

Mikroskopski opis oktupolnih pobuđenja u izotopima samarija i gadolinija

Marević, Petar

Master's thesis / Diplomski rad

2015

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:217:445914>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2025-01-18**



Repository / Repozitorij:

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



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Petar Marević

MIKROSKOPSKI OPIS OKTUPOLNIH
POBUĐENJA U IZOTOPIMA SAMARIJA I
GADOLINIJA

Diplomski rad

Zagreb, 2015.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: ISTRAŽIVAČKI

Petar Marević

Diplomski rad

**Mikroskopski opis oktupolnih
pobuđenja u izotopima samarija i
gadolinija**

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

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2015.

Zahvaljujem se izv. prof. dr. sc. Tamari Nikšić na pomoći pri izradi ovoga rada, kao i na izrazito strpljivom i predanom mentorstvu tijekom posljednje dvije godine mogega studija. Njena stručnost, smirenost i posvećenost radu predstavljaju izniman uzor pri izgradnji moje profesionalne karijere i na tome sam naročito zahvalan. Također, hvala svim profesorima i kolegama s Fizičkog odsjeka koji su moj petogodišnji boravak na Brdu učinili korisnim i ugodnim iskustvom. Posebno sam zahvalan izv. prof. dr. sc. Matku Milinu na ukazanom povjerenju na početku treće godine, stalnoj profesionalnoj i ljudskoj podršci te mnogobrojnim razgovorima za koje je uvijek nalazio vremena. Konačno, veliko hvala obitelji i prijateljima na podršci i razumijevanju.

Sažetak

U ovome je radu primijenjen formalizam relativističkih energijskih funkcionala gustoće pri opisu oktupolnih pobuđenja u parnim izotopnim lancima atomskih jezgara samarija i gadolinija. Račun na razini srednjega polja, temeljen na relativističkom Hartree-Bogoliubovljevom modelu i vrlo uspješnom DD-PC1 funkcionalu, nadopunjen je metodom generirajućih koordinata kako bi se uzele u obzir kolektivne korelacije koje potječu od ponovnog upostavljanja dobrog pariteta i miješanja konfiguracija. Eksperimentalne vrijednosti energija vezanja i kvadrupolnih deformacija u osnovnom stanju promatranih jezgara reproducirane su s izvrsnom točnošću, a uključivanjem kolektivnih korelacija reproduciran je i empirijski trend oktupolnih deformacija u izotopima samarija. Izračunate energije pobuđenja prvih neparnih stanja i snage električnih oktupolnih prijelaza dobro se podudaraju s eksperimentalnim vrijednostima, kao i s rezultatima dobivenim u okviru modela kolektivnog Hamiltonijana.

Microscopic description of octupole excitations in samarium and gadolinium isotopes

Abstract

In this work the relativistic energy density functionals framework has been employed in description of octupole excitations in even samarium and gadolinium isotopes. The mean-field calculations, based on the relativistic Hartree-Bogoliubov model and highly successful DD-PC1 functional, have been supplemented by the generating coordinate method to take into account collective correlations that arise from the restoration of parity symmetry and configuration mixing. Experimental values of ground state binding energies and quadrupole deformations in considered nuclei have been reproduced with great accuracy, and by including collective correlations the empirical trend of octupole deformations in samarium isotopes has been reproduced as well. Calculated excitation energies of first negative-parity states and electric-octupole transition probabilities are in good agreement with both the experimental data and the results obtained within the collective Hamiltonian model.

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Opis teorijskog modela	4
2.1	Oktupolna pobuđenja u atomskim jezgrama	4
2.2	Teorija funkcionala gustoće	5
2.3	Relativistička teorija srednjega polja	8
2.4	Relativistički Hartree-Bogoliubovljev model	11
2.5	Metoda generirajućih koordinata	16
3	Provjera modela: atomska jezgra ^{20}Ne	21
4	Oktupolna pobuđenja u izotopima samarija i gadolinija	27
4.1	Račun osnovnog stanja	27
4.2	Projekcija na paritet	35
4.3	Miješanje konfiguracija	40
4.4	Oktupolna pobuđenja u izotopima gadolinija	46
5	Zaključak	51
	Dodaci	53
A	Model kolektivnog Hamiltonijana	53
B	Račun funkcija preklopa norme i Hamiltonijana	54

