaci nisu dostupni, kao npr. problem sinteze elemenata u zvijezdama u nuklearnoj astrofizici. Odziv atomske jezgare na vanjsku pobudu otkrivanju mnoge informacije o njenoj strukturi koje bi se, jednom kada se ugone svi parametri efektivnog funkcionala, trebale moći reproducirati u okviru korištenog modela¹. Za teorijsko proučavanje kolektivnih pobuđenja jezgara koristi se aproksimacija slučajnih faza² u okviru Hartree-Bogoliubovljevog modela. Konvencionalno rješavanje RPA jednadžbe, dobivene linearizacijom vremenski ovisne Hartree-Bogoliubovljeve jednadžbe, je računski prezahtjevno za sistematično proučavanje multipolnih pobuđenja deformiranih jezgara. U ovom radu implementirano je efikasno rješenje RPA jednadžbi nedavno predloženom metodom konačnih amplituda³ [1].

Rad je podijeljen u četiri poglavlja. U drugom poglavlju kratko su izneseni općeniti teorijski rezultati korišteni u radu. Treće poglavlje opisuje implementaciju teorije iz drugog poglavlja primijenjenu na konkretan funkcional gustoće i konkretna vanjska pobuđenja. U četvrtom poglavlju dani su ilustrativni rezultati dipolnih pobuđenja deformirane jezgre. U dodacima A-D nalaze se tehnički detalji bitni u implementaciji.

¹Npr. fotoapsorpcijski udarni presjeci koji su eksperimentalno izmjereni.

²*Random-Phase Approximation* (RPA).

³*Finite Amplitude Method* (FAM).

2 Teorijski formalizam

2.1 Relativistički nuklearni energijski funkcional gustoće

U standardnoj reprezentaciji kvantne hadronodinamike, jezgru opisujemo kao sustav neovisnih Diracovih čestica u srednjem polju (*mean-field* modeli) koji potječe od međudjelovanja nukleona izmjenom mezona i fotona. Budući da su energije koje razmatramo preniske za razlučivanje finije podstrukture, možemo konstruirati model kontaktnog međudjelovanja⁴. Pritom se izmjena mezona zamjenjuje efektivnim 4-fermionskim međudjelovanjem. Lagrangijan koji opisuje sustav nukleona možemo rastaviti na dijelove:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{Kin} - \mathcal{L}_{PC} - \mathcal{L}_D - \mathcal{L}_{EM}, \quad (2.1)$$

pri čemu su kinetički i elektromagnetski članovi dani standardnim izrazima:

$$\mathcal{L}_{Kin} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi, \quad (2.2)$$

$$\mathcal{L}_{EM} = e \frac{1+t_z}{2} \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu \psi + \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad (2.3)$$

dok je član kontaktne interakcije dan s:

$$\mathcal{L}_{PC} = \frac{1}{2} \alpha_S (\rho_v) (\bar{\psi} \psi) (\bar{\psi} \psi) + \frac{1}{2} \alpha_V (\rho_v) (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi) (\bar{\psi} \gamma_\mu \psi) + \frac{1}{2} \alpha_{TV} (\rho_v) (\bar{\psi} \vec{\tau} \gamma^\mu \psi) (\bar{\psi} \vec{\tau} \gamma_\mu \psi). \quad (2.4)$$

Član s derivacijom:

$$\mathcal{L}_D = \frac{1}{2} \delta_S (\partial_\nu \bar{\psi} \psi) (\partial^\nu \bar{\psi} \psi), \quad (2.5)$$

je nužan za kvantitativan opis radijusa jezgara. U ovom radu koristimo DD-PC1 (*Density-Dependent Point-Coupling*) parametrizaciju Lagrangijana koja se pokazala uspješnom u dosadašnjim proračunima osnovog stanja i pobuđenja jezgara [2]. U DD-PC1 parametrizaciji, jakosti vezanja α_S , α_V i α_{TV} , ovise o izoskalarnoj-vektorskoj gustoći ρ_v , koja je dana sljedećim *ansatzom*:

$$\alpha_i(\rho_v) = a_i + (b_i + c_i x) e^{-d_i x}, \quad x = \frac{\rho_v}{\rho_{sat}}, \quad i = S, T, TV, \quad (2.6)$$

⁴Point-coupling model.

gdje je $\rho_{\text{sat}} = 0.152 \text{ fm}^{-3}$, gustoća saturacije nuklearne materije. Parametar derivacije iznosi $\delta_S = -0.8149 \text{ fm}^4$, a ostali parametri dani su u tablici 2.1.

	S	V	TV
$a_i [\text{fm}^2]$	-10.0462	+5.9195	+1.8360
$b_i [\text{fm}^2]$	-9.1504	+8.8637	0
$c_i [\text{fm}^2]$	-6.4273	0	0
d_i	+1.3724	+0.6584	+0.6403

Tablica 2.1: Parametri DD-PC1 parametrizacije Lagrangijana

Legendreovom transformacijom možemo iz gustoće Lagrangijana izračunati gustoću Hamiltonijana te iz nje ukupnu energiju kao funkcional varijabli: ψ , $\bar{\psi}$ i A^μ . Ako se taj funkcional energije varira po svojim varijablama, dobiva se jednonukleonski Hamiltonijan (od sada sve zapisano u SI jedinicama⁵):

$$\hat{h}_D = c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + (\Sigma^0 + \Sigma_R^0) + (\Sigma_s + mc^2)\beta - \boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}_R). \quad (2.7)$$

Koristištena je standardna pokrata za matrice:

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbb{1} \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Nukleonske vlastite energije (*self-energies*) definirane su idućim relacijama:

$$\Sigma^\mu = \hbar \left\{ \alpha_V(\rho_v) j^\mu + \alpha_{TV}(\rho_v) \vec{j}^\mu \cdot \vec{\tau} \right\} + c \frac{1+t_z}{2} e A^\mu, \quad (2.9)$$

$$\Sigma_s = \hbar c \left\{ \alpha_S(\rho_v) \rho_s - \delta_s \square \rho_s \right\}, \quad (2.10)$$

$$\Sigma_R^\mu = \hbar \frac{j^\mu}{2\rho_v} \left\{ \alpha'_S(\rho_v) \rho_s^2 + \alpha'_V(\rho_v) \frac{j^\mu j_\mu}{c^2} + \alpha'_{TV}(\rho_v) \frac{\vec{j}^\mu \cdot \vec{j}_\mu}{c^2} \right\}. \quad (2.11)$$

U prethodnim formualama je ρ_s izoskalarna-skalarna gustoća, j^μ izoskalarna-vektorska četverostruja, a \vec{j}^μ izovektorska-vektorska četverostruja. Posljednji član Σ_R^μ , tzv. *re-arrangement* član, posljedica je varijacije konstanti vezanja koje imaju ovisnost o

⁵U ovom području nuklearne fizike uobičajen je prirodni sustav jedinica.

gustoći. Trenutno ne promatramo izmjenu naboja pa svuda možemo \vec{r} zamijeniti s \hat{t}_z i \vec{j}^μ zamijeniti s razlikom protonske i neutronske četverostruje : $j_{t_z=+1}^\mu - j_{t_z=-1}^\mu$. U d'Alembertovom operatoru $\square = \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \nabla^2$ možemo zanemariti vremenski član. Prilikom izvoda Hamiltonijana u SI jedinicama korištena je *West coast* (+, -, -, -) metrika te standardna konvencija za četverostruje $j^\mu = (c\rho, \mathbf{J})$ i elektromagnetski četveropotencijal $A^\mu = (\frac{1}{c}\phi, \mathbf{A})$.

Prethodno opisani model može se promatrati u stacionarnom slučaju:

$$\hat{h}_D |\psi_n\rangle = \epsilon |\psi_n\rangle. \quad (2.12)$$

Radi se o Diracovoj jednadžbi koja se mora samosuglasno rješavati. Naime, potencijali Σ^μ , Σ_s i Σ_R^μ ovise o izoskalarnoj-skalarnoj gustoći ρ_s , te o izovektorskoj \vec{j}^μ i izoskalarnoj j^μ četverostruji, koje su zadane rješenjima svojstvenog problema (2.12). U ovom radu fokusiramo se samo na parno-parne jezgre jer kod takvih jezgara, uz pretpostavku da je sustav invarijantan obzirom na inverziju vremena, u osnovnom stanju struje iščezavaju pa se rješavanje osnovnog stanja bitno pojednostavljuje. Također, uz simetriju vremeskog obrata, pretpostavljamo da je sustav invarijantan na simetriju pariteta te da se radi o aksijalno simetričnoj jezgri. Prethodno opisani model prikladan je za opis magičnih jezgara, dok u slučaju jezgre s otvorenim ljuskama moramo uključiti i korelacije sparivanja. U tu svrhu je razvijen Hartree-Bogoliubovljev model u kojoj su objedinjene čestica-šupljina interakcije na razini srednjeg polja zadane Hamiltonijanom (2.7), sa čestica-čestica interakcijama sparivanja. Slijedi kratki pregled osnovnih rezultata Relativističkog Hartree-Bogoliubovljevog (RHB) modela.

2.2 Vremenski ovisan relativistički Hartree-Bogoliubovljev model

Označimo s $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$ operatore stvaranja i poništenja u nekoj fiksnoj, dobro poznatoj bazi (primjerice baza harmoničkog oscilatora ili ravni valovi). Osnovno stanje jezgre opisano je kvazičestičnim vakuumom $|\Phi_0\rangle$ u odnosu na nezavisne kvazičestice, čiji su operatori stvaranja \hat{a}_μ^\dagger dani unitarnom Bogoliubovljevom transformacijom:

$$\hat{a}_\mu^\dagger = \sum_k U_{k,\mu} \hat{c}_k^\dagger + V_{k,\mu} \hat{c}_k. \quad (2.13)$$

Kvazičestična transformacija definirana je tako da dijagonalizira Hamiltonijan u statičnom slučaju:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mu} E_{\mu} \hat{a}_{\mu}^{\dagger} \hat{a}_{\mu}, \quad (2.14)$$

a koeficijenti transformacije;

$$U_{k,\mu} = \begin{pmatrix} f^{(U_{\mu})} \\ ig^{(U_{\mu})} \end{pmatrix}_k, \quad V_{k,\mu} = \begin{pmatrix} f^{(V_{\mu})} \\ ig^{(V_{\mu})} \end{pmatrix}_k, \quad (2.15)$$

su Hartree-Bogoliubovljeve valne funkcije (spinori) prikazane u fiksnoj bazi $\{\hat{c}_k^{\dagger}, \hat{c}_k\}$. Definiraju se matrica gustoće i tenzor sparivanja:

$$\hat{\rho}_{k,l} = \langle \Phi_0 | \hat{c}_l^{\dagger} \hat{c}_k | \Phi_0 \rangle, \quad \hat{\kappa}_{k,l} = \langle \Phi_0 | \hat{c}_l \hat{c}_k | \Phi_0 \rangle. \quad (2.16)$$

Ako se ukupna energija varira po svojim varijablama: $\hat{\rho}$, $\hat{\kappa}$ i $\hat{\kappa}^*$, i ako pretpostavimo da postoji moguća vremenska ovisnost obzirom da nas zanimaju pobuđenja jezgre, tada dobivamo Hartree-Bogoliubovljevu *jednadžbu gibanja* kvazičestičnih operatora:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{a}_{\mu}(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t) + \hat{F}(t), \hat{a}_{\mu}(t)], \quad (2.17)$$

gdje je vremenski ovisan Hamiltonijan dan s:

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) &= \sum_{k,l} \left\{ \hat{h}_D(t)_{k,l} - (mc^2 + \lambda) \delta_{k,l} \right\} \hat{c}_k^{\dagger} \hat{c}_l + \sum_{k>l} \left\{ \hat{\Delta}(t)_{k,l} \hat{c}_k^{\dagger} \hat{c}_l^{\dagger} + \hat{\Delta}(t)_{k,l}^* \hat{c}_l \hat{c}_k \right\} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{c}^{\dagger} & \hat{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{h}_D(t) - mc^2 - \lambda & \hat{\Delta}(t) \\ -\hat{\Delta}(t)^* & -(\hat{h}_D(t)^* - mc^2 - \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c} \\ \hat{c}^{\dagger} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Operator $\hat{F}(t)$ predstavlja jednočestični operator vanjske pobude, a $\hat{\Delta}$ je operator sparivanja, dok je λ kemijski potencijal kojeg treba ugoditi pri računanju osnovnog stanja tako da je očekivani broj protona (neturona) u osnovnom stanju jednak Z ($A - Z$). To je posljedica toga što uvođenjem sparivanja broj čestica više nije dobar kvantni broj. Ako u (2.16) uvrstimo invertiranu Bogoliubovljevu transformaciju, možemo zapisati matricu gustoće $\hat{\rho}(t)$ i tenzor sparivanja $\hat{\kappa}(t)$ pomoću Bogoliubovljevih matrica $U(t)$ i $V(t)$:

$$\hat{\rho}(t) = V(t)^* V(t)^T, \quad \hat{\kappa}(t) = V(t)^* U(t)^T. \quad (2.19)$$

2.3 Oscilacije malenih amplituda - QRPA

Zanima nas odziv jezgara na harmoničku vanjsku pobudu slabog intenziteta. Zato pretpostavljamo da operator pobude ima oscilatorno ponašanje frekvencije ω :

$$\hat{F}(t) = \eta \left(\hat{F}(\omega) e^{-i\omega t} + \hat{F}(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \right). \quad (2.20)$$

Promatramo samo jednu Fourierovu komponentu kojoj zadajemo jakost malim parametrom η . Kvazičestični operator se tada rastavlja na ravnotežni i inducirani dio:

$$\hat{a}_\mu(t) = \{ \hat{a}_\mu + \delta \hat{a}_\mu(t) \} e^{iE_\mu t/\hbar} \quad (2.21)$$

Kao i ostale operatore, u drugoj kvantizaciji, raspišemo operator $\hat{F}(\omega)$ u bazi operatora $\{ \hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k \}$:

$$\hat{F}(\omega) = \sum_{k,l} f(\omega)_{k,l} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger & \hat{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{f}(\omega) & 0 \\ 0 & -\hat{f}(\omega)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c} \\ \hat{c}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Obzirom da je RHB jednadžba gibanja dana u kvazičestičnoj bazi, trebamo operator zapisan u kvazičestičnoj bazi:

$$\hat{F}(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} \left\{ \hat{F}(\omega)_{\mu,\nu}^{20} \hat{a}_\nu \hat{a}_\mu + \hat{F}(\omega)_{\mu,\nu}^{02} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \right\} + \sum_{\mu,\nu} \hat{F}(\omega)_{\mu,\nu}^{11} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu. \quad (2.23)$$

U granici malog parametra η , drugi član ne doprinosi u linearnoj aproksimaciji pa ga odbacujemo. U praktičnim računima možemo izračunati koeficijente $\hat{f}(\omega)_{k,l}$ u bazi $\{ \hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k \}$, pa nam treba transformacijska formula kako dobiti $\hat{F}(\omega)^{20}$ i $\hat{F}(\omega)^{02}$ pomoću $\hat{f}(\omega)$. Unitarnu Bogoliubovljevu transformaciju možemo elegantnije zapisati:

$$\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c} \\ \hat{c}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Invertiranjem prethodne jednakosti (trivijalno zbog unitarnosti) i uvrštavanjem u (2.22), dobivamo:

$$\hat{F}(\omega)^{20} = U^\dagger \hat{f}(\omega) V^* - V^\dagger \hat{f}(\omega)^T U^*, \quad (2.25)$$

$$\hat{F}(\omega)^{02} = U^T \hat{f}(\omega)^T V - V^T \hat{f}(\omega) U. \quad (2.26)$$

U prethodnim formulama su U i V Bogoliubovljeve matrice iz osnovnog stanja jer se zadržavamo na linearnoj aproksimaciji. Vanjska perturbacija inducira oscilacije gustoće iste frekvencije oko osnovnog stanja. Te oscilacije gustoće induciraju potencijale u jednočestičnom Hamiltonijanu: $\hat{h}_D(t) = \hat{h}_D + \delta\hat{h}_D(t)$, i u operatoru sparivanja: $\hat{\Delta}(t) = \hat{\Delta} + \delta\hat{\Delta}(t)$, na samosuglasan način. Zato se Hamiltonijan (2.18) također dekomponira na dijelove: $\hat{H}(t) = \hat{H} + \delta\hat{H}(t)$, gdje je:

$$\delta\hat{H}(t) = \eta \left\{ \delta\hat{H}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta\hat{H}(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \right\}, \quad (2.27)$$

$$\delta\hat{H}(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} \left\{ \delta H(\omega)_{\mu,\nu}^{20} \hat{a}_\nu \hat{a}_\mu + \delta H(\omega)_{\mu,\nu}^{02} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \right\} + \sum_{\mu,\nu} \delta\hat{H}(\omega)^{11} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu. \quad (2.28)$$

U linearnoj aproksimaciji član $\delta\hat{H}(\omega)^{11}$ ne daje doprinos pa ga zanemarujemo. Ponovo nam je praktično računati u bazi $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$, pa trebamo pronaći vezu s kvazičestičnom bazom. Inducirani jednočestični Hamiltonijan i operator sparivanja mogu se napisati kao⁶:

$$\delta\hat{h}_D(t) = \eta \left\{ \delta\hat{h}_D(\omega) e^{-i\omega t} + \delta\hat{h}_D(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \right\}, \quad (2.29)$$

$$\delta\hat{\Delta}(t) = \eta \left\{ \delta\hat{\Delta}^{(+)}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta\hat{\Delta}^{(-)}(\omega) e^{+i\omega t} \right\}. \quad (2.30)$$

Pri tome su $\delta\hat{\Delta}^{(\pm)}(\omega)$ antisimetrični zbog toga što operator sparivanja mora biti antisimetričan, dok operator $\delta\hat{h}_D(\omega)$ ne mora biti nužno biti hermitski. Induciran Hamiltonijan (2.27) izražen preko $\delta\hat{H}(\omega)$ glasi:

$$\delta\hat{H}(\omega) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger & \hat{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\hat{h}_D(\omega) & \delta\hat{\Delta}^{(+)}(\omega) \\ -\delta\hat{\Delta}^{(-)}(\omega)^* & -\delta\hat{h}_D(\omega)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c} \\ \hat{c}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Uvrštavanjem inverzne Bogoliubovljeve transformacije (2.24), lako iščitamo:

$$\delta\hat{H}(\omega)^{20} = U^\dagger \delta\hat{h}_D(\omega) V^* - V^\dagger \delta\hat{h}_D(\omega)^T U^* + U^\dagger \delta\hat{\Delta}^{(+)}(\omega) U^* - V^\dagger \delta\hat{\Delta}^{(-)}(\omega) V^*, \quad (2.32)$$

⁶Vidjeti dodatak C.1 za detalje.

$$\delta\hat{H}(\omega)^{02} = U^T \delta\hat{h}_D(\omega)^T V - V^T \delta\hat{h}_D(\omega) U + U^T \delta\hat{\Delta}^{(-)}(\omega)^* U - V^T \delta\hat{\Delta}^{(+)}(\omega) V. \quad (2.33)$$

Dakle, u principu, ako znamo izračunati operatore $\delta\hat{h}_D(\omega)$ i $\delta\hat{\Delta}(\omega)^{(\pm)}$ u bazi $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$, pomoću relacija (2.25), (2.26), (2.32) i (2.33) možemo prikazati operatore $\hat{H}(t)$ i $\hat{F}(t)$ u kvazičestičnoj bazi $\{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\mu\}$. Taj prikaz nam treba u jednadžbi gibanja (2.17), jer tada možemo iskoristiti fermionske antikomutatorske relacije koje zadovoljavaju kvazičestični operatori:

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu\} = 0 \quad , \quad \{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\nu^\dagger\} = 0 \quad , \quad \{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\nu\} = \delta_{\mu,\nu}. \quad (2.34)$$