1 Uvod

Atomska jezgra kvantni je sustav mnoštva čestica čiji je oblik određen brojem nukleona koji je sačinjavaju i njihovim međudjelovanjem [1]. U najjednostavnijoj slici, sustav nukleona moguće je opisati kao sustav gotovo neovisnih čestica koje se gibaju u srednjem potencijalu stvorenom djelovanjem svih nukleona. Energije nukleona u takvom su potencijalu kvantizirane i oni popunjavaju dopuštene diskretne orbitale (ljuske), što je opisano takozvanim modelom ljusaka [2, 3]. Jezgre u kojima su protonske i neutronske ljuske u potpunosti popunjene jače su vezane od susjednih jezgara i sferičnog su oblika u svom osnovnom stanju. Pobuđivanjem postojećih ili dodavanjem novih nukleona, dugodosežne čestica-šupljina korelacije među valentnim nukleonima lome sferičnu simetriju i deformiraju jezgru. Najčešći oblik deformiranih jezgara odgovara aksijalno simetričnim oblicima s dobrim paritetom - izduženim elipsoidima¹ oblika cigare i spljoštenim elipsoidima² oblika palačinke [4]. Prvo opažanje niskoležećih stanja negativnog pariteta u spektrima izotopa radija i torija sredinom prošloga stoljeća [5] ukazalo je na mogućnost postojanja refleksijski asimetričnih oktopolno deformiranih jezgara oblika kruške. Danas je poznato da oktopolna deformacija jezgre može biti statična ili dinamična. Prvi je slučaj znatno rjeđi i opisuje situaciju kada sama valna funkcija jezgre lomi paritet, dok u drugome slučaju valna funkcija ima dobar paritet, no postoje značajne fluktuacije oktopolnog stupnja slobode. Mikroskopsko porijeklo oktopolnih deformacija povezuje se s postojanjem orbitala oko Fermijeve razine koje imaju suprotan paritet, dok im se vrijednosti angularnih momenata razlikuju za $3\hbar$ [6]. Zbog toga se one pojavljuju u jezgrama koje imaju svega nekoliko nukleona u otvorenim ljuskama, najčešće u području karte nuklida oko aktinida i elemenata rijetkih zemalja.

Opsežan pregled teorijskih i eksperimentalnih metoda korištenih pri istraživanju oktopolnih pobuđenja atomskih jezgara dan je u [6]. U posljednje je vrijeme obnovljen interes za teorijskim proučavanjem oktopolnog stupnja slobode u atomskim jezgrama, a posebno valja napomenuti novija istraživanja u područjima aktinida i elemenata rijetkih zemalja [7–10], kao i pokušaj sistematičnog opisa oktopolnih pobuđenja u parno-parnim jezgrama [11, 12]. S druge strane, u nedavnom je eksperimentalnom istraživanju, metodom pobuđivanja jezgre pomoću monokromatskih neutronskih snopova, otkrivena niskoležeća vrpca negativnog pariteta u jezgri ^{152}Sm [13]. Također, novi eksperimenti koji koriste metodu kulonskog pobuđenja pomoću radioaktivnih ionskih snopova ukazuju na postojanje izražene oktopolne deformacije u jezgrama ^{220}Rn i ^{224}Ra [14]. Jezgre s oktopolnim deformacijama nisu važne samo za teorijsko razumijevanje nuklearne strukture, nego bi mogle igrati bitnu ulogu i u potrazi za fizikom van standardnog modela. Naime, očekuje se da bi električni dipolni moment atoma s oktopolno deformiranim jezgrama mogao biti značajno povećan,

¹engl. *prolate*

²engl. *oblate*

što bi ukazivalo na novi izvor narušenja nabojno-paritetne (CP) simetrije koji nije predviđen standardnim modelom [15]. Stoga je od posebnog interesa razviti teorijski okvir za opis oktupolnih pobuđenja u atomskim jezgrama čija će predviđanja moći reproducirati nove eksperimentalne rezultate sa zadovoljavajućom preciznošću.

Formalizam relativističkih energijskih funkcionala gustoće (REDF) trenutno predstavlja najpotpuniji i najtočniji teorijski okvir za opis svojstava osnovnog stanja i kolektivnih pobuđenja atomskih jezgara duž cijele karte nuklida [16]. Budući da omogućuje izvrsnu globalnu preciznost uz korištenje umjerenih računalnih resursa, REDF formalizam zasad je jedini mikroskopski pristup nuklearnom problemu mnoštva čestica koji je uspješno primijenjen pri opisu evolucije oblika od relativno lakih do superteških jezgara, od doline β -stabilnosti sve do jezgara na granici stabilnosti [17, 18]. Temeljna praktična primjena REDF formalizma ostvaruje se u okviru samosuglasnog modela srednjeg polja. Aproksimacija srednjeg polja omogućuje predstavljanje dinamike nuklearnog problema mnoštva čestica pomoću neovisnih nukleona koji se gibaju u samosuglasnom potencijalu. Na taj je način problem mnoštva čestica sveden na problem jedne čestice, dok je egzaktan funkcional aproksimiran jednostavnim analitičkim funkcionalom. Velik broj funkcionala koji su trenutno u upotrebi jesu fenomenološki, odnosno njihovi se parametri prilagođavaju skupu dostupnih eksperimentalnih podataka o svojstvima beskonačne nuklearne tvari i nekolicine atomskih jezgara. Neki od relativističkih modela na kojima se grade ovi funkcionali opisuju jezgru kao sustav Diracovih nukleona koji međudjeluju izmjenom mezona i fotona kroz efektivni Lagrangian, npr. [19, 20], dok drugi efektivno nuklearno međudjelovanje opisuju odgovarajućim lokalnim kontaktnim međudjelovanjem nukleona, npr. [21, 22]. Međutim, modeli srednjeg polja ne uključuju korelacije sparivanja koje igraju bitnu ulogu pri kvantitativnom opisu jezgara s otvorenim ljuskama. Te je korelacije moguće uzeti u obzir u okviru relativističkog Hartree-Bogoliubovljevog (RHB) modela [23], koji predstavlja relativističko proširenje standardnog Hartree-Fock-Bogoliubovljevog (HFB) formalizma [24].