Naime, slično kao što su prikazani inducirani Hamiltonijan i operator perturbacije u kvazičestičnoj bazi, tako prikažemo i inducirani kvazičestični operator iz jednadžbe (2.21):

$$\delta\hat{a}_\mu(t) = \eta \sum_{\nu} \hat{a}_\nu^\dagger \{X(\omega)_{\nu,\mu} e^{-i\omega t} + Y(\omega)_{\nu,\mu}^* e^{+i\omega t}\}. \quad (2.35)$$

Inducirani kvazičestični operator $\delta\hat{a}_\mu(t)$ se može razviti samo po operatorima stvarnja jer bi operatori poništavanja samo davali međusobnu transformaciju. Uvedene koeficijente razvoja $X(\omega)_{\mu,\nu}$ i $Y(\omega)_{\mu,\nu}$ zovemo amplitude (*forward* i *backward*) linearnog odziva. Matrice $X(\omega)$ i $Y(\omega)$ moraju biti antisimetrične da bi bile zadovoljene fermionske antikomutatorske relacije $\{\hat{a}_\mu(t), \hat{a}_\nu(t)\} = 0$. Sada konačno možemo razviti jednadžbu gibanaja (2.17) po parametru η jer su svi operatori koje se javljaju u komutatoru prikazani u kvazičestičnoj bazi. Ako se zadržimo na linearnoj aproksimaciji, i ako iskoristimo da su kvazičestični operatori rješenja osnovnog stanja: $E_\mu \hat{a}_\mu = [\hat{a}_\mu, \hat{H}_0]$, slijedi jednadžba gibanaja za inducirane kvazičestične operatore:

$$i\hbar \frac{\partial \delta\hat{a}_\mu(t)}{\partial t} = E_\mu \delta\hat{a}_\mu(t) + [\hat{H}_0, \delta\hat{a}_\mu(t)] + [\delta\hat{H}(t) + \hat{F}(t), \hat{a}_\mu]. \quad (2.36)$$

Komutatore u prethodnoj jednadžbi sada možemo riješiti jer su operatori $\delta\hat{H}(t)$ i $\hat{F}(t)$ prikazani u kvazičestičnoj bazi: (2.23) i (2.28). Direktnim uvrštavanjem i manipulacijom fermionskih antikomutatorskih relacija za kvazičestice, slijede jednadžbe linearnog odziva koje opisuju kako se ponašaju amplitude $X(\omega)$ i $Y(\omega)$ pod djelovanjem

vanjske perturbacije i međunukleonske interakcije:

$$\{E_\mu + E_\nu - \hbar\omega\}X(\omega)_{\mu,\nu} + \delta\hat{H}(\omega)_{\mu,\nu}^{20} = -\hat{F}(\omega)_{\mu,\nu}^{20} \quad (2.37)$$

$$\{E_\mu + E_\nu + \hbar\omega\}Y(\omega)_{\mu,\nu} + \delta\hat{H}(\omega)_{\mu,\nu}^{02} = -\hat{F}(\omega)_{\mu,\nu}^{02} \quad (2.38)$$

U prethodnim se jednadžbama uvodi imaginaran parametar razmazanosti (*Lorentzian smearing*) u frekvenciji:

$$\hbar\omega \rightarrow \hbar\omega + i\gamma, \quad (2.39)$$

kako bi se izbjeglo divergiranje odzivne funkcije na rezonantnoj frekvenciji. Ako se nastave razvijati $\delta\hat{H}(\omega)^{20}$ i $\delta\hat{H}(\omega)^{02}$ po svojim varijablama (matrica gustoće i tenzor sparivanja) dobije se poznata QRPA (*Quasiparticle Random-Phase Approximation*) matrična jednadžba:

$$\left(\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} - \hbar\omega \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} X(\omega) \\ Y(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{F}(\omega)^{20} \\ \hat{F}(\omega)^{02} \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

gdje su matrice A i B dobivene razvijanjem i određene su drugim derivacijama energijskog funkcionala. Multipolna pobuđenja sfernih jezgara sistematično su istražena matričnim QRPA formalizmom. Za deformirane jezgre, dimenzije matrica A i B naglo rastu što je bitno otežavalo proučavanje multipolnih pobuđenja u srednje teškim i teškim jezgrama zbog prevelikih zahtjeva za računalnim resursima. Nedavno predložena FAM metoda (*Finite Amplitude Method*) spretno zaobilazi taj problem.

2.4 FAM metoda

Glavni cilj FAM metode je izbjeći dugotrajne proračune matričnih elemenata matrica A i B te njihovu dijagonalizaciju koja s porastom dimenzije matrica postavlja značajne zahtjeve na računalne resurse. Za danu frekvenciju ω , amplitude $X(\omega)$ i $Y(\omega)$ možemo formalno izraziti iz jednadžbi linearnog odziva (2.37) i (2.38):

$$X(\omega)_{\mu,\nu} = -\frac{\hat{F}(\omega)_{\mu,\nu}^{20} + \delta\hat{H}(\omega)_{\mu,\nu}^{20}}{E_\mu + E_\nu - \hbar\omega - i\gamma}, \quad (2.41)$$

$$Y(\omega)_{\mu,\nu} = -\frac{\hat{F}(\omega)_{\mu,\nu}^{02} + \delta\hat{H}(\omega)_{\mu,\nu}^{02}}{E_\mu + E_\nu + \hbar\omega + i\gamma}, \quad (2.42)$$

i problem rješavati iterativno dok se ne postigne samosuglasnost. Naime, inducirani Hamiltonijani $\delta\hat{H}(\omega)^{20}$ i $\delta\hat{H}(\omega)^{02}$, zadani su prema (2.32) i (2.33) induciranim operatorima $\delta\hat{h}_D(\omega)$ i $\delta\Delta^{(\pm)}(\omega)$ koji ovise o induciranim strujama i gustoćama, a inducirane struje i gustoće možemo izraziti pomoću amplituda $X(\omega)$ i $Y(\omega)$.

Izabere se konkretna baza $\{\hat{c}_k, \hat{c}_k^\dagger\}$ i u njoj se za konkretan operator perturbacije $\hat{f}(\omega)$ (npr. multipolno pobuđenje) izračunaju $\hat{F}(\omega)^{20}$ i $\hat{F}(\omega)^{02}$ prema (2.25) i (2.26), gdje su U i V matrice prikazane također u bazi $\{\hat{c}_k, \hat{c}_k^\dagger\}$, i one su poznate iz rješenja osnovnog stanja. U prvoj se iteraciji izračuna tzv. Hartree odziv u kojem se uzima $\delta\hat{H}(\omega)^{20} = \delta\hat{H}(\omega)^{02} = 0$, i odmah dobivamo prvu aproksimaciju za amplitude $X(\omega)$ i $Y(\omega)$. Razvijajući Bogoliubovljeve matrice $V(t)$ i $U(t)$ i poznavajući amplitude $X(\omega)$ i $Y(\omega)$, može se pokazati (vidjeti dodatke A.1 i A.2) da će se i matrica gustoće moći rastaviti na matricu gustoće osnovnog stanja te induciranu matricu gustoće:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \eta \left\{ \delta\hat{\rho}(\omega)e^{-i\omega t} + \delta\hat{\rho}(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \right\}, \quad (2.43)$$

gdje $\delta\hat{\rho}(\omega)$ možemo izračunati pomoću amplituda izračunatih u prvoj iteraciji jer je dana s:

$$\delta\hat{\rho}(\omega) := UX(\omega)V^T + V^*Y(\omega)^T U^\dagger. \quad (2.44)$$

U Hartree-Bogoliubovljevoj teoriji [3], pomoću matrice gustoće u bazi $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$, moguće je izračunati gustoću u koordinatnom prostoru (primjerice vektorsku gustoću):

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{k,l} \phi_k(\mathbf{r}) \hat{\rho}(t)_{k,l} \phi_l(\mathbf{r})^*, \quad (2.45)$$

koja se također može rastaviti na gustoću osnovnog stanja te induciranu gustoću (detaljnije o tome u konkretnoj bazi harmoničkog oscilatora koja poštuje simplex-y simetriju vidjeti u dodatku B.2):

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r})_0 + \eta \left\{ \delta\rho(\omega, \mathbf{r})e^{-i\omega t} + \delta\rho(\omega, \mathbf{r})^* e^{+i\omega t} \right\}. \quad (2.46)$$

Pomoću induciranih gustoća i struja može se linearizacijom jednočestičnog Hamiltonijana (2.7) izračunati $\delta\hat{h}_D(\omega)$. U prvim implementacijama [4, 5] FAM metode jednočestični Hamiltonijan se linearizirao numeričkim deriviranjem. U ovom i kasnijim radovima [6] linearizacija je napravljena funkcionalnom derivacijom po gustoćama i strujama čime je izbjegnuta ovisnost rezultata o parametru η u numeričkom deriviranju. Detalji funkcionalne derivacije Hamiltonijana u DD-PC1 parametrizaciji (2.7) dani su u dodatku C.1. Slično se može rastaviti i tenzor sparivanja u prvoj iteraciji:

$$\hat{\kappa}(t) = \hat{\kappa}_0 + \eta \{ \delta\hat{\kappa}^{(+)}(\omega)e^{-i\omega t} + \delta\hat{\kappa}^{(-)}(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \}, \quad (2.47)$$

$$\delta\hat{\kappa}^{(+)}(\omega) = UX(\omega)U^T + V^*Y(\omega)^T V^\dagger, \quad (2.48)$$

$$\delta\hat{\kappa}^{(-)}(\omega) = V^*X(\omega)^\dagger V^\dagger + UY(\omega)^*U^T, \quad (2.49)$$

pomoću kojeg se mogu izračunati linearizirani operatori sparivanja $\delta\hat{\Delta}^\pm(\omega)$, jer oni po definiciji ovise samo o tenzoru sparivanja. Na opisani način iz amplituda $X(\omega)$ i $Y(\omega)$ u prvoj iteraciji možemo izračunati sve potrebne matrice koje se javljaju u $\delta\hat{H}(\omega)^{20}$ i $\delta\hat{H}(\omega)^{02}$ iz jednažbi (2.32) i (2.33). Ovime je završena prva iteracija jer uvrštavanjem nazad u jednažbe linearnog odziva (2.41) i (2.42), možemo izračunati amplitude $X(\omega)$ i $Y(\omega)$ u sljedećoj iteraciji. Iterativan postupak se zaustavlja kada se amplitude dobivene na kraju i -te iteracije razlikuju za manje od zadane preciznosti ε (u nekoj matričnoj normi) od polaznih amplituda na početku i -te iteracije. Pri tome se mogu koristiti već dobro poznate i razvijene metode postizanja samokonzistencije koje se koriste u računanju osnovnog stanja jezgre. Još jedna prednost FAM računa je vrlo jednostavna paralelizacija numeričkih računa obzirom da se čitav račun radi za svaku frekvenciju ω neovisno.

Iako je u ovom radu korištena DD-PC1 parametrizacija, opisana FAM metoda posve je izvediva za bilo koji drugi relativistički nuklearni energijski funkcional gustoće koji modelira jednočestični Hamiltonijan \hat{h}_D . Dinamičke interakcije sparivanja su u ovom radu ignorirane ($\delta\Delta^{(\pm)}(\omega) = 0$) iako je u računima osnovnog stanja korištena TMR separabilna interakcija sparivanja [7], nastala kao separabilna varijanta često

korištene Gognyjeve sile s ciljem ubrzavanja numeričkih računa. Zato je u idućem poglavlju potpuno ignorirano računanje induciranih tenzora sparivanja $\delta\hat{\kappa}^{(\pm)}(\omega)$ i računanje induciranih operatora sparivanja $\delta\Delta^{(\pm)}(\omega)$ iako bi i njih trebalo uzeti u obzir.

3 Numerička implementacija

U ovom poglavlju objašnjena je numerička implementacija FAM metode. Konkretni numerički kod moguće je preuzeti na [1].

3.1 Osnovno stanje

Da bismo proveli FAM račun za neku konkretnu jezgru, potrebne su nam jedino Bogoliubovljeve matrice U i V iz rješenja osnovnog stanja. U ovom potpoglavlju ukratko opisujemo postupak rješavanja stacionarne relativističke Hartree-Bogoliubovljeve jednadžbe. Detaljna analiza svih proračuna osnovnog stanja dana je u [8, 9].

3.1.1 Statična RHB jednadžba

Promatramo statičnu varijantu Hartree-Bogoliubovljeve jednadžbe gibanja (2.17) tako da stavimo $\hat{a}_\mu(t) = \hat{a}_\mu e^{-iE_\mu t/\hbar}$ i $\hat{F}(t) = 0$:

$$\left[\hat{a}_\mu, \hat{H}_0 \right] = E_\mu \hat{a}_\mu, \quad (3.1)$$

što je ekvivalentno zahtjevu da kvazičestični operatori dijagonaliziraju Hamiltonijan (2.14). Hamiltonijan osnovnog stanja \hat{H}_0 dan je u (2.18), uz izbačenu vremesku ovisnost. Pošto nas zanimaju Bogoliubovljeve matrice, ako u prethodnu komutatorsku relaciju ubacimo Bogoliubovljevu transformaciju (2.13) i Hamiltonijan \hat{H}_0 , dobivamo statičnu Hartree-Bogoliubovljevu jednadžbu kao problem svojstvenih vrijednosti:

$$\begin{pmatrix} \hat{h}_D - mc^2 - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D^* + mc^2 + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

3.1.2 Baza harmoničkog oscilatora

Spinor U_μ određuje koeficijente Bogoliubovljeve transformacije $\{U_{k,\mu}\}_k$, slično tako i spinor V_μ . RHB jednadžba riješena je razvojem spinora u bazi harmoničkog oscilatora, čime se prelazi s operatorskog na matricni *eigenvalue* problem u konfiguracijskom prostoru koji se može riješiti numeričkom dijagonalizacijom. Preciznije rečeno, velika i mala komponenta $U_\mu(\mathbf{r})$ i $V_\mu(\mathbf{r})$ spinora razvijena je u bazi:

$$f^{(U_\mu/V_\mu)}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{(U_\mu/V_\mu)} |\Phi(\mathbf{r})\rangle_{\alpha} \quad , \quad ig^{(U_\mu/V_\mu)}(\mathbf{r}) = i \sum_{\tilde{\alpha}} g_{\tilde{\alpha}}^{(U_\mu/V_\mu)} |\Phi(\mathbf{r})\rangle_{\tilde{\alpha}} \quad , \quad (3.3)$$

gdje su vektori baze:

$$|\Phi_{\alpha}(\mathbf{r})\rangle = |n_z, n_r, \Lambda, m_s, t_z\rangle = \phi_{n_z}(z) \phi_{n_r}^{|\Lambda|}(r_{\perp}) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \chi_{m_s} \chi_{t_z} \quad , \quad (3.4)$$

$$\phi_{n_z}(z) = \frac{1}{\sqrt{b_0 b_z}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!}} H_{n_z}(x) e^{-x^2/2} \quad , \quad x = \frac{z}{b_0 b_z} \quad , \quad (3.5)$$

$$\phi_{n_r}^{|\Lambda|}(r_{\perp}) = \frac{1}{b_0 b_r} \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + |\Lambda|)!}} \sqrt{2} \eta^{|\Lambda|/2} L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta) e^{-\eta/2} \quad , \quad \eta = \left(\frac{r_{\perp}}{b_0 b_r} \right)^2 \quad , \quad (3.6)$$

svojevrsne funkcije deformiranog aksijalno simetričnog oscilatora:

$$V(r_{\perp}, z) = \frac{\hbar^2}{2m b_0^4} \left(\frac{z^2}{b_z^4} + \frac{r_{\perp}^2}{b_r^4} \right) \quad . \quad (3.7)$$

Baza je definirana s dva parametra: b_0 i β_0 , gdje β_0 zadaje deformiranost baze:

$$b_z = \exp \left(\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \beta_0 \right) \quad , \quad b_r = \exp \left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \beta_0 \right) \quad . \quad (3.8)$$

Parametri b_0 i β_0 su u načelu proizvoljni, ali u praktičnim računima moguće je koristiti samo bazu konačne dimezije pa spretan odabir parametara b_0 i β_0 može povećati preciznost razvoja spinora u oscilatorskoj bazi. Obično se koristi rezultat jednosa-tvnog *shell* modela [10] koji daje parametar $b_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ iz procjene energijskog procjepa $\hbar\omega_0 = 41A^{1/3}$ MeV. Parametar β_0 obično se postavlja na nulu ili se odabire u skladu s očekivanom vrijednosti deformacije jezgre koju promatramo. U razvoju velike komponente spinora (3.3) sumira se po svim (n_z, n_r, Λ, m_s) takvima da

je $2n_r + |\Lambda| + n_z \leq N_{\max}$, dok se za malu komponentu sumira po svim $(\tilde{n}_z, \tilde{n}_r, \tilde{\Lambda}, \tilde{m}_s)$ takvima da je $2\tilde{n}_r + |\tilde{\Lambda}| + \tilde{n}_z \leq N_{\max} + 1$. Broj N_{\max} određuje broj oscilatorskih ljuski razvoja. Ovaj način razvoja je nužan za izbjegavanje pojave spurioznih stanja [11].

Zbog pretpostavke da je jezgra aksijalno simetrična te da je invarijantna s obzirom na simetriju pariteta Π i obrat vremena, slijedi da su ukupna projekcija angularnog momenta $\Omega = \Lambda + m_s$ i paritet Π dobri kvantni brojevi. Zato se baza organizira u Ω^Π invarijantne blokove, te se u konfiguracijskom prostoru svaki blok RHB jednadžbe rješava neovisno. Također je zbog invarijantnosti na vremenski obrat dovoljno gledati samo pozitivne $\Omega > 0$ što znači da možemo razvijati samo po nenegativnim $\Lambda \geq 0$. Takva blokovska organizacija baze drastično ubrzava račun.

3.1.3 Gaussova mreža integracijskih čvorova

RHB matrica u konfiguracijskom prostoru kao matrice elemente sadrži prikaze operatora \hat{h}_D i Δ u bazi harmoničkog oscilatora (3.5). To znači da će njihov račun zahtijevati velik broj numeričkih integracija, pri npr. računanju $\langle \Phi_{\alpha_1} | \hat{h}_D | \Phi_{\alpha_2} \rangle$. Bazne funkcije trnu eksponencijalno, te su do na eksponencijalan faktor zapravo polinomi. Prirodno se nameću Gaussove integracijske formule koje su dizajnirane za precizno integriranje funkcija koje su dobro aproksimirane polinomom pomnožen težinskom funkcijom [12] (u ovom slučaju eksponencijalna funkcija). Za integriranje po r_\perp koordinati koristi se Gauss-Laguerrova integracija s $N_{GL} = 48$ čvorova, dok pri integriranju po z koordinati možemo zbog refleksijske simetrije integrirati samo po nenegativnom dijelu $z \geq 0$, gdje se koristi Gauss-Hermiteova integracija s $N_{GH} = 48$ nenegativnih čvorova. Dobivenu mrežu čvorova nazivamo Gaussova mreža i zapravo nas svi potencijali i sve gustoće zanimaju samo na Gaussovoj mreži jer samo njihove vrijednosti koristimo u numeričkim integracijama pri računanju RHB matrice u konfiguracijskom prostoru.