RHB model omogućuje jedinstven opis čestica-šupljina (ph -) i čestica-čestica (pp -) korelacija na razini srednjega polja. Uvođenjem koncepta Bogoliubovljevih kvazičestica moguće je osnovno stanje jezgre opisati Slaterovom determinantom koja predstavlja vakuum s obzirom na neovisne kvazičestice. RHB jednadžbe izvode se varijacijskim postupkom i uključuju potencijal srednjeg polja koji opisuje sve dugodosežne ph -korelacije te polje sparivanja u kojemu su sadržane kratkodosežne pp -korelacije. Razvojem nuklearnih spinora u bazi harmoničkog oscilatora i samosuglasnim rješavanjem RHB jednadžbi dobiju se kvazičestične valne funkcije i kvazičestične energije. Odgovarajućom transformacijom baze moguće je izračunati jednočestične energije i jednočestične valne funkcije. Međutim, ovakav pristup karakteriziran je lomljenjem simetrija na razini srednjeg polja pa može samo približno opisati svojstva osnovnog stanja atomske jezgre. Kako bi se izračunao spektar kolektivnih pobuđenja i snage elektromagnetskih prijelaza u pojedinim jezgrama, potrebno je uzeti u ob-

zir i kolektivne korelacije koje potječu od ponovnog uspostavljanja simetrija i fluktuacija kolektivnih koordinata oko minimuma srednjeg polja. Zadržimo li se pri proučavanju oktrupolnih pobuđenja u jezgrama koje imaju dobro definiran minimum u kvadrupolnoj koordinati, najveći doprinos korelacijskoj energiji dolaziti će od fluktuacija u oktrupolnoj koordinati i ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta. Te je dvije popravke moguće istovremeno uzeti u obzir u okviru metode generirajućih koordinata (GCM) [24, 25]. Radi se o kvantnomehaničkoj metodi koja, polazeći od jednočestičnih RHB valnih funkcija kao mikroskopskih ulaznih podataka, gradi približna svojstvena stanja Hamiltonijana cijele jezgre. Ta su svojstvena stanja predstavljena linearnim kombinacijama različitih valnih funkcija, od kojih svaka ulazi u ukupnu valnu funkciju s odgovarajućom težinskom funkcijom. Poznavanje težinskih funkcija omogućuje izravan račun svih fizikalnih opservabli, poput spektroskopskih oktrupolnih momenata i snaga oktrupolnih prijelaza, koje je onda moguće usporediti s eksperimentalnim vrijednostima.

U ovome će radu opisani teorijski okvir biti primijenjen pri opisu oktrupolnih pobuđenja u parnim izotopima atomskih jezgara samarija ($Z = 62$) i gadolinija ($Z = 64$). Ove smo izotope odabrali zbog činjenice da su za ovo područje karte nuklida dostupni pouzdani eksperimentalni dokazi postojanja oktrupolnih deformacija [13, 26, 27]. Osim toga, ono je posebno zanimljivo sa stajališta nuklearne strukture zbog pojave simultanih prijelaza kvadrupolnih i oktrupolnih oblika u osnovnom stanju tih jezgara. Međuigra ovih dvaju utjecaja mogla bi dovesti do pojave koegzistencije oblika, koja je dosad eksperimentalno zabilježena u izotopima ^{148}Sm [26], ^{150}Sm [27] i ^{152}Sm [13]. S teorijske strane, uloga oktrupolnog stupnja slobode u izotopima samarija u okviru relativističke teorije srednjega polja proučena je u [7]. Također, za ove jezgre trenutno nije do kraja razjašnjena uloga kvadrupolno-oktrupolnog vezanja, odnosno nije poznato mogu li se i u kojoj mjeri kvadrupolni i oktrupolni stupanj slobode smatrati neovisnima jedan o drugome. Na razjašnjavanju ovoga pitanja intenzivno se radi, a u relativno nedavnom istraživanju, temeljenom na dvama nerelativističkim funkcionalima nadopunjenim metodom generirajućih koordinata, pojava kvadrupolno-oktrupolnog vezanja uključena je u mikroskopski opis strukture izotopnih lanaca jezgara samarija i gadolinija [9].