Slično kao u FAM-u, iterativan postupak se zaustavlja kada se izračunata RHB matrica u i -toj iteraciji razlikuje za manje od ε (u $\|\cdot\|_\infty$ matricnoj normi) od matrice u prethodnoj iteraciji. Kao rezultat dobijemo samosuglasne spinore U_μ i V_μ u bazi oscilatora, koje organiziramo u Bogoliubovljeve matrice U i V te s njima možemo započeti FAM račun.

nezavisna

3.2 Simplex-y baza

3.2.1 Operator simplex-y simetrije

Organizacija baze po Ω^Π blokovima, opisana u računu osnovnog stanja, nije korisna u FAM računu jer multipolni operator perturbacije \hat{F} miješa stanja iz različitih Ω^Π blokova. Ipak postoji simetrija i pripadna baza u kojoj će se jednačbe rastaviti na dva simplex bloka. Radi se o tzv. *simplex-y* bazi i simetriji. Definiramo simplex-y operator \hat{S}_y kao kompoziciju operatora pariteta i operatora rotacije za kut π oko y osi:

$$\hat{S}_y = \hat{P}e^{-i\pi\hat{J}_y/\hbar} = \hat{P}e^{-i\pi\hat{L}_y/\hbar}e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar}. \quad (3.9)$$

Lako se vidi da je $e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar} = -i\hat{\sigma}_y$ te da operator $\hat{P}e^{-i\pi\hat{L}_y/\hbar}$ na prostornom dijelu vektora djeluje transformacijom $r_\perp \rightarrow r_\perp$, $z \rightarrow z$, $\varphi \rightarrow 2\pi - \varphi$. Zato \hat{S}_y operator djeluje na svojstvene vektore harmoničkog oscilatora kao:

$$\hat{S}_y |n_z, n_r, \Lambda, m_s\rangle = 2m_s |n_z, n_r, -\Lambda, -m_s\rangle. \quad (3.10)$$

Pri tome treba imati na umu da u slučaju djelovanja na spinor, operator pariteta \hat{P} još djeluje Diracovom γ^0 matricom. Svojstveni vektori operatora \hat{S}_y mogu se konstruirati iz svojstvenih vektora oscilatora:

$$|n_z, n_r, \Lambda, s = +i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [i |n_z, n_r, \Lambda, \uparrow\rangle + |n_z, n_r, -\Lambda, \downarrow\rangle], \quad (3.11)$$

$$|n_z, n_r, \Lambda, s = -i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|n_z, n_r, \Lambda, \uparrow\rangle + i |n_z, n_r, -\Lambda, \downarrow\rangle]. \quad (3.12)$$

Pretpostavljamo da je sustav invarijantan na simplex-y simetriju pa zato u FAM računu kao bazu za razvoj spinora (3.3) koristimo svojstvene vektore operatora \hat{S}_y . Detalji vezani uz simplex-y bazu dani su u dodacima B.1 i B.4. Svojstveni vektori oscilatora pod djelovanjem operatora obrata vremena $\hat{T} = -i\hat{\sigma}_y\hat{K}$, transformiraju se kao:

$$\hat{T} |n_z, n_r, \Lambda, m_s\rangle = 2m_s |n_z, n_r, -\Lambda, -m_s\rangle, \quad (3.13)$$

pa je transformacija simplex-y baznih vektora na obrat vremena:

$$\hat{T} |n_z, n_r, \Lambda, s = +i\rangle = - |n_z, n_r, \Lambda, s = -i\rangle, \quad (3.14)$$

$$\hat{T} |n_z, n_r, \Lambda, s = -i\rangle = + |n_z, n_r, \Lambda, s = +i\rangle. \quad (3.15)$$

3.2.2 Matrice U i V u simplex-y bazi

Rezultat rješenja osnovnog stanja su U i V matrice prikazane u bazi oscilatora. Sada ih treba prikazati u simplex-y bazi jer FAM račun provodimo u simplex-y bazi. Moguć je direktan prijelaz manipulacijom matričnih prikaza ili alternativno, ponovo dijagonalizirati RHB Hamiltonijan u novoj bazi korištenjem potencijala i sparivanja koji su već samokonzistentna rješenja osnovnog stanja. Potonji pristup korišten je kao test ispravnosti prijelaza u novu bazu prvom metodom jer obzirom da u simplex-y bazi nemamo blokovsku strukturu Hamiltonijana osnovnog stanja, sama dijagonalizacija Hamiltonijana postaje računski zahtjevana za velike brojeve oscilatorskih ljuski N_{\max} (primjerice za $N_{\max} \geq 12$). Zbog simetrije na vremensku inverziju, u osnovnom stanju promatrane su samo pozitivne vrijednosti ukupnog angularnog momenta $\Omega > 0$ jer su koeficijenti u razvoju dvostruko degeneriranog spinora $U_\mu(\mathbf{r})$ i $V_\mu(\mathbf{r})$ jednaki kao i *time-reversed* spinorima $\hat{T}U_\mu(\mathbf{r})$ i $\hat{T}V_\mu(\mathbf{r})$. Zato su i njihove unitarno transformirane linearne kombinacije:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(iU_\mu(\mathbf{r}) + \hat{T}U_\mu(\mathbf{r}) \right), \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(U_\mu(\mathbf{r}) + i\hat{T}U_\mu(\mathbf{r}) \right), \quad (3.16)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(iV_\mu(\mathbf{r}) + \hat{T}V_\mu(\mathbf{r}) \right), \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(V_\mu(\mathbf{r}) + i\hat{T}V_\mu(\mathbf{r}) \right), \quad (3.17)$$

također svostveni spinori osnovnog stanja. Ako je Hamiltonijan \hat{H}_0 invarijantan obzirom na simplex-y simetriju (preciznije, vrijedi $[\hat{H}_0, \hat{S}_y] = 0$), može se pokazati [13] da će Bogoliubovljeve matrice U i V imati blokovsku strukturu:

$$U = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & u^* \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & -v^* \\ v & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Koeficijenti podmatrica u i v od matrica U i V u simplex-y bazi dani su transformacijom matrica U i V osnovnog stanja u bazi oscilatora s ograničenjem $\Omega > 0$:

$$\begin{cases} f_{(n_z, n_r, \Lambda = +\Omega - \frac{1}{2}, s = \pm i)}^{(u_\mu/v_\mu)} = 1 \times f_{(n_z, n_r, \Lambda = \Omega - \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2})}^{(U_\mu, V_\mu)}, \\ f_{(n_z, n_r, \Lambda = -\Omega - \frac{1}{2}, s = \pm i)}^{(u_\mu/v_\mu)} = i \times f_{(n_z, n_r, \Lambda = \Omega + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2})}^{(U_\mu, V_\mu)}, \\ g_{(n_z, n_r, \Lambda = +\Omega - \frac{1}{2}, s = \pm i)}^{(u_\mu/v_\mu)} = i \times g_{(n_z, n_r, \Lambda = \Omega - \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2})}^{(U_\mu, V_\mu)}, \\ g_{(n_z, n_r, \Lambda = -\Omega - \frac{1}{2}, s = \pm i)}^{(u_\mu/v_\mu)} = 1 \times g_{(n_z, n_r, \Lambda = \Omega + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2})}^{(U_\mu, V_\mu)}. \end{cases} \quad (3.19)$$

Još jedan korišten test pomoću kojeg je provjereno jesu li U i V korektno transformirane u simplex-y bazu je provjera unitarnosti Bogoliubovljeve transformacije (2.24).

3.3 Multipolni operator perturbacije \hat{F}

U ovom potpoglavlju specificiran je operator perturbacije $\hat{F}(\omega)$ u simplex-y bazi $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$ tako što je zadan operator $\hat{f}(\omega)$ iz (2.22). Za $1 \leq J$ i $K \leq J$ definiramo jednočestični operator perturbacije (u sfernom koordinatnom sustavu):

$$\hat{f}_J^K(\mathbf{r}) := \frac{r^J}{\sqrt{2 + 2\delta_{K,0}}} [Y_J^K(\theta, \phi) + Y_J^K(\theta, \phi)^*] = \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{K,0}}} r^J \operatorname{Re} [Y_J^K(\theta, \phi)], \quad (3.20)$$

dok se za $J = 0$ pobuđenje koristi konvencija: $\hat{f}_{J=0}^{K=0}(\mathbf{r}) = r^2$. Kut ϕ u sfernom sustavu odgovara kutu φ u cilindričnim sustavu pa se iz oblika kuglinih funkcija lako vidi da će operator \hat{f}_J^K generirati pobudu kutne ovisnosti $\cos(K\varphi)$. To svojstvo nam omogućuje separaciju kutnog dijela problema, a time i redukciju dimenzije s tri na dvije jer će se kutni dio manifestirati kao selekcijsko pravilo. U ovom radu ćemo se ograničiti na monopolna ($J = 0$), dipolna ($J = 1$) i kvadrupolna ($J = 2$) pobuđenja u izoskalarnom i izovektorskom kanalu. Poopćenje na više multipole je trivijalno. Konačni izrazi za jednočestične operatore u cilindričnom sustavu su:

$$\hat{f}_{J=0}^{K=0}(\mathbf{r}) = r_\perp^2 + z^2, \quad (3.21)$$

$$\begin{cases} \hat{f}_{J=1}^{K=0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} z, \\ \hat{f}_{J=1}^{K=1}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{3}{\pi}} r_\perp (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}), \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\begin{cases} \hat{f}_{J=2}^{K=0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(2z^2 - r_{\perp}^2), \\ \hat{f}_{J=2}^{K=1}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}r_{\perp}z(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}), \\ \hat{f}_{J=2}^{K=2}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{15}{\pi}}r_{\perp}^2(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}). \end{cases} \quad (3.23)$$

Ukupan izoskalarni operator dobije se zbrajanjem doprinosa protona i neutrona:

$$\hat{f}_{J,T=0}^K = \sum_{p=1}^Z \hat{f}_J^K(p) + \sum_{n=1}^{A-Z} \hat{f}_J^K(n), \quad (3.24)$$

dok se izovektorski dobije množenjem svakog operatora s pripadnim izospinom:

$$\hat{f}_{J,T=1}^K = \sum_{p=1}^Z \hat{f}_J^K(p) - \sum_{n=1}^{A-Z} \hat{f}_J^K(n). \quad (3.25)$$

Iznimka je dipolni izovektorski operator koji definiramo tako da se eliminira gibanje centra mase atomske jezgre:

$$\hat{f}_{J=1,T=1}^K = \frac{Z(A-Z)}{A} \left[\frac{1}{Z} \sum_{p=1}^Z \hat{f}_J^K(p) - \frac{1}{A-Z} \sum_{n=1}^{A-Z} \hat{f}_J^K(n) \right]. \quad (3.26)$$

Zapravo nas u FAM računu zanimaju matični elementi operatora \hat{f}_J^K :

$$\langle n'_z, n'_r, \Lambda', s' | \hat{f}_J^K | n_z, n_r, \Lambda, s \rangle = \delta_{s,s'} \delta_{|\Lambda-\Lambda'|,K} \langle n'_z, n'_r, \Lambda' | \hat{f}_J^K | n_z, n_r, \Lambda \rangle. \quad (3.27)$$

Integral po kutnom dijelu i spinski skalarni produkti daju selekcijska pravila $s = s'$ i $|\Lambda - \Lambda'| = K$ pa preostaje integral po z i r_{\perp} . Integral po z koordinati može se egzaktno riješiti dok se integral po r_{\perp} dijelu računa numerički. To ne predstavlja problem jer se matični elementi operatora računaju prije iterativnog postupka pa ih možemo spremati i koristiti tokom iteracija.

3.4 Invarijantni simplex blokovi

3.4.1 Rastav operatora $\hat{F}(\omega)$ i $\delta\hat{H}(\omega)$ na simplex blokove

Simplex-y simetrija omogućava rastav svih operatora koji se javljaju u FAM jednadžbama na dva invarijantna simplex bloka. Bogoliubovljeve U i V matrice su već rastavljene na dva bloka (3.18). Slično želimo napraviti i za ostale operatore. Bitno

je uočiti da idući rezultati ovise o uređaju vektora simplex-y baze te zato bazu organiziramo također u dva bloka kako je objašnjeno u dodatku B.1. Najprije zbog selekcijskog pravila δ_{s_1, s_2} iz (3.27), vidimo da se matrica \hat{f} dekomponira na dva identična bloka:

$$\hat{f}_J^K = \begin{pmatrix} \hat{f}_1 & 0 \\ 0 & \hat{f}_1 \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

gdje je \hat{f}_1 simetrična realna matrica: $\hat{f}_1 = \hat{f}_1^T = \hat{f}_1^\dagger$. Zatim iz (2.25), uvrštavanjem blokovske strukture od U , V i \hat{f}_J^K slijedi da je:

$$\hat{F}(\omega)^{20} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{f}(\omega)^{20} \\ -[\hat{f}(\omega)^{20}]^* & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{f}(\omega)^{20} = - \left(u^\dagger \hat{f}_1 v + [u^\dagger \hat{f}_1 v]^\dagger \right). \quad (3.29)$$

Analogno iz (2.26) slijedi da je:

$$\hat{F}(\omega)^{02} = \begin{pmatrix} 0 & [\hat{f}(\omega)^{20}]^* \\ -\hat{f}(\omega)^{20} & 0 \end{pmatrix} = -[\hat{F}(\omega)^{20}]^*. \quad (3.30)$$

Može se pokazati direktno iz oblika DD-PC1 Hamiltonijana (C.2), da će se inducirani jednočestični Hamiltonijan također rastaviti na dva simplex bloka:

$$\delta \hat{h}_D(\omega) = \begin{pmatrix} \delta \hat{h}_1(\omega) & 0 \\ 0 & \delta \hat{h}_2(\omega) \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

To vrijedi jer matricni elementi $\langle k_1, -i | \delta \hat{h}_D(\omega) | k_2, +i \rangle = \langle k_1, +i | \delta \hat{h}_D(\omega) | k_2, -i \rangle = 0$ iščezavaju, pa ne dolazi do miješanja simplex blokova. Vektori $|k_1, \pm i\rangle$, $|k_2, \pm i\rangle$, dani su u (B.3). Detaljnom analizom matricnih elemenata matrica $\delta \hat{h}_1(\omega)$ i $\delta \hat{h}_2(\omega)$ može se pokazati da imaju sljedeći oblik:

$$\delta \hat{h}_1(\omega) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad \delta \hat{h}_2(\omega) = \begin{pmatrix} A & -C^T \\ -B^T & D \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

gdje je A simetrična $n_f \times n_f$ matrica, D simetrična $n_g \times n_g$ matrica, a B i C su matrice dimenzija redom $n_f \times n_g$ i $n_g \times n_f$. Detalji vezani uz matrice A , B , C i D dani su u dodatku C.2. Opet vidimo da se i matrica $\delta \hat{h}_D(\omega)$ rastavlja na dva simplex bloka gdje jedan blok potpuno određuju drugi kao što je slučaj kod matrice \hat{f}_J^K . Iz (2.32),

uvrštavanjem blokovske strukture od U , V i $\delta\hat{h}_D(\omega)$ slijedi da je:

$$\delta\hat{H}(\omega)^{20} = \begin{pmatrix} 0 & \delta\hat{h}(\omega)^{20} \\ -[\delta\hat{h}(\omega)^{20}]^T & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta\hat{h}(\omega)^{20} = -\left(u^\dagger\delta\hat{h}_1(\omega)v + v^\dagger\delta\hat{h}_2(\omega)^T u\right). \quad (3.33)$$

Analogno iz (2.33) slijedi da je:

$$\delta\hat{H}(\omega)^{02} = \begin{pmatrix} 0 & \delta\hat{h}(\omega)^{02} \\ -[\delta\hat{h}(\omega)^{02}]^T & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta\hat{h}(\omega)^{02} = -\left(v^\dagger\delta\hat{h}_1(\omega)u + u^\dagger\delta\hat{h}_2(\omega)^T v\right)^T. \quad (3.34)$$

3.4.2 Rastav jednadžbe linearnog odziva na simplex blokove

Sada možemo, koristeći hermitičnost operatora $\hat{f}(\omega)^{20} = [\hat{f}(\omega)^{20}]^\dagger$, rastaviti na simplex blokove i jednadžbe linearnog odziva (2.41) i (2.42) jer imamo rastavljene $\hat{F}(\omega)^{20}$, $\hat{F}(\omega)^{02}$, $\delta\hat{H}(\omega)^{20}$ i $\delta\hat{H}(\omega)^{02}$:

$$X(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & x(\omega) \\ -x(\omega)^T & 0 \end{pmatrix}, \quad x(\omega)_{\mu,\nu} = -\frac{\hat{f}(\omega)_{\mu,\nu}^{20} + \delta\hat{h}(\omega)_{\mu,\nu}^{20}}{E_\mu + E_\nu - \hbar\omega - i\gamma}, \quad (3.35)$$

$$Y(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & y(\omega) \\ -y(\omega)^T & 0 \end{pmatrix}, \quad y(\omega)_{\mu,\nu} = -\frac{[\hat{f}(\omega)^{20}]_{\mu,\nu}^* + \delta\hat{h}(\omega)_{\mu,\nu}^{02}}{E_\mu + E_\nu + \hbar\omega + i\gamma}. \quad (3.36)$$

Uočimo da su $X(\omega)$ i $Y(\omega)$ doista antisimetrične matrice kako se i zahtijevalo u definiciji (2.35). Također, moguće je i matricu gustoće rastaviti na simplex blokove (vidjeti dodatak A.3). Zaključujemo da je simplex simetrija kao rezultat dala udvostručenje broja matrica koje opisuju FAM, ali su im dimenzije reducirane za faktor dva što bitno ubrzava numeričke račune.

3.5 Samosuglasni postupak u rješavanju FAM jednadžbi

3.5.1 Iterativan postupak

Iterativni postupak rješavanja FAM jednadžbi započinjemo konstruiranjem U i V matrica (3.18) u simplex-y bazi. Zatim se fiksira frekvencija ω i za konkretan operator $\hat{f}_{j,T}^K$ se izračunaju matricni elementi od \hat{f}_1 iz (3.28) numeričkim integriranjem te pomoću (3.29) se izračuna matrica $\hat{f}(\omega)^{20}$ koja potpuno opisuje $\hat{F}(\omega)^{20}$ i $\hat{F}(\omega)^{02}$. Kao

kriterij samosuglasnosti koristimo matricu $\delta\hat{h}_D(\omega)$ koja je zadana blokovima $\delta\hat{h}_1(\omega)$ i $\delta\hat{h}_2(\omega)$. Obzirom da jedan blok potpuno određuje drugi, iterativan postupak se zaustavlja kada za matricu $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{end}}$ na kraju i -te iteracije i matricu $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{start}}$ na početku i -te iteracije vrijedi:

$$\|\delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{end}} - \delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{start}}\|_\infty \leq \varepsilon. \quad (3.37)$$

U praktičnim računima koristi se $\varepsilon = 10^{-6}$. Kao inicijalna matrica $\delta\hat{h}_1(\omega)_{1,\text{start}}$ u prvoj iteraciji koristi se nul-matrica, tj. prvo se računa Hartree odziv, jer se na taj način čuvaju sve invarijante koje vrijede samo ako su zadovoljene i u prvom koraku (npr. selekcijska pravila u matricama gustoće prilikom računanja induciranih gustoća i struja, vidjeti dodatak B).

Pretpostavimo da je dana matrica $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{start}}$ na početku i -te iteracije. Najprije se pomoću (3.33) i (3.34) izračunaju $\delta\hat{h}(\omega)^{20}$ i $\delta\hat{h}(\omega)^{02}$. Zatim se iz jednadžbi linearnog odziva (3.35) i (3.36) izračunaju matrice $x(\omega)$ i $y(\omega)$ koje daju induciranu matricu gustoće

$$\delta\hat{\rho}(\omega) = \begin{pmatrix} \delta\hat{\rho}_1(\omega) & 0 \\ 0 & \delta\hat{\rho}_2(\omega) \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

kako je objašnjeno u dodatku A.3. Kada su dostupne inducirane matrice gustoće $\delta\hat{\rho}_1(\omega)$ i $\delta\hat{\rho}_2(\omega)$, moguće je izračunati inducirane struje i gustoće koje se javljaju u induciranom Hamiltonijanu $\delta\hat{h}_D(\omega)$. Postupak računanja induciranih struja i gustoća dan je u dodacima B.2 i B.3. Pomoću induciranih struja i gustoća izračunaju se inducirani potencijali koji se javljaju u operatoru $\delta\hat{h}_D(\omega)$, a iz induciranih potencijala mogu se izračunati matrice $\delta\hat{h}_1(\omega)$ i $\delta\hat{h}_2(\omega)$. Na opisan način se konačno dolazi do matrice $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{end}}$ na kraju i -te iteracije. Postupak se ponavlja dok nije zadovoljen kriterij zaustavljanja (3.37).