Rad je organiziran na sljedeći način. U poglavlju 2 ukratko je opisana teorijska pozadina oktrupolnih pobuđenja u atomskim jezgrama, kao i osnovni elementi teorije funkcionala gustoće. U nastavku je opisana relativistička teorija srednjega polja, a potom su uvedeni relativistički Hartree-Bogoliubovljev model i metoda generirajućih koordinata. Kao polazišna točka računa, numerička konzistentnost kôda testirana je na primjeru lake atomske jezgre ^{20}Ne u poglavlju 3. Poglavlje 4 donosi sistematičan opis oktrupolnih pobuđenja u izotopima samarija, kao i odabrane rezultate za izotope gadolinija. U posljednjem su poglavlju dani zaključak i plan daljnjeg istraživanja.

2 Opis teorijskog modela

2.1 Oktupolna pobuđenja u atomskim jezgrama

Odstupanje površine deformirane jezgre od sferičnog oblika moguće je opisati razvojem po kuglinim funkcijama $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$ [6]:

$$R(\theta, \phi) = c(\alpha)R_0 \left[1 + \sum_{\lambda=2}^{\lambda_{\max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi) \right], \quad (2.1)$$

gdje je R_0 radijus sferične jezgre, parametri deformacije $\alpha_{\lambda\mu}$ odgovaraju dužinama radijvektora koji su usmjereni od središta jezgre prema njezinoj površini u različitim smjerovima, a faktor normalizacije $c(\alpha)$ određuje se iz uvjeta očuvanja volumena jezgre pri deformaciji. Iz zahtjeva da polumjer jezgre bude realan broj slijedi veza između parametara deformacije:

$$(\alpha_{\lambda\mu})^* = (-1)^\mu \alpha_{\lambda-\mu}. \quad (2.2)$$

Tri parametra dipolne deformacije, $\alpha_{1\pm 1}$ i α_{10} , nisu uključena u jednadžbu (2.1) jer su određena ograničenjem koje smješta centar mase u ishodište koordinatnog sustava jezgre. Općenito, broj parametara deformacije koji se pojavljuju u razvoju (2.1) raste s λ . Primjerice, pri općenitom opisu kvadrupolno-oktupolno deformirane jezgre potrebno je uzeti u obzir dva parametra kvadrupolne deformacije i sedam neovisnih parametara oktupolne deformacije. Jedna takva parametrizacija predložena je u [28]. Međutim, za aksijalno simetrične jezgre svi parametri deformacije sa $\mu \neq 0$ iščezavaju, a preostali parametri $\alpha_{\lambda 0}$ obično se označavaju sa β_λ . Tako će parametar β_2 opisivati aksijalno simetričnu kvadrupolnu, a parametar β_3 oktupolnu deformaciju.

Pojava oktupolnih deformacija u atomskoj jezgri povezana je s odgovarajućim jednočestičnim spektrom. Naime, do oktupolne deformacije dolazi kad neka orbitala $(n+1, l+3, j+3)$ međudjeluje (preko čestica-šupljina pobuđenja) s orbitalom suprotnog pariteta (n, l, j) , gdje razlika angularnih momenata dviju orbitala $3\hbar$ odgovara operatoru oktupolnog prijelaza. Općenito, nukleonski brojevi 34 ($g_{9/2} \leftrightarrow p_{3/2}$ vezanje), 56 ($h_{11/2} \leftrightarrow d_{5/2}$ vezanje), 88 ($i_{13/2} \leftrightarrow f_{7/2}$ vezanje) i 134 ($j_{15/2} \leftrightarrow g_{9/2}$ vezanje) podržavaju pojavu oktupolne deformacije. Ona se najčešće pojavljuje u područjima karte nuklida gdje je oktupolno međudjelovanje jednočestičnih orbitala izraženo i za protone i za neutrone. Primjerice, u području oko jezgre ^{224}Ra Fermijeva razina za protone nalazi se u blizini orbitale $f_{7/2}$ koja je snažno vezana oktupolnim međudjelovanjem s obližnjom praznom orbitalom $i_{13/2}$. Također, Fermijeva razina za neutrone nalazi se u blizini orbitale $g_{9/2}$ koja je snažno vezana oktupolnim međudjelovanjem s obližnjom orbitalom $j_{15/2}$. Budući da u ovom slučaju i protonski i neutronske jednočestični spektar podržava oktupolnu deformaciju, za očekivati je da jezgra ^{224}Ra bude oktupolno deformirana, što je nedavno i eksperimentalno

potvrđeno [14].