3.5.2 Modificirana Broydenova metoda

Iterativan postupak nailazi na problem ako je potreban jako velik broj iteracija da bi se postigla samosuglasnost. Naivno bi bilo na kraju i -te iteracije, kada je izračunata matrica $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{end}}$, jednostavno uzeti tu matricu za $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i+1,\text{start}} = \delta\hat{h}_1(\omega)_{i,\text{end}}$. Na taj bi način do postizanja samosuglasnosti bio potreban velik broj iteracija i FAM metoda ne bi bila puno uspješnija od matričnog QRPA računa. Umjesto naivnog ulaska u

iduću iteraciju, za računanje matrice $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i+1,\text{start}}$ koristi se modificirana Broydenova metoda [14]. Broydenova metoda generira $\delta\hat{h}_1(\omega)_{i+1,\text{start}}$ na način da koristi M prethodnih matrica iz prijašnjih iteracija tako što ih linearno miješa (tzv. *Broyden mixing*) u linearnu kombinaciju čime garantira da će se struktura matrice $\delta\hat{h}_1(\omega)$ očuvati kroz iteracije. Zapravo se radi o efikasnoj implementaciji generalizirane metode sekante za višedimenzionalne funkcije. U FAM računima, pokazalo se da M treba biti relativno velik: $M \geq 20$, za razliku od računa osnovnog stanja gdje je dovoljno uzeti $M \leq 10$.

3.6 Odzivna funkcija

Jednom kada je postignuta samosuglasnost jednadžbi linearnog odziva za neku frekvenciju ω , trebamo izračunati odzivnu funkciju na toj frekvenciji. Općenito, u vremenski ovisnom računu smetnje, ako je vanjska perturbacija oblika:

$$V_{\text{ext}}(t) = \eta \left(\hat{f} e^{-i(\omega+i\epsilon)t} + \hat{f}^\dagger e^{+i(\omega+i\epsilon)t} \right), \quad (3.39)$$

tada je korekcija valne funkcije u prvom redu:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Phi_0\rangle - \eta \frac{i}{\hbar} \sum_n |\Phi_n\rangle \left(\frac{\langle \Phi_n | \hat{f} | \Phi_0 \rangle}{\hbar\omega - E_n + i\epsilon} e^{-i\omega t} - \frac{\langle \Phi_n | \hat{f}^\dagger | \Phi_0 \rangle}{\hbar\omega + E_n - i\epsilon} e^{+i\omega t} \right), \quad (3.40)$$

i snaga prijelaza (*transition strength*) je:

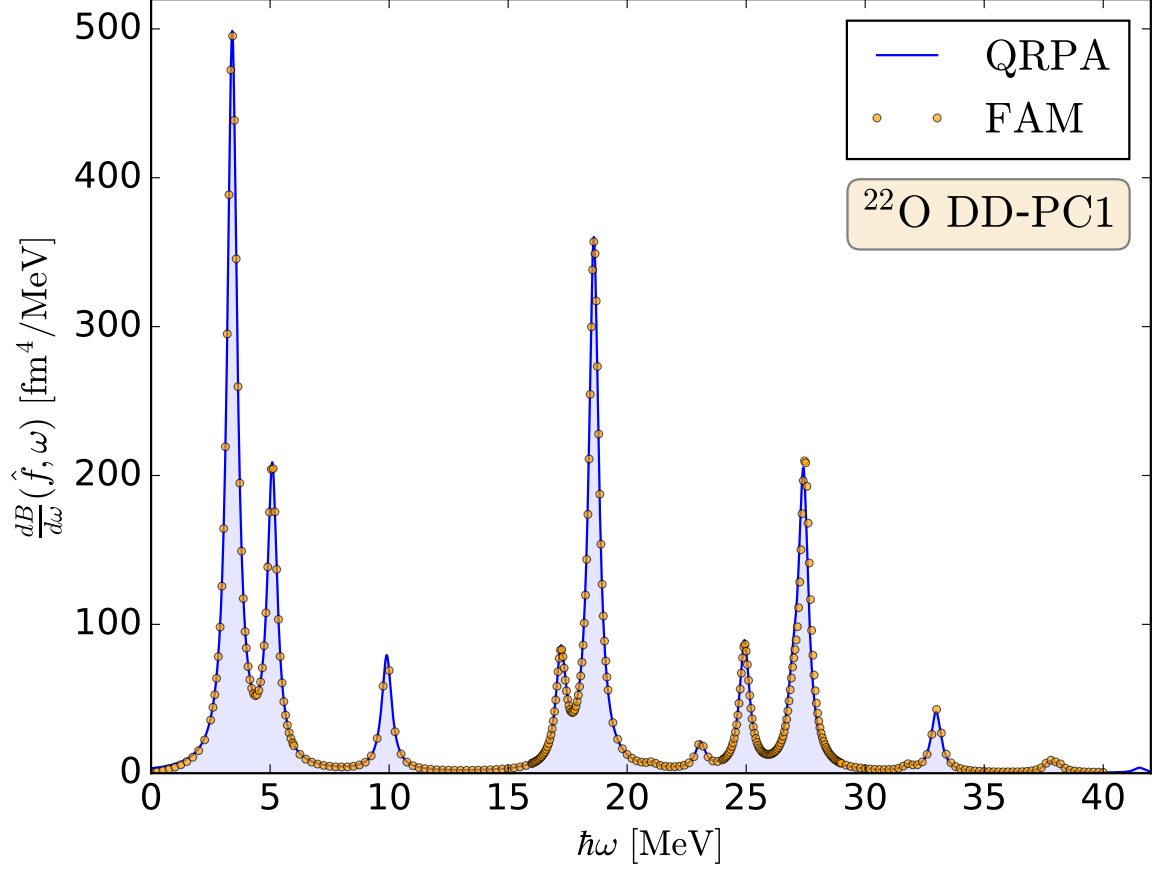
$$\frac{dB}{d\omega}(\hat{f}, \omega) := \sum_n |\langle \Phi_n | \hat{f} | \Phi_0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - E_n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[S(\hat{f}, \omega) \right], \quad (3.41)$$

gdje je $S(\hat{f}, \omega)$ dan kao neiščezavajući član u očekivanju, kada $\epsilon \rightarrow 0$:

$$\langle \Psi(t) | \hat{f}^\dagger | \Psi(t) \rangle = \underbrace{\langle \Phi_0 | \hat{f}^\dagger | \Phi_0 \rangle}_{=0} + \eta S(\hat{f}, \omega) e^{-i\omega t} + \dots \quad (3.42)$$

U RHB modelu možemo prethodnu očekivanu vrijednost izračunati kao trag operatora s matricom gustoće:

$$\text{Tr} \left[\hat{f}^\dagger \hat{\rho}(t) \right] = \underbrace{\text{Tr} \left[\hat{f}^\dagger \hat{\rho}^0 \right]}_{=0} + \eta \underbrace{\text{Tr} \left[\hat{f}^\dagger \delta \hat{\rho}(\omega) \right]}_{S(\hat{f}, \omega)} e^{-i\omega t} + \dots, \quad (3.43)$$



Slika 3.1: Usporedba odzivnih funkcija monopolnog izoskalarnog pobuđenja sferne jezgre ^{22}O izračunate matričnom QRPA metodom i FAM metodom, pri čemu su zane-marene dimaničke korelacije sparivanja. Parametar razmazanosti je $\gamma = 0.25$ MeV, a spinori su razvijeni u bazi s $N_{\text{max}} = 10$ ljusaka.

$$\implies S(\hat{f}, \omega) = \text{Tr} \left[\hat{f}^\dagger \delta \hat{\rho}(\omega) \right]. \quad (3.44)$$

Za slučaj multipolnog operatora $\hat{f}_{J,T}^K$, gdje imamo rastav na simplex blokove (3.28) koji su realne i simetrične matrice, te rastav matrice gustoće na simplex blokove (A.13), možemo pisati:

$$\frac{dB}{d\omega}(\hat{f}_{J,T}^K, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\text{Tr} \left[\hat{f}_1 \delta \hat{\rho}_1(\omega) \right] + \text{Tr} \left[\hat{f}_1 \delta \hat{\rho}_2(\omega) \right] \right]. \quad (3.45)$$

3.7 Testovi FAM kôda

3.7.1 Usporedba s matričnom QRPA implementacijom

Budući da na raspolaganju imamo numeričku implementaciju matričnog QRPA modela za sferne jezgre, razvijeni FAM kôd prvo ćemo usporediti s rezultatima matrične

QRPA implementacije. Sferna ^{22}O jezgra predstavlja dobar primjer za usporedbu jer zbog male mase ne zahtjeva velik broj ljusaka N_{max} . Dakle, promatramo odziv jezgre ^{22}O na izoskalarno monopolno pobuđenje $J = 0$. U računu je uzeta u obzir dimanička i statička elektromagnetska interakcija, dok su dinamičke korelacije sparivanja zanemarene, a statične uzete u obzir. To uzrokuje spuriozno pobuđenje na niskim energijama jer osnovno stanje nije svojstveno stanje operatora broja čestica pa je za potpun račun potrebno i dimaničko sparivanje koje će biti uključeno u kasnijoj verziji kôda. Izabran je relativno malen Lorentzov parametar $\gamma = 0.25 \text{ MeV}$, kako bi razlučili bliske rezonantne frekvencije, a spinori su razvijeni u bazi s $N_{\text{max}} = 10$ ljusaka. Na slici 3.1 prikazana je odzivna funkcija za opisanu situaciju. Poklapanje je zadovoljavajuće pa se može prijeći na zahtjevnije testove korektnosti kôda u kojima se promatraju $K \neq 0$ pobuđenja.

3.7.2 Kvadrupolna pobuđenja sferne jezgre

Ako se promatraju sferne jezgre (idealno dvostruko magične kao npr. ^{16}O ili ^{40}Ca), tada će zbog sferne simetrije pobuđenja fiksiranog J , ali proizvoljnog $0 \leq K \leq J$ dati jednake odzivne funkcije. To svojstvo predstavlja izvrstan numerički test za $K \neq 0$ pobuđenja. Za potrebe testa, izabrana je dvostruko magična jezgra ^{40}Ca jer je dovoljno teška da elektromagnetska interakcija ima značajan doprinos, a s druge strane je dovoljno lagana pa nije potreban velik broj ljusaka N_{max} . Promatraju se kvadrupolna izoskalarna pobuđenja $J = 2$ i uspoređuju se odzivne funkcije za $K = 0, 1, 2$. Slično bi se mogla promatrati dipolna $J = 1$ pobuđenja $K = 0, 1$. Uzeta je gusta Gaussova mreža: $N_{GH} = N_{GL} = 48$, kako bi se sa što većom preciznošću poklapale odzivne funkcije, te $N_{\text{max}} = 8$ oscilatorskih ljuski i $\gamma = 1.0 \text{ MeV}$. U računu je izbačeno sparivanje u potpunosti, dok je u dimaničkoj elektromagnetskoj interakciji izbačena magnetska interakcija. Pokazuje se da je inducirane struje teško precizno numerički integrirati pa ih za potrebe testa izbacujemo, tj. zanemarujemo magnetizam. Taj će problem biti riješen u jednoj od idućih verzija kôda. U tablici 3.1, dana je usporedba odzivnih funkcija kvadrupolnih pobuđenja za opisanu konfiguraciju u kojoj je dimanička Coulombova interakcija zanemarena, dok je u tablici 3.2 dimanička Coulombova interakcija uzeta u obzir.

Odzivne funkcije se poklapaju s relativnom odstupanjem od 10^{-7} na širokom pojasu frekvencija što se može smatrati zadovoljavajućom preciznošću. Sada kada je testi-

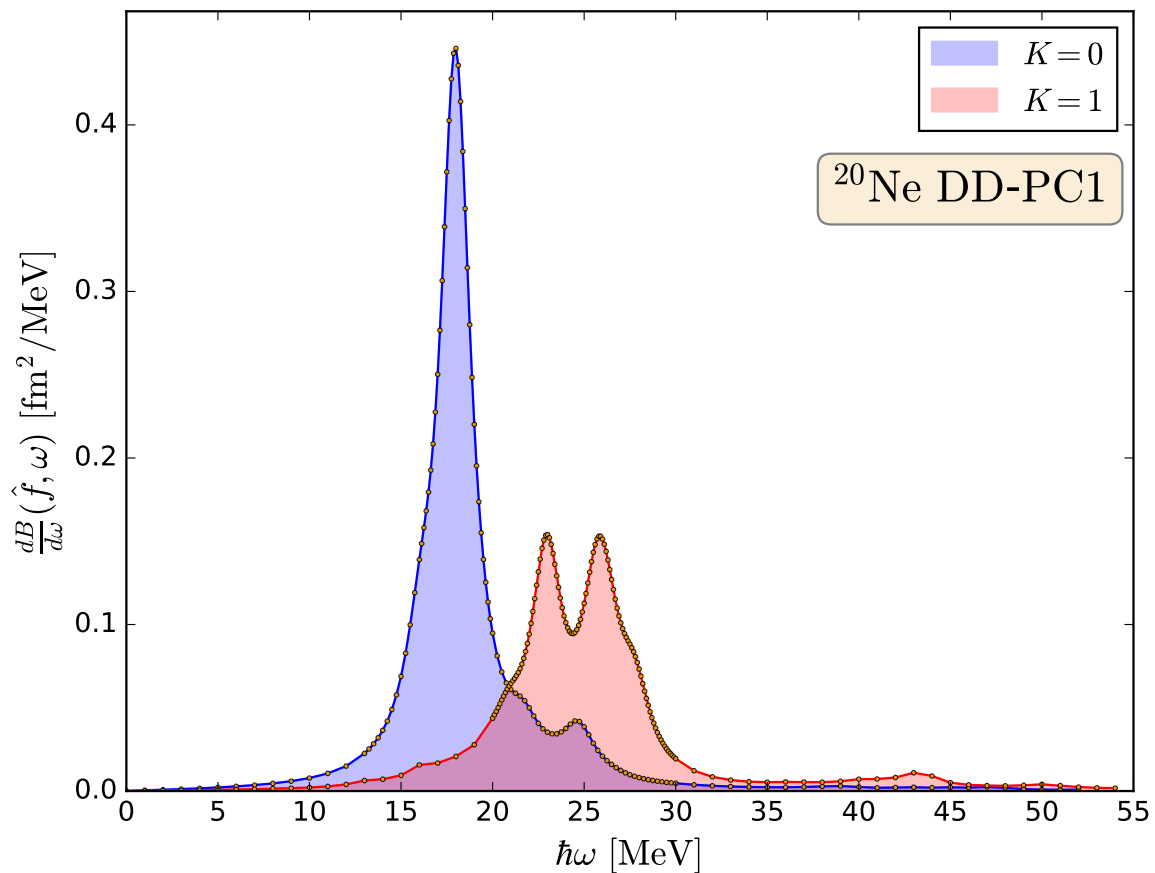
rana ispravnost FAM implementacije, može se prijeći na jezgre i pobuđenja koja ne možemo izračunati s matričnim QRPA kôdom. U idućem poglavlju promatraju se izovektorska dipolna pobuđenja deformirane jezgre ^{20}Ne kod koje odzivna funkcija ovisi o K .

$\hbar\omega$ [MeV]	$\frac{d}{d\omega}B(\hat{f}_{J=2,T=0}^K, \omega)$ [fm ⁴ /MeV]		
	$K = 0$	$K = 1$	$K = 2$
5.0	0.3704914 678	0.3704914 720	0.3704914 676
10.0	1.1879162 458	1.1879162 901	1.1879162 380
15.0	5.684443 8280	5.684443 9279	5.684443 8720
20.0	86.7709 943651	86.7709 883498	86.7709 933848
25.0	4.061259 2314	4.061259 1633	4.061259 2230
30.0	1.704273 2530	1.704273 5095	1.704273 2524
35.0	0.5693305 290	0.5693305 278	0.5693305 354
40.0	0.302082 5339	0.302082 6550	0.302082 5346
45.0	0.177385 9628	0.177385 8760	0.177385 9736
50.0	0.1122294 773	0.1122294 484	0.1122294 500
55.0	0.07679676 67	0.07679676 91	0.07679676 63
60.0	0.0565409 075	0.0565409 128	0.0565409 072

Tablica 3.1: Usporedba odzivnih funkcija kvadrupolnih izoskalarnih pobuđenja jezgre ^{40}Ca za različite $K = 0, 1, 2$, bez dinamičke elektromagnetske interakcije.

$\hbar\omega$ [MeV]	$\frac{d}{d\omega}B(\hat{f}_{J=2,T=0}^K, \omega)$ [fm ⁴ /MeV]		
	$K = 0$	$K = 1$	$K = 2$
5.0	0.35786084 34	0.35786084 64	0.35786084 37
10.0	1.136834 2018	1.136834 1970	1.136834 1514
15.0	5.260745 5654	5.260745 4979	5.260745 6055
20.0	98.22859 62808	98.22859 26081	98.22859 68047
25.0	4.23627 70505	4.23627 68142	4.23627 68795
30.0	1.722350 1388	1.722350 3547	1.722350 1195
35.0	0.5707350 803	0.5707350 675	0.5707350 776
40.0	0.3049966 277	0.3049966 102	0.3049966 283
45.0	0.1779056 450	0.1779056 538	0.1779056 574
50.0	0.1125156 749	0.1125156 447	0.1125156 462
55.0	0.0769989 681	0.0769989 724	0.0769989 728
60.0	0.0566009 284	0.0566009 344	0.0566009 279

Tablica 3.2: Usporedba odzivnih funkcija kvadrupolnih izoskalarnih pobuđenja jezgre ^{40}Ca za različite $K = 0, 1, 2$, s uključenom dinamičkom električnom, ali bez dinamičke magnetske interakcije.



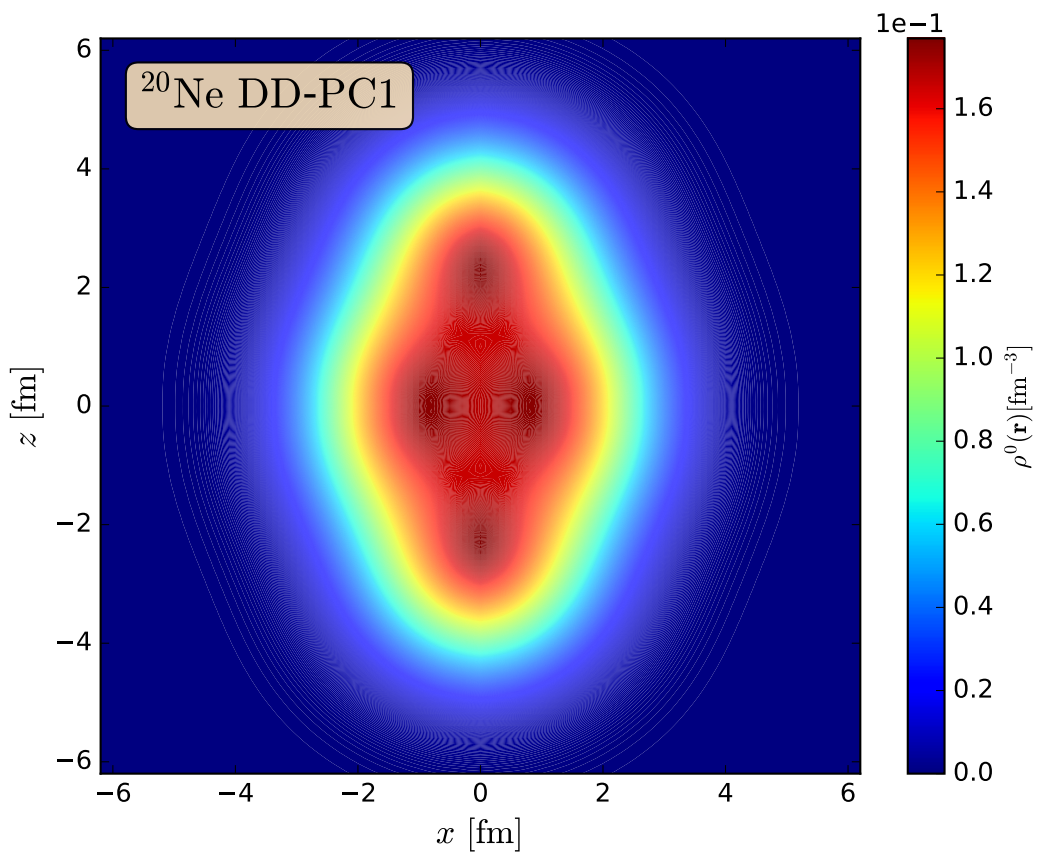
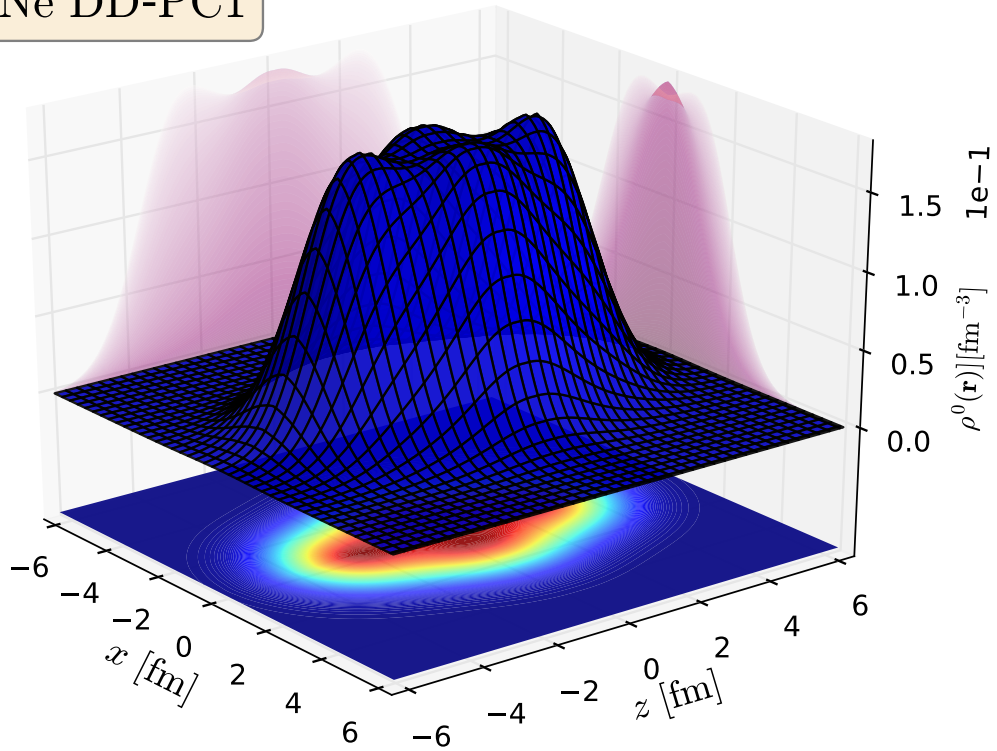
Slika 4.1: Usporedba odzivnih funkcija izovektorskih dipolnih $K = 0$ i $K = 1$ pobuđenja deformirane jezgre ^{20}Ne , pri čemu su potpuno zanemarene statičke i dimaničke korelacije sparivanja. Parametar razmazanosti je $\gamma = 1.0$ MeV, a spinori su razvijeni u bazi s $N_{\text{max}} = 6$ ljusaka.

4 Ilustrativni računi

4.1 Dipolna E1 pobuđenja jezgre ^{20}Ne

U ovom poglavlju promatrajmo odziv izotopa ^{20}Ne na izovektorsko dipolno pobuđenje. Najprije uočimo da ako izovektorski dipolni operator $\hat{f}_{J=1,T=1}^K$ (3.26) pomnožimo s e^2 , zapravo dobivamo operator električnih E1 pobuđenja. Takva pobuđenja je zanimljivo promatrati jer za njih postoje eksperimentalni podaci fotoapsorpcijskih udarnih presjeka koji se mogu usporediti s teorijskim rezultatima. Jezgra neona ^{20}Ne u osnovnom stanju ima oblik deformiranog izduženog elipsoida. DD-PC1 parametrizacija predviđa deformaciju osnovnog stanja $\beta \approx 0.5$, s izraženom podstrukturom grozdova

^{20}Ne DD-PC1



Slika 4.2: Izoskalarna-vektorska gustoća osnovnog stanja jezgre ^{20}Ne na xz ravnini. U računu nisu uključene korelacije sparivanja, a spinori su razvijeni u bazi s $N_{\text{max}} = 6$ ljusaka. Obzirom da se radi o aksijalno simetričnoj jezgri, jednak profil gustoće dobije se ako se promatra gustoća na bilo kojoj ravnini koja sadrži z os.

nukleona⁷ [15]. Deformacija β zadana je kvadrupolnim momentom osnovnog stanja:

$$\langle \hat{Q} \rangle =: \sqrt{\frac{9}{5\pi}} AR_0^2 \times \beta \quad , \quad R_0 = 1.2A^{1/3} \text{ fm.} \quad (4.1)$$

Na slici 4.1 prikazane su odzivne funkcije izovektorskih dipolnih $K = 0$ i $K = 1$ pobuđenja. Vidimo da jezgra ima puno intenzivniji odziv na $K = 0$ pobuđenje. Rezonantna frekvencija $K = 0$ pobuđenja je približno $\hbar\omega \approx 18.0$ MeV, dok su dvije rezonantne frekvencije $K = 1$ pobuđenja približno na $\hbar\omega \approx 23.0$ MeV i $\hbar\omega \approx 26.0$ MeV. Fizikalno je takvo ponašanje odzivnih funkcija očekivano jer je puno lakše jezgru oblika produljenog elipsoida pobuditi da oscilira duž osi aksijalne simetrije nego okomito na nju. Zato je i očekivano da će rezonantna energija za $K = 0$ pobuđenje biti niža od rezonantne energije $K = 1$ pobuđenja, te da će $K = 0$ rezonancija biti intenzivnija.

4.2 Inducirana gustoća

U ovom potpoglavlju grafički je ilustrirano ponašanje induciranih gustoća u rezonanciji za izovektorska dipolna $K = 0$ i $K = 1$ pobuđenja iz prethodnih potpoglavlja. Zbog toga što vremenski ovisna izoskalarna-vektorska gustoća ima oblik:

$$\begin{aligned} \rho_v(\mathbf{r}, t) &= \rho_v(\mathbf{r})^0 + 2\eta \operatorname{Re} \left[e^{-i\omega t} \delta\rho_v(\omega, \mathbf{r}) \right] \\ &= \rho_v(r_\perp, z)^0 + 2\eta \operatorname{Re} \left[e^{-i\omega t} \delta\rho_v(\omega, r_\perp, z) \right] \cos(K\varphi), \end{aligned} \quad (4.2)$$

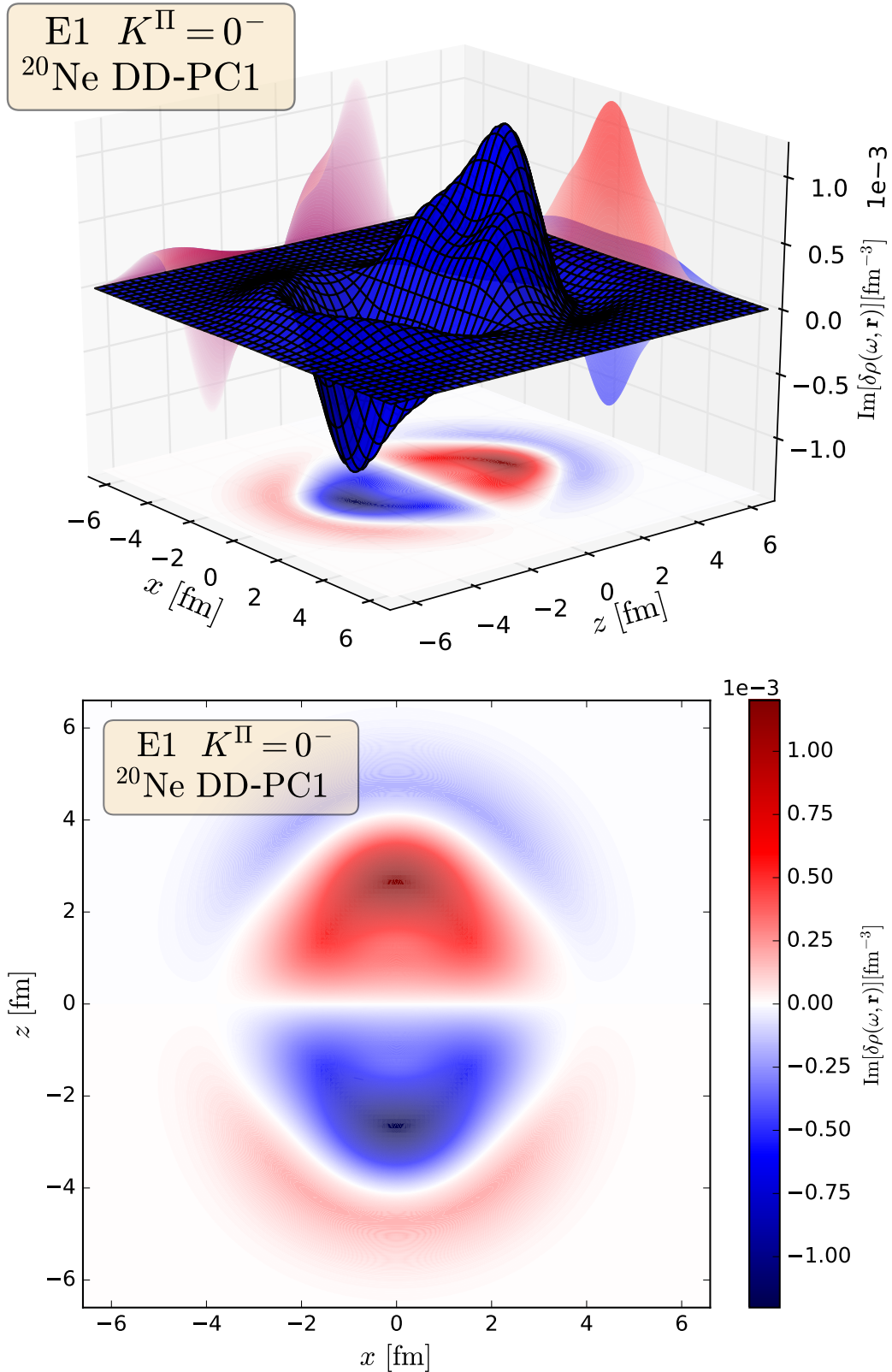
gdje je $\delta\rho_v(\omega, \mathbf{r})$ kompleksna funkcija, nemoguće je potpuno vjerodostojno reprezentirati induciranu gustoću grafom. Zato se za potrebe vizualizacije koristi prijelazna gustoća⁸ $\delta\rho_{\text{tr}}(\omega, \mathbf{r})$, definirana kao:

$$\delta\rho_{\text{tr}}(\omega, \mathbf{r}) := -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} [\delta\rho_v(\omega, \mathbf{r})]. \quad (4.3)$$

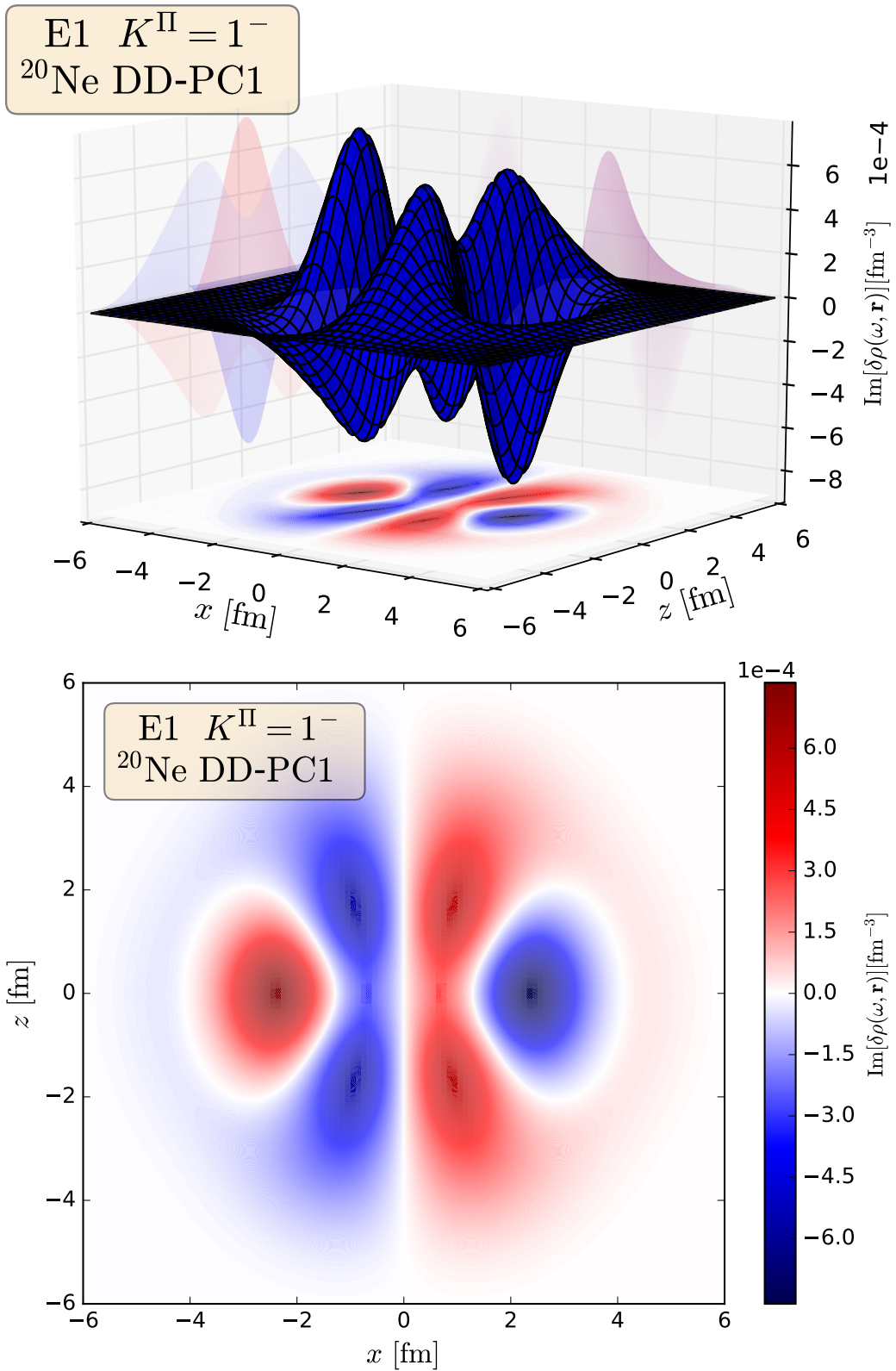
Animaciju koja grafički prikazuje $\rho_v(\mathbf{r}, t)$ moguće je preuzeti na [16]. Na slici 4.2 prikazana je izoskalarna-vektorska gustoća u osnovnom stanju $\rho_v^0(\mathbf{r})$ deformirane jezgre ^{20}Ne s izraženom *clusterskom* podstrukturom. Slike 4.3 i 4.4 prikazuju prijelazne gustoće $\operatorname{Im} [\delta\rho_v(\omega, \mathbf{r})]$ izovektorskih dipolnih $K = 0$ i $K = 1$ pobuđenja na rezonantnim energijama (18.0 MeV za $K = 0$, odnosno 23.0 MeV za $K = 1$).

⁷Nuclear clusters.

⁸Transition density.



Slika 4.3: Prijelazna gustoća $\text{Im}[\delta\rho_v(\omega, \mathbf{r})]$ na xz ravnini izovektorskog dipolnog $K = 0$ pobuđenja jezgre ^{20}Ne na rezonantnoj frekvenciji $\hbar\omega = 18.0$ MeV. U računu nisu uključene korelacije sparivanja, a spinori su razvijeni u bazi s $N_{\text{max}} = 6$ ljusaka. Primijetimo da je zbog $K = 0$, kutna ovisnost $\cos(K\varphi) = \cos(0) = 1$, pa je profil prijelazne gustoće jednak na svim ravninama koje sadrže z os.



Slika 4.4: Prijelazna gustoća $\text{Im}[\delta\rho_v(\omega, \mathbf{r})]$ na xz ravnini izovektorskog dipolnog $K = 1$ pobuđenja jezgre ^{20}Ne na rezonantnoj frekvenciji $\hbar\omega = 23.0$ MeV. U računu nisu uključene korelacije sparivanja, a spinori su razvijeni u bazi s $N_{\text{max}} = 6$ ljusaka. Primijetimo da je zbog $K = 1$, kutna ovisnost $\cos(K\varphi) = \cos(\varphi)$, pa profil prijelazne gustoće na proizvoljnoj ravnini koja sadrži z os dobijemo množenjem s $\cos(\varphi)$.

5 Zaključak

U prvoj verziji kôda, implementacija FAM metode uspješno reproducira rezultate matričnog rješavanja QRPA jednadžbi, te se odzivne funkcije sferne jezgre za fiksiran J , ali varijabilan $0 \leq K \leq J$ poklapaju sa zadovoljavajućom preciznošću. U idućoj verziji kôda trebalo bi implementirati dinamičke korelacije sparivanja $\delta\Delta^{(\pm)}$ i riješiti problem preciznosti pri integraciji inducirane magnetske interakcije (C.8). Također bi se mogla jednostavnom modifikacijom realizirati implementacija za neku drugu parametrizaciju Lagrangijana (kao npr. uspješnu parametrizaciju DD-ME2 [17] u kojoj je izmjena mezona eksplicitno uzeta u obzir), te se vrlo jednostavno mogu nadograditi i viši multipoli, primjerice prva iduća na redu oktupolna $J = 3$ pobuđenja. Tada bi se paralelizacijom računa po frekvencijama ω , mogla provoditi sistematična istraživanja multipolnih $K \neq 0$ pobuđenja teških deformiranih jezgara koja nisu bila dostupna u prijašnjim matričnim implementacijama rješenja QRPA jednadžbe.

Dodaci

Napomena: U idućim dodacima ako uz objekt O ne stoji vremenska ovisnost $O(t)$, podrazumijeva se vrijednost objekta O^0 u osnovnom stanju.