Naravno, deformacija atomske jezgre ima izravan utjecaj na izgled odgovarajućeg kolektivnog spektra. Jedno od glavnih obilježja oktrupolno deformiranih jezgara jest pojava naizmjeničnih stanja pozitivnog i negativnog pariteta, kao i pojava 1^- i 3^- stanja u kolektivnom niskoležećem spektru. Ta su stanja povezana s osnovnim stanjem 0^+ preko električnog dipolnog prijelaza $E1$ i električnog oktrupolnog prijelaza $E3$. Snaga $E1$ prijelaza može biti povećana zbog pojave električnog dipolnog momenta jezgre, koji predstavlja mjeru pomaka između centra mase i centra naboja jezgre. Međutim, apsolutne vrijednosti snaga prijelaza $B(E1, 1^- \rightarrow 0^+)$ obično su i dalje vrlo male ($< 10^{-2}$ W.u.) [29]. S druge strane, snaga oktrupolnog prijelaza $B(E3, 3^- \rightarrow 0^+)$ u pravilu je vrlo velika (> 10 W.u.) i predstavlja dokaz postojanja oktrupolne deformacije u jezgri. Snagu oktrupolnog prijelaza aksijalno simetrične jezgre moguće je izračunati koristeći rotacijsku formulu:

$$B(E3, 3^- \rightarrow 0^+)_{\text{ROT}} = \frac{1}{4\pi} |\langle \psi_-(\beta_3) | \hat{Q}_{30}^e | \psi_+(\beta_3) \rangle|^2, \quad (2.3)$$

gdje je \hat{Q}_{30}^e operator električnog oktrupolnog prijelaza za aksijalno simetričnu jezgru, a $|\psi_{\pm}(\beta_3)\rangle$ projekcije intrinzične valne funkcije jezgre na pozitivan, odnosno negativan paritet. Međutim, rotacijsku formulu nije moguće koristiti u slučaju kad intrinzična valna funkcija jezgre postane gotovo sferična ili sferična, odnosno kad jezgra nema stabilnu kvadrupolnu deformaciju. Pokazuje se da za $\beta_2 > 0.15$ rotacijska formula relativno dobro reproducira eksperimentalne rezultate, dok se za $\beta_2 \rightarrow 0$ dobivena snaga oktrupolnog prijelaza razlikuje od eksperimentalne vrijednosti i do 7 puta [30].

2.2 Teorija funkcionala gustoće

Valna funkcija Ψ kvantnog sustava mnoštva čestica odgovara rješenju nerelativističke Schrödingerove jednadžbe:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_i V(r_i) + \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) \right] \Psi = E\Psi, \quad (2.4)$$

gdje prvi član s lijeve strane predstavlja ukupnu kinetičku energiju svih čestica, drugi vanjski potencijal koji djeluje na čestice, a treći dvočestično međudjelovanje. Iako je jednadžba (2.4), u načelu, rješiva za proizvoljan broj čestica N , u praksi je njeno rješavanje moguće samo za sustave s relativno malim brojem čestica. Teorija funkcionala gustoće (DFT)³ [31] predstavlja alternativan pristup rješavanju kvantnog problema mnoštva čestica. Temeljna pretpostavka ove teorije sadržana je u Hohenberg-Kohnovom teoremu [32], prema kojemu su sva svojstva osnovnog stanja vezanog sustava mnoštva čestica u potpunosti određena gustoćom osnovnog stanja. Budući da je u tom slučaju gustoća $\rho(\mathbf{r})$ funkcija samo tri prostorne koordinate, umjesto $3N$

³density functionals theory

koordinata višečestične valne funkcije, DFT je računski izvediv čak i za veće sustave.

Polazišna točka DFT računa jest Hohenberg-Kohnov varijacijski princip, prema kojemu postoji jedinstveni energijski funkcional gustoće:

$$E[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] = \int d^3\mathbf{r} v(\mathbf{r})\tilde{\rho}(\mathbf{r}) + F[\tilde{\rho}(\mathbf{r})], \quad (2.5)$$

za koji varijacijska Euler-Lagrangeova jednadžba daje egzaktnu gustoću osnovnog stanja $\rho(\mathbf{r})$. Pri tome je $v(\mathbf{r})$ vanjski potencijal, a $F[\tilde{\rho}(\mathbf{r})]$ univerzalni funkcional gustoće koji sadrži doprinose kinetičke energije i energije međudjelovanja čestica. Energijski je funkcional univerzalan jer, uz zadano čestično međudjelovanje, ima isti oblik za sve sustave. Promotrimo prvo sustav mnoštva neovisnih čestica. Energijski je funkcional gustoće u tom slučaju dan sa:

$$E[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] = \int d^3\mathbf{r} v(\mathbf{r})\tilde{\rho}(\mathbf{r}) + T[\tilde{\rho}(\mathbf{r})], \quad (2.6)$$

gdje je $T[\tilde{\rho}(\mathbf{r})]$ univerzalni funkcional gustoće kinetičke energije sustava neovisnih čestica. Odgovarajuća varijacijska jednadžba glasi:

$$\delta E[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] = \int \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \left[v(\mathbf{r}) + \frac{\delta}{\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})} T[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] - \epsilon \right] d^3\mathbf{r} = 0, \quad (2.7)$$

gdje je ϵ Lagrangeov multiplikator koji je uveden da bi se osiguralo očuvanje broja čestica. Budući da se radi o sustavu neovisnih čestica, gustoću osnovnog stanja moguće je jednostavno izračunati iz relacije:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N |\varphi_j(\mathbf{r})|^2, \quad (2.8)$$

pri čemu su svojstvene funkcije φ_j i svojstvene energije ϵ_j rješenja jednočestičnih jednadžbi:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + v(\mathbf{r}) \right] \varphi_j(\mathbf{r}) = \epsilon_j \varphi_j(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

S druge strane, energijski funkcional gustoće sustava s međudjelovanjem moguće je napisati kao:

$$E[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] = T[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] + E_H[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] + E_{xc}[\tilde{\rho}(\mathbf{r})], \quad (2.10)$$

gdje je funkcional $T[\tilde{\rho}(\mathbf{r})]$ predstavlja kinetičku energiju sustava neovisnih čestica, $E_H[\tilde{\rho}(\mathbf{r})]$ Hartreejevu energiju, a $E_{xc}[\tilde{\rho}(\mathbf{r})]$ energiju izmjene i korelacije koja sadrži sva dvočestična i višečestična međudjelovanja. Varijacijska jednadžba u ovom slučaju glasi:

$$\delta E[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] = \int \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \left[v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) + \frac{\delta}{\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})} T[\tilde{\rho}(\mathbf{r})] - \epsilon \right] d^3\mathbf{r} = 0. \quad (2.11)$$

Po Hohenberg-Kohnovom teoremu, efektivni je potencijal $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ jedinstven i jednak:

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = v_{\text{H}}(\mathbf{r}) + v_{\text{xc}}(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

dok je lokalni potencijal izmjene i korelacije $v_{\text{xc}}(\mathbf{r})$ definiran kao:

$$v_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\tilde{\rho}(\mathbf{r})]}{\delta \tilde{\rho}}. \quad (2.13)$$

Usporedbom jednadžbi (2.7) i (2.11) vidimo da se sustav čestica s međudjelovanjem koje se nalaze u vanjskom potencijalu $v(\mathbf{r})$ zapravo ponaša kao sustav neovisnih čestica koje se nalaze u efektivnom vanjskom potencijalu $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$. Prema tome, egzaktna gustoća osnovnog stanja sustava s međudjelovanjem dana je sa:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(\mathbf{r})|^2, \quad (2.14)$$

gdje su $\phi_j(\mathbf{r})$ jednočestične valne funkcije koje odgovaraju rješenjima jednočestičnih Kohn-Shamovih jednadžbi:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \phi_j(\mathbf{r}) = \epsilon_j \phi_j(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

Budući da efektivni potencijal ovisi o gustoći osnovnog stanja, jednadžbe (2.12), (2.14) i (2.15) rješavaju se samosuglasno. Opisani postupak zove se Kohn-Shamova shema teorije funkcionala gustoće, a moguće ga je izravno proširiti i na relativističke modele [33]. U analogiji s nerelativističkim slučajem, relativistička Kohn-Shamova jednadžba predstavljena je jednočestičnom Diracovom jednadžbom s lokalnim četveropotencijalom koji ovisi o četverostruji osnovnog stanja.

Budući da uključuje dodatne korelacije, Kohn-Shamova shema nadilazi standardnu Hartree-Fockovu aproksimaciju. Međutim, praktična primjenjivost ovakvog pristupa bitno ovisi o mogućnosti da se formulira dovoljno točna aproksimacija člana funkcionala E_{xc} koji opisuje izmjene i korelacije. Jedan je mogući pristup izgradnja ovoga člana iz osnovnih načela, korištenjem poznatih egzaktnih ograničenja. No, čak i kad bi se formulirao funkcional s potpuno mikroskopskim temeljima, njegovi bi se parametri i dalje u određenoj mjeri morali prilagođavati eksperimentalnim podacima jer nukleon-nukleon raspršenja i svojstva nuklearne tvari jednostavno ne mogu odrediti funkcional do preciznosti potrebne za opis srednjeteških i teških jezgara. Drugi je pristup fenomenološki i podrazumijeva optimizaciju parametara *ansatza* prilagođavanjem ograničenom skupu dostupnih eksperimentalnih podataka. Na ovaj su način formulirani neki od najuspješnijih modernih funkcionala. Oni svoju temeljnu praktičnu primjenu ostvaruju u okviru relativističke teorije srednjeg polja.

2.3 Relativistička teorija srednjega polja

Većina relativističkih modela opisuje atomsku jezgru kao sustav Diracovih nukleona koji međudjeluju izmjenom mezona i fotona kroz efektivni Lagrangian. Broj efektivnih mezona, njihovi kvantni brojevi, mase, kao i konstante vezanja na nukleone određeni su zahtjevom da se što bolje reproduciraju dostupni eksperimentalni podaci. Pokazuje se da izoskalarni-skalarni σ mezon, izoskalarni-vektorski ω mezon i izovektorski-vektorski ρ mezon, zajedno s elektromagnetskim poljem, čine minimalan skup mezona potreban za opis svojstava jezgre. Pri tome aproksimacija srednjega polja podrazumijeva zamjenu mezonskih operatora odgovarajućim očekivanim vrijednostima u osnovnom stanju jezgre. Dodatne je korelacije moguće uključiti u model dodavanjem nelinearnih mezonskih članova ili uključivanjem ovisnosti jakosti mezonsko-nukleonskog vezanja o gustoći raspodjele nukleona. Također, valja napomenuti kako relativistički modeli pokazuju brojne prednosti u usporedbi s nerelativističkim modelima. Najvažnija od njih jest prirodno uključivanje spinskih stupnjeva slobode, kao i odgovarajućeg spin-orbit člana. Detaljan opis relativističke teorije srednjega polja dan je u [34], a pregled trenutnog stanja i najnovijih postignuća u okviru REDF formalizma dan je u [16].