Dodatak A Inducirana matrica gustoće

A.1 Bogoliubovljeve $U(t)$ i $V(t)$ matrice

Pod djelovanjem operatora pobuđenja $\hat{F}(t) = \eta \left\{ \hat{F}(\omega) e^{-i\omega t} + \hat{F}(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \right\}$, operator stvaranja kvazičestica $\hat{a}_\mu^\dagger(t)$, možemo rastaviti na ravnotežni i inducirani dio:

$$\hat{a}_\mu^\dagger(t) = \left\{ \hat{a}_\mu^\dagger + \delta\hat{a}_\mu^\dagger(t) \right\} e^{-iE_\mu t/\hbar}. \quad (\text{A.1})$$

U tom rastavu, inducirani član $\delta\hat{a}_\mu^\dagger(t)$ možemo razviti po operatorima poništenja tako da uvedemo koeficijente razvoja $X(\omega)_{\mu,\nu}$ i $Y(\omega)_{\mu,\nu}$:

$$\delta\hat{a}_\mu^\dagger(t) = \eta \sum_\nu \hat{a}_\nu \left\{ X(\omega)_{\nu,\mu}^* e^{+i\omega t} + Y(\omega)_{\nu,\mu} e^{-i\omega t} \right\}. \quad (\text{A.2})$$

Po definiciji su ravnotežni kvazičestični operatori $\{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\mu\}$ dobiveni unitarnom Bogoliubovljevom transformacijom baze $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$ u kojoj je praktično računati:

$$\hat{a}_\mu^\dagger = \sum_k U_{k,\mu} \hat{c}_k^\dagger + V_{k,\mu} \hat{c}_k, \quad (\text{A.3})$$

Ako u (A.1) ubacimo Bogoliubovljevu transformaciju, zajedno s razvojem (A.2), slijedi zapis vremenski ovisnog operatora $\hat{a}_\mu^\dagger(t)$ u bazi $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$:

$$\begin{aligned} \hat{a}_\mu^\dagger(t) = & \sum_k \hat{c}_k^\dagger \left(U_{k,\mu} + \eta \sum_\nu V_{k,\nu}^* (X(\omega)_{\nu,\mu}^* e^{+i\omega t} + Y(\omega)_{\nu,\mu} e^{-i\omega t}) \right) e^{-iE_\mu t/\hbar} \\ & + \sum_k \hat{c}_k \left(V_{k,\mu} + \eta \sum_\nu U_{k,\nu}^* (X(\omega)_{\nu,\mu}^* e^{+i\omega t} + Y(\omega)_{\nu,\mu} e^{-i\omega t}) \right) e^{-iE_\mu t/\hbar}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

što definira nove, vremenski ovisne $U(t)$ i $V(t)$ matrice

$$U_{k,\mu}(t) = \left[U + \eta (V^* X(\omega) e^{+i\omega t} + V^* Y(\omega) e^{-i\omega t}) \right]_{k,\mu} e^{-iE_\mu t/\hbar}, \quad (\text{A.5})$$

$$V(t)_{k,\mu} = \left[V + \eta (U^* X(\omega)^* e^{+i\omega t} + U^* Y(\omega) e^{-i\omega t}) \right]_{k,\mu} e^{-iE_\mu t/\hbar}. \quad (\text{A.6})$$

A.2 Matrica gustoće $\hat{\rho}(t)$

Po definiciji matrice gustoće u Hartree-Bogoliubovljevom modelu, vremenski ovisna matrica gustoće glasi:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t)_{k_1, k_2} &= [V(t)^* V(t)^T]_{k_1, k_2} = \sum_{\mu} V_{k_1, \mu}^*(t) V_{k_2, \mu}(t) = \\ &= \sum_{\mu} \left[V + \eta (U^* X(\omega)^* e^{+i\omega t} + U^* Y(\omega) e^{-i\omega t}) \right]_{k_1, \mu}^* \left[V + \eta (U^* X(\omega)^* e^{+i\omega t} + U^* Y(\omega) e^{-i\omega t}) \right]_{k_2, \mu}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Nakon zanemarivanja člana proporcionalnog s η^2 i grupiranja članova s linearno nezavisnim funkcijama $e^{+i\omega t}$ i $e^{-i\omega t}$, dobiva se:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t)_{k_1, k_2} &= [V^* V^T]_{k_1, k_2} + \eta e^{-i\omega t} \sum_{\mu} V_{k_1, \mu}^* (U^* Y(\omega))_{k_2, \mu} + (U X(\omega))_{k_1, \mu} V_{k_2, \mu} \\ &+ \eta e^{+i\omega t} \sum_{\mu} V_{k_1, \mu}^* (U^* X(\omega)^*)_{k_2, \mu} + (U Y(\omega)^*)_{k_1, \mu} V_{k_2, \mu}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Prethodni izraz se pojednostavljuje ako definiramo operator:

$$\delta\hat{\rho}(\omega) := U X(\omega) V^T + V^* Y(\omega)^T U^\dagger. \quad (\text{A.9})$$

Tada se (A.8) može zapisati jednostavnije kao:

$$\hat{\rho}(t)_{k_1, k_2} = [V^* V^T]_{k_1, k_2} + \eta \left\{ \delta\hat{\rho}(\omega)_{k_1, k_2} e^{-i\omega t} + \delta\hat{\rho}(\omega)_{k_1, k_2}^\dagger e^{+i\omega t} \right\}, \quad (\text{A.10})$$

odnosno, ako je $\hat{\rho}^0 = V^* V^T$, matrica gustoće u osnovnom stanju, konačno slijedi:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}^0 + \eta \left\{ \delta\hat{\rho}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta\hat{\rho}(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \right\}. \quad (\text{A.11})$$

A.3 Prikaz operatora $\delta\hat{\rho}(\omega)$ u simplex-y bazi

Ako se zapišu matrice $U, V, X(\omega)$ i $Y(\omega)$ po simplex blokovima:

$$U = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & u^* \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & -v^* \\ v & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.12})$$

$$X(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & x(\omega) \\ -x(\omega)^T & 0 \end{pmatrix}, \quad Y(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & y(\omega) \\ -y(\omega)^T & 0 \end{pmatrix},$$

trivijalno se vidi da $\delta\hat{\rho}(\omega)$ također ima blokovsku strukturu:

$$\delta\hat{\rho}(\omega) = \begin{pmatrix} \delta\hat{\rho}_1(\omega) & 0 \\ 0 & \delta\hat{\rho}_2(\omega) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

gdje je podmatrica $\delta\hat{\rho}_1(\omega)$ koja odgovara simplex $+i$ bloku jednaka:

$$\delta\hat{\rho}_1(\omega) := -[ux(\omega)v^\dagger + vy(\omega)^T u^\dagger], \quad (\text{A.14})$$

a podmatrica $\delta\hat{\rho}_2(\omega)$ koja odgovara simplex $-i$ bloku jednaka:

$$\delta\hat{\rho}_2(\omega) := -[vx(\omega)u^\dagger + uy(\omega)^T v^\dagger]^T. \quad (\text{A.15})$$

Sve skupa, matrica gustoće ima blokovsku strukturu:

$$\hat{\rho}(t) = \begin{pmatrix} vv^\dagger & 0 \\ 0 & (vv^\dagger)^T \end{pmatrix} + \eta e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} \delta\hat{\rho}_1(\omega) & 0 \\ 0 & \delta\hat{\rho}_2(\omega) \end{pmatrix} + \eta e^{+i\omega t} \begin{pmatrix} \delta\hat{\rho}_1(\omega)^\dagger & 0 \\ 0 & \delta\hat{\rho}_2(\omega)^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Dodatak B Računanje vremenski ovisnih gustoća i struja

B.1 Razvoj spinora u simplex-y bazi

Spinor $V_\mu(\mathbf{r}, t)$ iz simplex $+i$ bloka razvijen u bazi možemo zapisati:

$$\begin{aligned} V_\mu(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} f^{(V_\mu)}(\mathbf{r}, t) \\ i g^{(V_\mu)}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_\alpha f_\alpha^{(V_\mu)}(t) |\alpha, +i\rangle \\ i \sum_{\tilde{\alpha}} g_{\tilde{\alpha}}^{(V_\mu)}(t) |\tilde{\alpha}, -i\rangle \end{pmatrix} \\ &= \sum_\alpha f_\alpha^{(V_\mu)}(t) \begin{pmatrix} |\alpha, +i\rangle \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \sum_{\tilde{\alpha}} g_{\tilde{\alpha}}^{(V_\mu)}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ i |\tilde{\alpha}, -i\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

dok je spinor $V_\mu(\mathbf{r}, t)$ iz simplex $-i$ bloka razvijen u bazi jednak:

$$\begin{aligned} V_\mu(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} f^{(V_\mu)}(\mathbf{r}, t) \\ i g^{(V_\mu)}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_\alpha f_\alpha^{(V_\mu)}(t) |\alpha, -i\rangle \\ i \sum_{\tilde{\alpha}} g_{\tilde{\alpha}}^{(V_\mu)}(t) |\tilde{\alpha}, +i\rangle \end{pmatrix} \\ &= \sum_\alpha f_\alpha^{(V_\mu)}(t) \begin{pmatrix} |\alpha, -i\rangle \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \sum_{\tilde{\alpha}} g_{\tilde{\alpha}}^{(V_\mu)}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ i |\tilde{\alpha}, +i\rangle \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Slijedi da je čitava uređena baza po kojoj se razvijaju spinori i po kojoj se indeksiraju operatori $\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k\}$ iz (A.3) dana s:

$$\left(\underbrace{\begin{pmatrix} |\alpha, +i\rangle \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}_\alpha}_{n_f \text{ vektora}} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ i |\tilde{\alpha}, -i\rangle \end{pmatrix}_{\tilde{\alpha}}}_{n_g \text{ vektora}} \underbrace{\begin{pmatrix} |\alpha, -i\rangle \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}_\alpha}_{n_f \text{ vektora}} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ i |\tilde{\alpha}, +i\rangle \end{pmatrix}_{\tilde{\alpha}}}_{n_g \text{ vektora}} \right). \quad (\text{B.3})$$

$|k, +i\rangle$ vektori $|k, -i\rangle$ vektori

Isto vrijedi i za spinor $U_\mu(\mathbf{r}, t)$. Dakle, možemo pisati

$$V_\mu(\mathbf{r}, t) = \sum_k V_{(k, +i), \mu}(t) |k, +i\rangle + \sum_k V_{(k, -i), \mu}(t) |k, -i\rangle. \quad (\text{B.4})$$

Ako se baza razvija s brojem oscilatorskih ljuski N_{\max} za veliku, a $N_{\max} + 1$ za malu komponentu, tada je:

$$n_f = \frac{(N_{\max} + 1)(N_{\max} + 2)(N_{\max} + 3)}{6}, \quad n_g = \frac{(N_{\max} + 2)(N_{\max} + 3)(N_{\max} + 4)}{6}. \quad (\text{B.5})$$

Ilustracije radi, npr. za $N_{\max} = 12$ ljusaka, vrijedi: $n_f = 455$, $n_g = 560$, pa se baza sastoji od ukupno $2 \times (n_f + n_g) = 2 \times 1015 = 2030$ vektora.

B.2 Vremenski ovisne inducirane gustoće

Izračunajmo sada izoskalarnu-vektorsku gustoću $\rho_v(\mathbf{r}, t)$ i izoskalarnu-skalarnu gustoću $\rho_s(\mathbf{r}, t)$, naprije primjerice za neutrone. Gustoće se iz matrice gustoće računaju prema formuli [3]:

$$\rho_{v/s}(\mathbf{r}, t) = \sum_{(k_1, s_1), (k_2, s_2)} \hat{\rho}(t)_{(k_1, s_1), (k_2, s_2)} \langle k_2, s_2 | \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \pm \mathbf{1} \end{pmatrix} | k_1, s_1 \rangle, \quad (\text{B.6})$$

gdje predznak $+$ odgovara vektorskoj, a predznak $-$ skalarnoj gustoći. Iz blokovske strukture (A.16) vidimo da se može pisati:

$$\hat{\rho}(t)_{(k_1, s_1), (k_2, s_2)} = \delta_{s_1, s_2} \hat{\rho}(t)_{(k_1, s_1), (k_2, s_2)}, \quad (\text{B.7})$$

pa oba simplex bloka nezavisno doprinose gustoći. Dakle vrijedi:

$$\begin{aligned} \rho_{v/s}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{k_1, k_2} \hat{\rho}(t)_{(k_1, +i), (k_2, +i)} \langle k_2, +i | \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \pm \mathbf{1} \end{pmatrix} | k_1, +i \rangle \\ &+ \sum_{k_1, k_2} \hat{\rho}(t)_{(k_1, -i), (k_2, -i)} \langle k_2, -i | \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \pm \mathbf{1} \end{pmatrix} | k_1, -i \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Ako sada u prethodnu jednadžbu uvrstimo (A.11), pazeći pritom na blokovsku strukturu (A.13) od $\delta \hat{\rho}(\omega)$ i koristeći hermitsku simetričnost:

$$\langle k_2, \pm i | \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \pm \mathbf{1} \end{pmatrix} | k_1, \pm i \rangle = \langle k_1, \pm i | \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \pm \mathbf{1} \end{pmatrix} | k_2, \pm i \rangle^*, \quad (\text{B.9})$$

slijedi izraz za vremenski ovisne gustoće:

$$\rho_{v/s}(\mathbf{r}, t) = \rho_{v/s}(\mathbf{r})^0 + 2\eta \operatorname{Re} \left[e^{-i\omega t} \delta \rho_{v/s}(\omega, \mathbf{r}) \right]. \quad (\text{B.10})$$

Gustoća je rastavljena na dva dijela: inducirani $2\eta \operatorname{Re} \left[e^{-i\omega t} \delta \rho_{v/s}(\omega, \mathbf{r}) \right]$ dio i ravnotežni $\rho_{v/s}(\mathbf{r})^0$ dio, gdje je kompleksna funkcija položaja $\delta \rho_{v/s}(\omega, \mathbf{r})$, dana jednadžbom:

$$\begin{aligned}
\delta\rho_{v/s}(\omega, \mathbf{r}) = & \sum_{k_1, k_2} \delta\hat{\rho}_1(\omega)_{k_1, k_2} \langle k_2, +i | \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \pm\mathbf{1} \end{pmatrix} | k_1, +i \rangle \\
& + \sum_{k_1, k_2} \delta\hat{\rho}_2(\omega)_{k_1, k_2} \langle k_2, -i | \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \pm\mathbf{1} \end{pmatrix} | k_1, -i \rangle.
\end{aligned} \tag{B.11}$$

Sada još treba uvrstiti bazne vektore $|k, +i\rangle$ i $|k, -i\rangle$ dane u (B.3), te iskoristiti iduće skalarne produkte (radi se o skalarnim produktima samo obzirom na spinski dio valne funkcije):

$$\langle \alpha_1, +i | \alpha_2, +i \rangle = \langle \alpha_1, -i | \alpha_2, -i \rangle = \phi_{n_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp) \frac{\cos((\Lambda_1 - \Lambda_2)\varphi)}{2\pi}, \tag{B.12}$$

koji se lako dobiju raspisivanjem definicije simplex-y baznih vektora. Naravno, cijelo vrijeme podrazumijevamo notaciju $\alpha = (n_z, n_r, \Lambda)$ za indeksiranje baznih vektora. Kada se to sve uvrsti u (B.11), dobiva se:

$$\begin{aligned}
\delta\rho_{v/s}(\omega, \mathbf{r}) = & \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \left[\delta\hat{\rho}_1(\omega) + \delta\hat{\rho}_2(\omega) \right]_{(\alpha_2, \alpha_1)} \phi_{n_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp) \frac{\cos((\Lambda_1 - \Lambda_2)\varphi)}{2\pi} \\
\pm & \sum_{\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2} \left[\delta\hat{\rho}_1(\omega) + \delta\hat{\rho}_2(\omega) \right]_{(\tilde{\alpha}_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{\tilde{n}_{z1}}(z) \phi_{\tilde{n}_{z2}}(z) \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|}(r_\perp) \phi_{\tilde{n}_{r2}}^{|\tilde{\Lambda}_2|}(r_\perp) \frac{\cos((\tilde{\Lambda}_1 - \tilde{\Lambda}_2)\varphi)}{2\pi}.
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Može se pokazati da kroz iteracije matrični elementi od $[\delta\hat{\rho}_1(\omega) + \delta\hat{\rho}_2(\omega)]$ neće iščezavati samo za stanja selektirana pravilom: $|\Lambda_1 - \Lambda_2| = K$. To slijedi iterativno iz same strukture multipolnog operatora \hat{f}_J^K , uz pretpostavku da početna iteracija zadovoljava to selekcijsko pravilo. Obzirom da se u početnoj iteraciji koristi $\delta\hat{h}_D(\omega) = 0$ što odgovara $\delta\hat{\rho}(\omega)_1 = \delta\hat{\rho}(\omega)_2 = 0$, tj. za početnu iteraciju pretpostavljamo ravnotežno stanje (prva iteracija je zapravo Hartree odziv), selekcijsko pravilo biti će zadovoljeno kroz sve iteracije. Sjetimo se da je čitav ovaj račun vrijedio samo za primjerice neutrone, pa bi sve još trebalo indeksirati izospinskim stupnjem slobode t_z . Konačno, kada se

uzmu u obzir selekcijska pravila, protoni i neutroni, sve zajedno se može pisati:

$$\begin{aligned}
\delta\rho_{v/s}(\omega, \mathbf{r}) &= \delta\rho_{v/s}(\omega, r_{\perp}, z) \cos(K\varphi) = \\
&\sum_{\alpha_1} \left\{ \sum_{\Lambda_2=\Lambda_1\pm K}^{\alpha_2} \left[\sum_{t_z} \delta\hat{\rho}_1^{t_z}(\omega) + \delta\hat{\rho}_2^{t_z}(\omega) \right]_{(\alpha_2, \alpha_1)} \phi_{n_{z2}}^{|\Lambda_2|} \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|} \right\} \phi_{n_{z1}} \phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|} \frac{\cos(K\varphi)}{2\pi} \\
&\pm \sum_{\tilde{\alpha}_1} \left\{ \sum_{\tilde{\Lambda}_2=\tilde{\Lambda}_1\pm K}^{\tilde{\alpha}_2} \left[\sum_{t_z} \delta\hat{\rho}_1^{t_z}(\omega) + \delta\hat{\rho}_2^{t_z}(\omega) \right]_{(\tilde{\alpha}_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{\tilde{n}_{z2}}^{|\tilde{\Lambda}_2|} \phi_{\tilde{n}_{r2}}^{|\tilde{\Lambda}_2|} \right\} \phi_{\tilde{n}_{z1}} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|} \frac{\cos(K\varphi)}{2\pi}.
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Radi kraćeg zapisa, podrazumijeva se izvrijednjavanje svojstvenih funkcija harmoničkog oscilatora u točki (r_{\perp}, z) . Napomenimo da se sada lako izvedu izrazi za izovektorsku-vektorsku gustoću $\rho_{tv}(\mathbf{r}, t)$, za koje isto vrijedi oscilirajuće ponašanje (B.10) uz jedinu preinaku u tome što treba zamijeniti sumacije po t_z sa sumama koje dobiju odgovarajući predznak:

$$\sum_{t_z} O_{t_z} \rightarrow \sum_{t_z} t_z O_{t_z} = +O_p - O_n, \tag{B.15}$$

gdje koristimo izospinsku konvenciju $t_z(p) = +1$ i $t_z(n) = -1$. Dodatni tehnički detalji oko implementacije formule (B.14) nalaze se u potpoglavlju B.4.