Na skali energija i impulsa koja odgovara niskoležećim pobuđenim stanjima atomske jezgre, izmjena mezona samo je prikladna reprezentacija efektivnog nuklearnog međudjelovanja. Izmjena teških mezona povezana je s dinamikom na malim udaljenostima koja nije razlučiva na niskim energijama pa se može zamijeniti odgovarajućim lokalnim kontaktnim međudjelovanjem nukleona. To je polazišna točka izgradnje klase relativističkih kontaktnih funkcionala gustoće, kojoj pripada i DD-PC1⁴ funkcional [21] koji će biti korišten u ovome radu. Osnovni su elementi funkcionala bilinearne kombinacije gustoća i struja:

$$\bar{\psi}\mathcal{O}_\tau\Gamma\psi, \quad \mathcal{O}_\tau \in \{1, \tau_i\}, \quad \Gamma \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5\gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}, \quad (2.16)$$

pri čemu je ψ Diracov spinor koji opisuje nukleon mase m , τ_i su Paulijeve izospinske matrice, a Γ općenito označava Diracove matrice. Kao što je već rečeno, gustoća i energija osnovnog stanja atomske jezgre određene su samosuglasnim rješenjima jednočestičnih Kohn-Shamovih jednadžbi. Da bismo ih izveli, potrebno je izgraditi efektivni Lagrangian s kontaktnim članovima u svakom izospinsko-prostornom kanalu međudjelovanja:

- (i) izoskalar-skalar: $(\bar{\psi}\psi)^2$,
- (ii) izoskalar-vektor: $(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)$,
- (iii) izovektor-skalar: $(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi)$,
- (iv) izovektor-vektor: $(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)$.

⁴engl. *density-dependent point-coupling*

Vektori u izospinskom prostoru označeni su strelicama, a vektori u koordinatnom prostoru bit će označavani masnim slovima. Općeniti bi se Lagrangian mogao napisati kao red potencija struja $\bar{\psi}\mathcal{O}_\tau\Gamma\psi$ i njihovih derivacija, gdje bi članovi višega reda predstavljali višečestične korelacije. Međutim, korištenjem dostupnih eksperimentalnih podataka moguće je ograničiti relativno malen broj parametara u takvome razvoju. Zbog toga u Lagrangian ovoga funkcionala ulaze samo članovi drugoga reda međudjelovanja, a sve višečestične korelacije ugrađene su u konstante vezanja koje ovise o gustoći raspodjele nukleona. U potpunoj analogiji sa slikom izmjene mezona, efektivni Lagrangian uključuje izoskalarni-skalarni (S), izoskalarni-vektorski (V) i izovektorski-vektorski (TV) kanal međudjelovanja:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = & \bar{\psi}(i\gamma \cdot \partial - m)\psi \\ & - \frac{1}{2}\alpha_S(\hat{\rho})(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V(\hat{\rho})(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TV}(\hat{\rho})(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \\ & - \frac{1}{2}\delta_S(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) - e\bar{\psi}\gamma \cdot A\frac{(1-\tau_3)}{2}\psi.\end{aligned}\tag{2.17}$$

Osim člana koji odgovara slobodnoj čestici i članova s kontaktnim međudjelovanjem, efektivni Lagrangian uključuje i vezanje protona na elektromagnetsko polje. Član s derivacijom u jednadžbi (2.17) uzima u obzir efekte međudjelovanja kratkog doseg koji su nužni za kvantitativan opis gustoće raspodjele nukleona u atomskoj jezgri, a posebno na njezinoj površini. Slični bi se članovi mogli uključiti u svakom izospinsko-prostornom kanalu međudjelovanja, no u praksi podaci ograničavaju samo jedan član s derivacijama. Uključenje člana s derivacijama samo u izoskalarno-skalarnom kanalu konzistentno je sa standardnim modelima izmjene mezona, gdje se masa σ mezona prilagođava eksperimentalnim podacima dok se mase ω i ρ mezona drže fiksima. Također, izovektorski-skalarni kanal izostavlja se iz funkcionala gustoće kako bi se smanjio broj parametara.