B.3 Vremenski ovisne inducirane struje

Analogno postupamo i kod izračuna induciranih struja. U DD-PC1 prametrizaciji funkcionala, trebaju nam samo izoskalarna-vektorska struja $\mathbf{J}_v(\mathbf{r}, t)$ (pišemo radi jednostavnosti u ovom potpoglavlju samo $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$) i izovektorska-vektorska struja $\mathbf{J}_{tv}(\mathbf{r}, t)$. Slično kao malo prije, ako znamo izračunati $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, jednostavnom preinakom izračunamo $\mathbf{J}_{tv}(\mathbf{r}, t)$, pa se fokusiramo sada na $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, primjerice za neutrone. Analogno kao i u (B.6), struje računamo iz matrice gustoće kao:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \sum_{(k_1, s_1), (k_2, s_2)} \hat{\rho}(t)_{(k_1, s_1), (k_2, s_2)} \langle k_2, s_2 | \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} | k_1, s_1 \rangle, \tag{B.16}$$

pa kao i kod gustoća, koristeći blokovsku strukturu (A.16), struju možemo rastaviti kao nezavisne doprinose dva simplex bloka:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = & \sum_{k_1, k_2} \hat{\rho}(t)_{(k_1, +i), (k_2, +i)} \langle k_2, +i | \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} | k_1, +i \rangle \\ & + \sum_{k_1, k_2} \hat{\rho}(t)_{(k_1, -i), (k_2, -i)} \langle k_2, -i | \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} | k_1, -i \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Ako u prethodnu jednadžbu uvrstimo (A.11) i iskoristimo hermitsku simetričnost:

$$\langle k_2, \pm i | \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} | k_1, \pm i \rangle = \langle k_1, \pm i | \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} | k_2, \pm i \rangle^*, \quad (\text{B.18})$$

dobivamo oscilirajuće ponašanje struje:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \underbrace{\mathbf{J}(\mathbf{r})^0}_{=0} + 2\eta \text{Re} \left[e^{-i\omega t} \delta \mathbf{J}(\omega, \mathbf{r}) \right]. \quad (\text{B.19})$$

Sva naša razmatranja odnose se samo na parno-parne jezgre za koje poštuju simetriju obrata vremena, pa je u osnovnom stanju $\mathbf{J}(\mathbf{r})^0 = \mathbf{0}$. Kompleksna funkcija položaja $\delta \mathbf{J}(\omega, \mathbf{r})$, dana je jednadžbom:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{J}(\omega, \mathbf{r}) = & \sum_{k_1, k_2} \delta \hat{\rho}_1(\omega)_{k_1, k_2} \langle k_2, +i | \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} | k_1, +i \rangle \\ & + \sum_{k_1, k_2} \delta \hat{\rho}_2(\omega)_{k_1, k_2} \langle k_2, -i | \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} | k_1, -i \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Kada se u prethodnu jednadžbu uvrste bazni vektori $|k, +i\rangle$ i $|k, -i\rangle$ dani u (B.3), dobije se:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{J}(\omega, \mathbf{r}) = & \sum_{\alpha_1, \tilde{\alpha}_2} \delta \hat{\rho}_1(\omega)_{\tilde{\alpha}_2, \alpha_1} i \langle \alpha_1, +i | \boldsymbol{\sigma} | \tilde{\alpha}_2, -i \rangle - \delta \hat{\rho}_1(\omega)_{\alpha_1, \tilde{\alpha}_2} i \langle \tilde{\alpha}_2, -i | \boldsymbol{\sigma} | \alpha_1, +i \rangle \\ & + \sum_{\alpha_1, \tilde{\alpha}_2} \delta \hat{\rho}_2(\omega)_{\tilde{\alpha}_2, \alpha_1} i \langle \alpha_1, -i | \boldsymbol{\sigma} | \tilde{\alpha}_2, +i \rangle - \delta \hat{\rho}_2(\omega)_{\alpha_1, \tilde{\alpha}_2} i \langle \tilde{\alpha}_2, +i | \boldsymbol{\sigma} | \alpha_1, -i \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Slično kao i kod gustoća, treba izračunati idući skalarni produkt (koji je skalarni produkt samo obzirom na spinski dio valne funkcije):

$$\langle \alpha_1, -i | \boldsymbol{\sigma} | \alpha_2, +i \rangle. \quad (\text{B.22})$$

Ako se spinski operator $\boldsymbol{\sigma}$ raspiše u cilindričnom sustavu:

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{\sigma}_+ e^{-i\varphi} (\mathbf{e}_r - i\mathbf{e}_\varphi) + \hat{\sigma}_- e^{+i\varphi} (\mathbf{e}_r + i\mathbf{e}_\varphi) + \hat{\sigma}_3 \mathbf{e}_z, \quad (\text{B.23})$$

pomoću operatora podizanja $\hat{\sigma}_+$ i spuštanja $\hat{\sigma}_-$ spina, lako se iz definicije simplex-y baznih vektora izračuna da je:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1, -i | \boldsymbol{\sigma} | \alpha_2, +i \rangle &= \frac{1}{2\pi} \phi_{n_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp) \times \\ &\times \left[\cos((\Lambda_1 + \Lambda_2 + 1)\varphi) \mathbf{e}_r - \sin((\Lambda_1 + \Lambda_2 + 1)\varphi) \mathbf{e}_\varphi + i \cos((\Lambda_1 - \Lambda_2)\varphi) \mathbf{e}_z \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Primijetimo da je:

$$\langle \alpha_1, +i | \boldsymbol{\sigma} | \alpha_2, -i \rangle = \langle \alpha_2, -i | \boldsymbol{\sigma} | \alpha_1, +i \rangle^* = \langle \alpha_1, -i | \boldsymbol{\sigma} | \alpha_2, +i \rangle^*. \quad (\text{B.25})$$

Prva jednakost slijedi iz hermitičnosti operatora $\boldsymbol{\sigma}$, dok je druga posljedica simetričnosti na zamjenu indeksa $1 \leftrightarrow 2$ u (B.24). Zapišemo li po komponentama:

$$\delta \mathbf{J}(\omega, \mathbf{r}) = \delta J_r(\omega, \mathbf{r}) \mathbf{e}_r + \delta J_\varphi(\omega, \mathbf{r}) \mathbf{e}_\varphi + \delta J_z(\omega, \mathbf{r}) \mathbf{e}_z, \quad (\text{B.26})$$

uvrštavanjem (B.24) i (B.25) u (B.21), očitavamo redom komponente:

$$\delta J_r(\omega, \mathbf{r}) = -i \sum_{\tilde{\alpha}_1, \alpha_2} \left[\delta \hat{\rho}_r(\omega) \right]_{(\alpha_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{\tilde{n}_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp) \frac{\cos((\tilde{\Lambda}_1 + \Lambda_2 + 1)\varphi)}{2\pi} \quad (\text{B.27})$$

$$\delta J_\varphi(\omega, \mathbf{r}) = +i \sum_{\tilde{\alpha}_1, \alpha_2} \left[\delta \hat{\rho}_r(\omega) \right]_{(\alpha_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{\tilde{n}_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp) \frac{\sin((\tilde{\Lambda}_1 + \Lambda_2 + 1)\varphi)}{2\pi} \quad (\text{B.28})$$

$$\delta J_z(\omega, \mathbf{r}) = \sum_{\tilde{\alpha}_1, \alpha_2} \left[\delta \hat{\rho}_z(\omega) \right]_{(\alpha_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{\tilde{n}_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp) \frac{\cos((\tilde{\Lambda}_1 - \Lambda_2)\varphi)}{2\pi} \quad (\text{B.29})$$

Može se provjeriti da kroz iteracije matrični elementi od:

$$\delta \hat{\rho}_r(\omega) := \delta \hat{\rho}_1(\omega) + \delta \hat{\rho}_2(\omega) - \delta \hat{\rho}_1^T(\omega) - \delta \hat{\rho}_2^T(\omega), \quad (\text{B.30})$$

ne iščezavaju samo za stanja selektirana pravilom: $|\tilde{\Lambda}_1 + \Lambda_2 + 1| = K$, dok matrični elementi od:

$$\delta \hat{\rho}_z(\omega) := \delta \hat{\rho}_1(\omega) - \delta \hat{\rho}_2(\omega) + \delta \hat{\rho}_1^T(\omega) - \delta \hat{\rho}_2^T(\omega), \quad (\text{B.31})$$

ne iščezavaju za stanja selektirana pravilom: $|\tilde{\Lambda}_1 - \Lambda_2| = K$.

Konačno, ako uzmemo u obzir selekcijska pravila, protone i neutrone, sve zajedno možemo pisati:

$$\begin{aligned} \delta J_r(\omega, \mathbf{r}) &= \delta J_r(\omega, r_\perp, z) \cos(K\varphi) = \\ &- i \sum_{\tilde{\alpha}_1} \left\{ \sum_{\substack{\alpha_2 \\ \Lambda_2 = -\tilde{\Lambda}_1 - 1 \pm K}} \left[\sum_{t_z} \delta \hat{\rho}_r^{t_z}(\omega) \right]_{(\alpha_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{n_{z2}} \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|} \right\} \phi_{\tilde{n}_{z1}} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|} \frac{\cos(K\varphi)}{2\pi}, \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

$$\begin{aligned} \delta J_\varphi(\omega, \mathbf{r}) &= \delta J_\varphi(\omega, r_\perp, z) \sin(K\varphi) = \\ &+ i \sum_{\tilde{\alpha}_1} \left\{ \sum_{\substack{\alpha_2 \\ \Lambda_2 = -\tilde{\Lambda}_1 - 1 \pm K}} \text{sgn}(\tilde{\Lambda}_1 + \Lambda_2 + 1) \left[\sum_{t_z} \delta \hat{\rho}_r^{t_z}(\omega) \right]_{(\alpha_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{n_{z2}} \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|} \right\} \phi_{\tilde{n}_{z1}} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|} \frac{\sin(K\varphi)}{2\pi}, \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

$$\begin{aligned} \delta J_z(\omega, \mathbf{r}) &= \delta J_z(\omega, r_\perp, z) \cos(K\varphi) = \\ &\sum_{\tilde{\alpha}_1} \left\{ \sum_{\substack{\alpha_2 \\ \Lambda_2 = \tilde{\Lambda}_1 \pm K}} \left[\sum_{t_z} \delta \hat{\rho}_z^{t_z}(\omega) \right]_{(\alpha_2, \tilde{\alpha}_1)} \phi_{n_{z2}} \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|} \right\} \phi_{\tilde{n}_{z1}} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|} \frac{\cos(K\varphi)}{2\pi}. \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

Ponovo, lako se zamjenom $\sum_{t_z} O_{t_z} \rightarrow \sum_{t_z} t_z O_{t_z} = +O_p - O_n$, dobiju komponente izovektorske-vektorske struje. Napomenimo još da u korištenom sustavu jedinica izračunate struje imaju jedinicu [$c \text{ fm}^{-3}$].

B.4 Tehnički detalji

Primijetimo da se u konačnim formulama (B.14),(B.32),(B.33) i (B.34) pojavljuju dvostruke sume po stanjima u razvoju. Fokusirajmo se na slučaj $\delta J_r(\omega, \mathbf{r})$, ostali su analogni. Prije ulaska u iterativan postupak, produkti baznih funkcija $\phi_{n_z} \phi_{n_r}^{|\Lambda|}$ izvršene se na Gaussovoj mreži.

Tijekom iterativnog postupka, pri evaluaciji $\delta J_r(\omega, \mathbf{r})$ na Gaussovoj mreži, spremimo matricu $\delta \hat{\rho}_r = \left[\sum_{t_z} \delta \hat{\rho}_1^{t_z} + \delta \hat{\rho}_2^{t_z} - \delta \hat{\rho}_1^{t_z T} - \delta \hat{\rho}_2^{t_z T} \right]$ u jednu lokalnu matricu. Pitanje je kako organizirati proizvoljan poredak stanja u bazi (B.3), tako da se efikasno koristi selekcijsko pravilo nametnuto na unutarnju sumu po α_2 , jednom kada fiksiramo indeks vanjske sume po $\tilde{\alpha}_1$. Pogodno je sortirati stanja po kvantnom broju Λ , tako da kada jednom znamo indeks vanjske sume $\tilde{\alpha}_1$, odmah možemo odrediti sekvencijalan niz stanja po kojima moramo proći u unutarnjoj sumi po α_2 .

Obzirom da se račun za neku negativnu $z < 0$ koordinatu na Gaussovoj mreži jako malo razlikuje od pozitivne koordinate $|z|$ (u prefaktoru $(-1)^{\tilde{n}_{z1}+n_{z2}}$ u sumama, zbog Hermiteovih polinoma iz ϕ_{n_z}), možemo rastavljajući dvostruku sumu na dijelove (shematski pisano):

$$\sum_{\tilde{\alpha}_1, \alpha_2} = \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 0}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 0}} + \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 1}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 1}} + \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 1}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 0}} + \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 0}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 1}},$$

i računajući svaku sumu posebno samo za nenegativne $z \geq 0$ koordinate, automatski dobiti i vrijednosti struje na $-z$ koordinatama:

$$\sum_{\tilde{\alpha}_1, \alpha_2} = \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 0}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 0}} + \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 1}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 1}} - \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 1}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 0}} - \sum_{\substack{\tilde{\alpha}_1 \\ \tilde{n}_{z1} \equiv 0}} \sum_{\substack{\alpha_2 \\ n_{z2} \equiv 1}}.$$

Pritom koristimo notaciju kongruentnosti $a \equiv b$ podrazumijevajući svuda modulo 2, gdje je b iz sustava ostataka $\{0, 1\}$. Zato bazu sortiramo tako da definiramo relaciju totalnog uređaja \preceq na skupu indeksa baze iz jednog simplex bloka i primjerice iz bloka velike komponente spinora:

$$\begin{aligned} \alpha_1 \preceq \alpha_2 : & \iff (\Lambda_1 < \Lambda_2) \vee \\ & \left[(\Lambda_1 = \Lambda_2) \wedge (n_{z1} \pmod{2} < n_{z2} \pmod{2}) \right] \vee \\ & \left[(\Lambda_1 = \Lambda_2) \wedge (n_{z1} \pmod{2} = n_{z2} \pmod{2}) \wedge (n_{r1} \leq n_{r2}) \right], \end{aligned} \tag{B.35}$$

jer želimo grupirati stanja u jedan sekvencijalan komad memorije kada selekcijsko pravilo odredi granice unutarnje sume po α_2 . Isto pravilo uređaja $\tilde{\alpha}_1 \preceq \tilde{\alpha}_2$, napravimo i za malu komponentu. Na taj način poštujemo princip lokalnosti (efikasno korištenje priručne *cache* memorije) jer je tada dio memorije koji u nekom trenutku koristimo iz matrice $\left[\sum_{t_z} \delta \hat{\rho}_1^{t_z} + \delta \hat{\rho}_2^{t_z} - \delta \hat{\rho}_1^{t_z T} - \delta \hat{\rho}_2^{t_z T} \right]$ i produkata baznih funkcija $\phi_{n_z} \phi_{n_r}^{|\Lambda|}$, sekvencijalan niz memorijskih lokacija.

Dodatak C Inducirani jednočestični Hamiltonijan

C.1 Funkcionalna derivacija $\delta \hat{h}_D(\omega)$

Jednočestični Hamiltonijan (2.7):

$$\hat{h}_D = c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + (\Sigma^0 + \Sigma_R^0) + (\Sigma_s + mc^2) \beta - \boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}_R), \quad (\text{C.1})$$

u DD-PC1 parametrizaciji, funkcionalno deriviramo po gustoćama i strujama. Prostorna komponenta $\boldsymbol{\Sigma}_R$ od potencijala Σ_R^μ , sadrži predfaktor $\frac{j^i}{\rho_v} = \frac{\mathbf{J}}{\rho_v}$ kojeg zanemarujemo, pa onda i čitavu prostornu komponentu *rearrangement* člana $\boldsymbol{\Sigma}_R$ zanemarujemo. Derivaciju $\delta \hat{h}_D$ lako vidimo da možemo zapisati:

$$\delta \hat{h}_D = \begin{pmatrix} \delta V + \delta S & -\boldsymbol{\sigma} \cdot (\delta \boldsymbol{\Sigma} + \frac{1+t_z}{2} \delta \mathbf{V}_{\text{Mag}}) \\ -\boldsymbol{\sigma} \cdot (\delta \boldsymbol{\Sigma} + \frac{1+t_z}{2} \delta \mathbf{V}_{\text{Mag}}) & \delta V - \delta S \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

gdje je vektorski potencijal: $\delta V = \delta \Sigma^0 + \delta \Sigma_R^0 + \frac{1+t_z}{2} \delta V_{\text{Cou}}$, a skalarni: $\delta S = \delta \Sigma_s$. U nastavku su dane funkcionalne derivacije pojedinih potencijala kao funkcionali induciranih gustoća i struja (indeks ⁰ označava vrijednost u osnovnom stanju):

$$\frac{\delta \Sigma^0}{\hbar c} = \left\{ \alpha'_V(\rho_v^0) \rho_v^0 + \alpha_V(\rho_v^0) + t_z \alpha'_{TV}(\rho_v^0) \rho_{tv}^0 \right\} \delta \rho_v + \left\{ t_z \alpha_{TV}(\rho_v^0) \right\} \delta \rho_{tv}, \quad (\text{C.3})$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma_R^0}{\hbar c} &= \frac{1}{2} \left\{ \alpha''_S(\rho_v^0) (\rho_s^0)^2 + \alpha''_V(\rho_v^0) (\rho_v^0)^2 + \alpha''_{TV}(\rho_v^0) (\rho_{tv}^0)^2 \right\} \delta \rho_v \\ &+ \left\{ \alpha'_S(\rho_v^0) \rho_s^0 \right\} \delta \rho_s + \left\{ \alpha'_V(\rho_v^0) \rho_v^0 \right\} \delta \rho_v + \left\{ \alpha'_{TV}(\rho_v^0) \rho_{tv}^0 \right\} \delta \rho_{tv}, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{\delta \Sigma_s}{\hbar c} = \left\{ \alpha'_S(\rho_v^0) \rho_s^0 \right\} \delta \rho_v + \left\{ \alpha_S(\rho_v^0) \right\} \delta \rho_s + \delta_S \nabla^2 \delta \rho_s, \quad (\text{C.5})$$

$$\frac{\delta\Sigma}{\hbar c} = \left\{ \alpha_V(\rho_v^0) \right\} \frac{\delta\mathbf{J}_v}{c} + t_z \left\{ \alpha_{TV}(\rho_v^0) \right\} \frac{\delta\mathbf{J}_{tv}}{c}. \quad (\text{C.6})$$

U prethodnim je derivacijama korištena činjenica da u osnovnom stanju sve prostorne komponente struja iščezavaju. Također podsjetimo se da koristimo konvenciju u kojoj su četverostruje $j^\mu = (c\rho, \mathbf{J})$ i elektromagnetski četveropotencijal $A^\mu = (\frac{1}{c}\phi, \mathbf{A})$. U Lorentzovom baždarenju, zanemarujući efekte retardiranog vremena, Coulombov i magnetski vektorski potencijali glase:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{e\rho_{v,t_z=+1}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{\hbar c\alpha}{e} \int \frac{\rho_{v,t_z=+1}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (\text{C.7})$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{e\mathbf{J}_{v,t_z=+1}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{\hbar c\alpha}{ce} \int \frac{\frac{1}{c}\mathbf{J}_{v,t_z=+1}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (\text{C.8})$$

pa član elektromagnetske interakcije $c^{\frac{1+t_z}{2}}eA^\mu$ iz potencijala Σ^μ (2.9), daje izraze za inducirane elektromagnetske potencijale:

$$\delta V_{\text{Cou}}(\mathbf{r}, t) = \hbar c\alpha \int \frac{\delta\rho_{v,t_z=+1}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (\text{C.9})$$

$$\delta \mathbf{V}_{\text{Mag}}(\mathbf{r}, t) = \hbar c\alpha \int \frac{\frac{1}{c}\delta\mathbf{J}_{v,t_z=+1}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (\text{C.10})$$

Jednadžbe (C.7) i (C.8) su rješenja Poissonove jednadžbe u Lorentzovom baždarenju, uz rubni uvjet trenjenja u beskonačnosti:

$$\nabla^2 A^\mu = -\mu_0 j^\mu \quad , \quad A^\mu(\mathbf{r}) \xrightarrow{|\mathbf{r}| \rightarrow +\infty} 0, \quad (\text{C.11})$$

koja slijedi iz varijacije DD-PC1 Lagrangijana (2.3). Jer inducirane struje i gustoće imaju oscilatorno ponašanje (B.10) i (B.19), a inducirani potencijali δV , δS , δV_{Cou} , $\delta \mathbf{V}_{\text{Mag}}$ i $\delta\Sigma$ ovise linearno o induciranim gustoćama i strujama, doista se $\delta\hat{h}_D(t)$ može napisati kao:

$$\delta\hat{h}_D(t) = \eta \left\{ \delta\hat{h}_D(\omega)e^{-i\omega t} + \delta\hat{h}_D(\omega)^\dagger e^{+i\omega t} \right\}, \quad (\text{C.12})$$

gdje $\delta\hat{h}_D(\omega)$ ima istu formu kao (C.2) jedino uz razliku što su u inducirane potencijale uvšteni $\delta\rho(\omega, \mathbf{r})$ i $\delta\mathbf{J}(\omega, \mathbf{r})$ umjesto $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ i $\delta\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$.

C.2 Prikaz operatora $\delta\hat{h}_D(\omega)$ u simplex-y bazi

U ovom potpoglavlju, izvedeni su matrični elementi matrice $\delta\hat{h}_1(\omega)$ u simplex-y bazi, tj. izračunate su matrice A , B , C i D iz jednadžbe (3.32). Pretpostavlja se da su inducirani potencijali δV , δS , δV_{Cou} , δV_{Mag} i $\delta\Sigma$ poznati na Gaussovoj mreži. Zanimarito ćemo δV_{Mag} u ovom potpoglavlju radi kraćeg zapisa jer se δV_{Mag} može jednostavnom redefinicijom uvući u potencijal $\delta\Sigma$ prema (C.2). Matrične elemente od $\delta\hat{h}_1(\omega)$ jednostavno dobijemo tako da računamo $\langle k_1, +i | \delta\hat{h}_D(\omega) | k_2, +i \rangle$, za sve vektore $|k_1, +i\rangle$, $|k_2, +i\rangle$ iz simplex $s = +i$ bloka baze (B.3). Najprije računamo matrične elemente koji su generirani potencijalima $\delta V \pm \delta S$. Kako su δV i δS linearno proporcionalni induciranim gustoćama, a gustoće imaju faktoriziranu kutnu ovisnost $\cos(K\varphi)$, možemo pisati:

$$(\delta V \pm \delta S)(\mathbf{r}) = (\delta V \pm \delta S)(r_\perp, z) \cos(K\varphi), \quad (\text{C.13})$$

što rezultira selekcijskim pravilom u matričnim elementima matrica A i D :

$$A_{\alpha_1, \alpha_2} = \langle \alpha_1, +i | \delta V + \delta S | \alpha_2, +i \rangle, \quad D_{\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2} = \langle \tilde{\alpha}_1, -i | \delta V - \delta S | \tilde{\alpha}_2, -i \rangle, \quad (\text{C.14})$$

$$A_{\alpha_1, \alpha_2} = \delta_{|\Lambda_1 - \Lambda_2|, K} \frac{1 + \delta_{K,0}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{+\infty} r_\perp dr_\perp (\delta V + \delta S)(r_\perp, z) \phi_{n_{z1}} \phi_{n_{z2}} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\Lambda_1|} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\Lambda_2|}, \quad (\text{C.15})$$

$$D_{\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2} = \delta_{|\tilde{\Lambda}_1 - \tilde{\Lambda}_2|, K} \frac{1 + \delta_{K,0}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{+\infty} r_\perp dr_\perp (\delta V - \delta S)(r_\perp, z) \phi_{\tilde{n}_{z1}} \phi_{\tilde{n}_{z2}} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_1|} \phi_{\tilde{n}_{r1}}^{|\tilde{\Lambda}_2|}. \quad (\text{C.16})$$

Prethodni integrali numerički se integriraju na Gaussovoj mreži. Usput, lako se pokaže da su $\langle \alpha_1, +i | \delta V \pm \delta S | \alpha_2, -i \rangle = \langle \alpha_1, -i | \delta V \pm \delta S | \alpha_2, +i \rangle = 0$, što je zapravo jedan od razloga blokovske strukture (3.31) matrice $\delta\hat{h}_D(\omega)$. Slično tako je potencijal $\delta\Sigma$ linearno proporcionalan induciranim strujama koje također imaju faktoriziranu kutnu ovisnost (B.32), (B.33) i (B.34), pa možemo pisati:

$$\delta\Sigma(\mathbf{r}) = \delta\Sigma_r(r_\perp, z) \cos(K\varphi) \mathbf{e}_r + \delta\Sigma_\varphi(r_\perp, z) \sin(K\varphi) \mathbf{e}_\varphi + \delta\Sigma_z(r_\perp, z) \cos(K\varphi) \mathbf{e}_z. \quad (\text{C.17})$$

Matrice B i C dane su matričnim elementima:

$$B_{\alpha_1, \tilde{\alpha}_2} = +i \langle \alpha_1, +i | \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\Sigma} | \tilde{\alpha}_2, -i \rangle \quad , \quad C_{\tilde{\alpha}_1, \alpha_2} = -i \langle \tilde{\alpha}_1, -i | \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\Sigma} | \alpha_2, +i \rangle . \quad (\text{C.18})$$

Raspisivanjem operatora $\boldsymbol{\sigma}$ u cilindričnoj bazi (B.23) i simplex-y vektora lako slijedi:

$$\begin{aligned} +i \langle \alpha_1, +i | \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\Sigma} | \tilde{\alpha}_2, -i \rangle &= +i \langle n_{z1}, n_{r1}, -\Lambda_1 | \delta \Sigma_r(r_\perp, z) e^{i\varphi} \cos(K\varphi) | \tilde{n}_{z2}, \tilde{n}_{r2}, \tilde{\Lambda}_2 \rangle \\ &\quad - \langle n_{z1}, n_{r1}, -\Lambda_1 | \delta \Sigma_\varphi(r_\perp, z) e^{i\varphi} \sin(K\varphi) | \tilde{n}_{z2}, \tilde{n}_{r2}, \tilde{\Lambda}_2 \rangle \\ &\quad + \langle n_{z1}, n_{r1}, \Lambda_1 | \delta \Sigma_z(r_\perp, z) \cos(K\varphi) | \tilde{n}_{z2}, \tilde{n}_{r2}, \tilde{\Lambda}_2 \rangle , \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

$$\begin{aligned} -i \langle \tilde{\alpha}_1, -i | \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\Sigma} | \alpha_2, +i \rangle &= -i \langle \tilde{n}_{z1}, \tilde{n}_{r1}, -\tilde{\Lambda}_1 | \delta \Sigma_r(r_\perp, z) e^{i\varphi} \cos(K\varphi) | n_{z2}, n_{r2}, \Lambda_2 \rangle \\ &\quad + \langle \tilde{n}_{z1}, \tilde{n}_{r1}, -\tilde{\Lambda}_1 | \delta \Sigma_\varphi(r_\perp, z) e^{i\varphi} \sin(K\varphi) | n_{z2}, n_{r2}, \Lambda_2 \rangle \\ &\quad + \langle \tilde{n}_{z1}, \tilde{n}_{r1}, \tilde{\Lambda}_1 | \delta \Sigma_z(r_\perp, z) \cos(K\varphi) | n_{z2}, n_{r2}, \Lambda_2 \rangle . \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

Usput, lako se pokaže da su $\langle \alpha_1, +i | \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\Sigma} | \alpha_2, +i \rangle = \langle \alpha_1, -i | \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\Sigma} | \alpha_2, -i \rangle = 0$, što je konačan razlog blokovske strukture matrice $\delta \hat{h}_D(\omega)$ i time je opravdan rastav (3.31).

Još treba riješiti integrale iz (C.19) i (C.20):

$$\begin{aligned} \langle n_{z1}, n_{r1}, -\Lambda_1 | \delta \Sigma_r(r_\perp, z) e^{i\varphi} \cos(K\varphi) | n_{z2}, n_{r2}, \Lambda_2 \rangle &= \delta_{|\Lambda_1 + \Lambda_2 + 1|, K} \frac{1 + \delta_{K,0}}{2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{+\infty} r_\perp dr_\perp \delta \Sigma_r(r_\perp, z) \phi_{n_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp), \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

$$\begin{aligned} \langle n_{z1}, n_{r1}, -\Lambda_1 | \delta \Sigma_\varphi(r_\perp, z) e^{i\varphi} \sin(K\varphi) | n_{z2}, n_{r2}, \Lambda_2 \rangle &= \delta_{|\Lambda_1 + \Lambda_2 + 1|, K} \frac{1 - \delta_{K,0}}{2} \times i \\ &\times \text{sgn}(\Lambda_1 + \Lambda_2 + 1) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{+\infty} r_\perp dr_\perp \delta \Sigma_\varphi(r_\perp, z) \phi_{n_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp), \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

$$\begin{aligned} \langle n_{z1}, n_{r1}, \Lambda_1 | \delta \Sigma_z(r_\perp, z) \cos(K\varphi) | n_{z2}, n_{r2}, \Lambda_2 \rangle &= \delta_{|\Lambda_1 - \Lambda_2|, K} \frac{1 + \delta_{K,0}}{2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{+\infty} r_\perp dr_\perp \delta \Sigma_z(r_\perp, z) \phi_{n_{z1}}(z) \phi_{n_{z2}}(z) \phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}(r_\perp) \phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_\perp), \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

koji se također numerički integriraju na Gaussovoj mreži. Time su potpuno zadane matrice A , B , C i D koje zadaju $\delta \hat{h}_1(\omega)$, dok $\delta \hat{h}_2(\omega)$ računamo iz (3.32), čime je

izračunat prikaz induciranoj jednočestičnoj Hamiltonijana $\delta\hat{h}_D(\omega)$ u simplex-y bazi. Zbog selekcijskih pravila i zbog simetričnosti matrica A i D , dovoljno je u Broydenovoj metodi koristiti samo neiščezavajuće elemente matrica B i C te neiščezavajuće elemente gornjeg trokuta matrica A i D (zbog $A = A^T$ i $D = D^T$).

Dodatak D Računanje elektromagnetske interakcije

D.1 Laplacijani baznih funkcija

Prilikom računanja elektromagnetske interakcije, potrebni su nam Laplacijani protonske izoskalarne-vektorske gustoće: $\nabla^2\delta\rho_{v,t_z=+1}(\omega, \mathbf{r})$ i izoskalarne-vektorske struje: $\nabla^2\delta\mathbf{J}_{v,t_z=+1}(\omega, \mathbf{r})$. Također, u skalarnom potencijalu Σ_s potreban je Laplacijan izoskalarne-skalarne gustoće: $\nabla^2\delta\rho_s(\omega, \mathbf{r})$. U implementaciji slijedimo formule (B.14), (B.32), (B.33) i (B.34) uz jedinu razliku u zamjeni:

$$\phi_{n_{z1}}\phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}\phi_{n_{z2}}\phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}\frac{\cos(K\varphi)}{2\pi} \rightarrow \nabla^2 \left(\phi_{n_{z1}}\phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}\phi_{n_{z2}}\phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}\frac{\cos(K\varphi)}{2\pi} \right). \quad (\text{D.1})$$

Koristeći činjenicu da su vektori:

$$|n_z, n_r, \Lambda\rangle = \phi_{n_z}(z)\phi_{n_r}^{|\Lambda|}(r_\perp)\frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (\text{D.2})$$

sojstveni vektori deformiranog, aksijalno simetričnog, harmoničkog potencijala, može se izračunati:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \left(\phi_{n_{z1}}\phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}\phi_{n_{z2}}\phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}\frac{\cos(K\varphi)}{2\pi} \right) &= \phi_{n_{z1}}\phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}\phi_{n_{z2}}\phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}\frac{\cos(K\varphi)}{\pi} \times \\ &\times \left[\frac{-K^2 + \Lambda_1^2 + \Lambda_2^2}{2r_\perp^2} + \frac{1}{b_0^4} \left(\frac{r_\perp^2}{b_r^4} + \frac{z^2}{b_z^4} \right) - \frac{n_{z1} + n_{z2} + 1}{b_0^2 b_z^2} - \frac{2(n_{r1} + n_{r2} + 1) + |\Lambda_1| + |\Lambda_2|}{b_0^2 b_r^2} \right] \\ &+ \phi_{n_{z1}}\frac{d\phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}}{dr_\perp}\phi_{n_{z2}}\frac{d\phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}}{dr_\perp}\frac{\cos(K\varphi)}{\pi} + \frac{d\phi_{n_{z1}}}{dz}\phi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}\frac{d\phi_{n_{z2}}}{dz}\phi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}\frac{\cos(K\varphi)}{\pi}. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Prisjetimo se da bazne funkcije sadrže Hermiteove, odnosno Laguerrove polinome pa je moguće egzaktno izraziti derivacije koje se pojavljuju u prethodnoj formuli ponovno pomoću baznih funkcija, a same bazne funkcije izračunati koristeći rekurzivne relacije za Hermiteove i Laguerrove polinome [8]. Primijetimo da smo i u slučaju Laplacijana induciranih gustoća i struja uspjeli faktorizirati kutnu ovisnost $\cos(K\varphi)$,

odnosno $\sin(K\varphi)$ u slučaju e_φ komponente inducirane struje. Drugim riječima, ponovno možemo pisati:

$$\nabla^2 \delta\rho_{v,t_z=+1}(\omega, \mathbf{r}) =: \nabla^2(\delta\rho_{v,t_z=+1}(\omega, r_\perp, z)) \cos(K\varphi), \quad (\text{D.4})$$

slično faktoriziramo kutnu ovisnost i za $\nabla^2 \delta\mathbf{J}_{v,t_z=+1}(\omega, \mathbf{r})$.

D.2 Metoda Greenove funkcije

Promatrajmo samo Coulombov potencijal δV_{Cou} , jer je slučaj potencijala δV_{Mag} analogan. Pokazali smo da je inducirani Coulombov potencijal (C.9) dan s:

$$\delta V_{\text{Cou}}(\omega, \mathbf{r}) = \hbar c \alpha \int \frac{\delta\rho_{v,t_z=+1}(\omega, \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (\text{D.5})$$

Coulombova interakcija je problematična u praktičnim računima ne samo zbog dalekodosežnosti koja spriječava mogućnost razvijanja u bazi oscilatora, nego i zbog singularnosti u točki $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$. Potonji problem možemo zaobići nauštrb povećanja oscilatornog ponašanja podintegralne funkcije (što znači potrebu za više čvorova prilikom numeričke integracije):

$$\delta V_{\text{Cou}}(\omega, \mathbf{r}) = \frac{\hbar c \alpha}{2} \int |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \nabla_{\mathbf{r}'}^2 (\delta\rho_{v,t_z=+1}(\omega, r'_\perp, z')) \cos(K\varphi') d\mathbf{r}'. \quad (\text{D.6})$$

Pritom je korišten identitet $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ i Greenov identitet uz činjenicu da sve gustoće (i struje) eksponencijalno iščezavaju udaljavanjem od jezgre. Dakle, vidimo da je problem singularnosti prebačen na povećano oscilatorno ponašanje podintegralne funkcije jer sada integriramo Laplacijan protonske gustoće. Moguće je egzaktno integrirati kutni dio prethodnog integrala po prostoru, te Coulombovu interakciju zapisati kao dvodimenzionalni integral:

$$\delta V_{\text{Cou}}(\omega, \mathbf{r}) = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} G(r'_\perp, z', r_\perp, z) \nabla_{\mathbf{r}'}^2 (\delta\rho_{v,t_z=+1}(\omega, r'_\perp, z')) r'_\perp dr'_\perp dz' \right] \cos(K\varphi), \quad (\text{D.7})$$

gdje je Greenova funkcija dana s:

$$G(r'_\perp, z', r_\perp, z) = 2\hbar c \alpha \sqrt{(r_\perp + r'_\perp)^2 + (z - z')^2} \times I_K \left(\frac{4r_\perp r'_\perp}{(r_\perp + r'_\perp)^2 + (z - z')^2} \right). \quad (\text{D.8})$$

Kutni integral $I_K(a)$ kojeg treba egzaktno riješiti je:

$$I_K(a) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - a \cos^2(x)} \cos(2Kx) dx, \quad K \geq 0, a \in [0, 1]. \quad (\text{D.9})$$

Manipulacijom prethodnog izraza, može se dobiti rekurzivna relacija za $K \geq 2$:

$$I_K(a) = \left(\frac{4K-4}{2K+1} \times \frac{2-a}{a} \right) I_{K-1}(a) - \left(\frac{2K-5}{2K+1} \right) I_{K-2}(a). \quad (\text{D.10})$$

Pomoću inicijalizacije rekurzije drugog reda:

$$I_0(a) = E(a), \quad I_1(a) = \left(\frac{2-2a}{3a} \right) K(a) - \left(\frac{2-a}{3a} \right) E(a) \quad (\text{D.11})$$

lako izračunamo egzaktni izraz za $I_K(a)$ za bilo koji K koji se pojavljuje u praktičnim implementacijama. $K(a)$ i $E(a)$ su potpuni eliptički integrali prve i druge vrste:

$$K(a) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - a \cos^2(x)}} dx, \quad E(a) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - a \cos^2(x)} dx. \quad (\text{D.12})$$

Za njih postoje vrlo precizne polinomijalne aproksimacije [18] koje se brzo računaju pa Greenovu funkciju možemo brzo i precizno izračunati u bilo kojoj točki $(r'_\perp, z', r_\perp, z)$. To je korisno ako su zahtjevi za memorijom preveliki zbog velikog broja čvorova integracije pa smo prisiljeni računati Greenovu funkciju nanovo u svakoj iteraciji. U protivnom, ako mreža čvorova nije prevelika, možemo prije ulaska u iterativan postupak spremati vrijednosti od $G(r'_\perp, z', r_\perp, z)$ za sve točke $(r'_\perp, z', r_\perp, z)$ koje će nam trebati, i koristiti ih tokom iterativnog postupka. Iskustvo pokazuje da će oscilatorno ponašanje inducirane gustoće (struja) još jače biti izraženo u njenom Laplacijanu, što rezultira potrebom za relativno velikim brojem integracijskih čvorova pri numeričkoj integraciji. Osim za neka relativno jednostavna pobuđenja kao npr. monopolno pobuđenje biti će često nemoguće spremati čitavu Greenovu funkciju prije iterativnog postupka. Zato je korisna mogućnost brzog i preciznog računanja Greenove funkcije u proizvoljnoj točki, što je moguće napraviti opisanom metodom.

Literatura

- [1] A. Bjelčić, Implementacija FAM metode u Fortran 77, <http://web.studenti.math.pmf.unizg.hr/~abjelcic/diplomski/FAM.zip>, (3. rujna 2018).
- [2] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C **78**, 034138 (2008).
- [3] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1980).
- [4] T. Nikšić, N. Kralj, T. Tutiš, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C **88**, 044327 (2013).
- [5] P. Avogadro and T. Nakatsukasa, Phys. Rev. C **84**, 014314 (2011).
- [6] T. Oishi, M. Kortelainen, N. Hinohara, Phys. Rev. C **93**, 034329 (2016).
- [7] Y. Tian, Z. Y. Ma, P. Ring, Phys. Lett. B **44**, 676 (2009).
- [8] A. Bjelčić, *Implementacija nuklearnih energijskih funkcionala gustoće*, seminar, PMF Fizički odsjek, <http://web.studenti.math.pmf.unizg.hr/~abjelcic/stranica/semBjelcic.pdf>, (25. siječnja 2018.).
- [9] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, P. Ring, Comp. Phys. Comm. **185**, 1808 (2014).
- [10] S. Wong, *Introduction to Nuclear Physics* (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2004).
- [11] Y. K. Gambhir, P. Ring, A. Thimet, Ann. Phys. (NY) **198** (1990) 132.
- [12] W. Cheney, D. Kincaid, *Numerical Mathematics and Computing* (4. edition, Brooks/Cole Publishing Company, Pacific Groove, 1999).
- [13] A. Goodman, Nucl. Phys. A **230**, 466 (1974).
- [14] M. Stoitsov, M. Kortelainen, T. Nakatsukasa, C. Losa, W. Nazarewicz, Phys. Rev. C **84**, 041305(R) (2011).
- [15] J. P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, D. Vretenar, Nature **487**, 341 (2012).
- [16] Animirana ilustracija izoskalarne-vektorske gustoće izovektorskih dipolnih $K = 0$ i $K = 1$ pobuđenja jezgre ^{20}Ne na rezonantnim energijama, <http://web.studenti.math.pmf.unizg.hr/~abjelcic/diplomski/anim.zip>, (21. rujna 2018).

- [17] G. A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, *Phys. Rev. C* **71**, 024312 (2005).
- [18] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York, 1970).