Konstante vezanja $\alpha_S(\hat{\rho})$, $\alpha_V(\hat{\rho})$ i $\alpha_{TV}(\hat{\rho})$ funkcije su nukleonske četverostruje:

$$j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi = \hat{\rho}u^\mu,\tag{2.18}$$

gdje je u^μ četverobrziina definirana kao $(1 - \mathbf{v}^2)^{-1/2}(1, \mathbf{v})$. U sustavu mirovanja jezgre vrijedi $\mathbf{v} = 0$. Jednočestična Diracova jednadžba dobije se varijacijom Lagrangiana po $\bar{\psi}$ i glasi:

$$[\gamma_\mu(i\partial^\mu - \Sigma^\mu - \Sigma_R^\mu - \tau_3\Sigma_{TV}^\mu) - (m + \Sigma_S)]\psi = 0,\tag{2.19}$$

uz

$$\Sigma_S = \alpha_S(\rho_v)\rho_s - \delta_S\Box\rho_s,\tag{2.20}$$

$$\Sigma^\mu = \alpha_V(\rho_v)j^\mu + e\frac{(1-\tau_3)}{2}A^\mu,\tag{2.21}$$

$$\Sigma_{\text{TV}}^\mu = \alpha_{\text{TV}}(\rho_v)\vec{j}^\mu, \quad (2.22)$$

$$\Sigma_{\text{R}}^\mu = \frac{1}{2} \frac{j^\mu}{\rho_v} \left\{ \frac{\partial \alpha_{\text{S}}}{\partial \rho} \rho_s^2 + \frac{\partial \alpha_{\text{V}}}{\partial \rho} j_\mu j^\mu + \frac{\partial \alpha_{\text{TV}}}{\partial \rho} \vec{j}_\mu \vec{j}^\mu \right\}, \quad (2.23)$$

gdje su Σ_{S} , Σ^μ i Σ_{TV}^μ redom izoskalarna-skalarna, izoskalarna-vektorska i izovektorska-vektorska vlastita energija nukleona, a Σ_{R}^μ doprinos koji nastaje varijacijom konstanti vezanja po gustoći. Pri tome su izoskalarna četverostruja j_μ , izovektorska četverostruja \vec{j}_μ i skalarna gustoća ρ_s predstavljene očekivanim vrijednostima odgovarajućih operatora u osnovnom stanju atomske jezgre $|\phi_0\rangle$:

$$j_\mu = \langle \phi_0 | \bar{\psi} \gamma_\mu \psi | \phi_0 \rangle = \sum_k v_k^2 \bar{\psi}_k \gamma_\mu \psi_k, \quad (2.24)$$

$$\vec{j}_\mu = \langle \phi_0 | \bar{\psi} \gamma_\mu \vec{\tau} \psi | \phi_0 \rangle = \sum_k v_k^2 \bar{\psi}_k \gamma_\mu \vec{\tau} \psi_k, \quad (2.25)$$

$$\rho_s = \langle \phi_0 | \bar{\psi} \psi | \phi_0 \rangle = \sum_k v_k^2 \bar{\psi}_k \psi_k. \quad (2.26)$$

Nukleonska gustoća ρ_v jest nulta komponenta Lorentzove četverostruje j_μ i ne treba je miješati sa skalarnom gustoćom ρ_s iz (2.26). Gornje se jednadžbe sumiraju po svim jednočestičnim stanjima pozitivne energije s odgovarajućim faktorima zaposjednuća v_k^2 . To je takozvana aproksimacija bez Diracovog mora⁵ u kojoj se pri računu gustoća i četverostruja izostavljaju eksplicitni doprinosi stanja negativnih energija. Premda se može činiti da su neki efekti međudjelovanja na ovaj način zanemareni, oni se zapravo uzimaju u obzir fenomenološki, prilagodbom parametara funkcionala na eksperimentalne podatke. Osnovno stanje atomske jezgre $|\phi_0\rangle$ odgovara samosuglasnom rješenju sustava jednadžbi (2.19)- (2.26). U praksi se najčešće pretpostavi početni oblik potencijala, koji se onda iskoristi kako bi se iz jednadžbe (2.19) izračunale početne jednočestične valne funkcije. Potom se iz jednadžbi (2.24)-(2.26) izračunaju novi izvori za potencijale u jednadžbama (2.20)-(2.23), koji se zatim ponovno uvrštavaju u jednadžbu (2.19) kako bi se dobile nove jednočestične valne funkcije. Opisani se postupak ponavlja sve dok račun ne konvergira. Iz dobivenih je rezultata moguće izračunati različite fizikalne opservable, poput ukupne energije sustava,

$$E = \int \mathcal{H} \text{d}\mathbf{r}, \quad (2.27)$$

gdje gustoća Hamiltonijana \mathcal{H} odgovara (0, 0) komponenti tenzora impulsa i energije:

$$\mathcal{H} = T^{00} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_j} \dot{\psi}_j - \mathcal{L}. \quad (2.28)$$

⁵engl. *no sea approximation*

Jakost i ovisnost o gustoći pojedinih konstanti vezanja parametrizirane su *ansatzima*:

$$\alpha_S(\rho) = a_S + (b_S + c_S x)e^{-d_S x}, \quad (2.29)$$

$$\alpha_V(\rho) = a_V + b_V e^{-d_V x}, \quad (2.30)$$

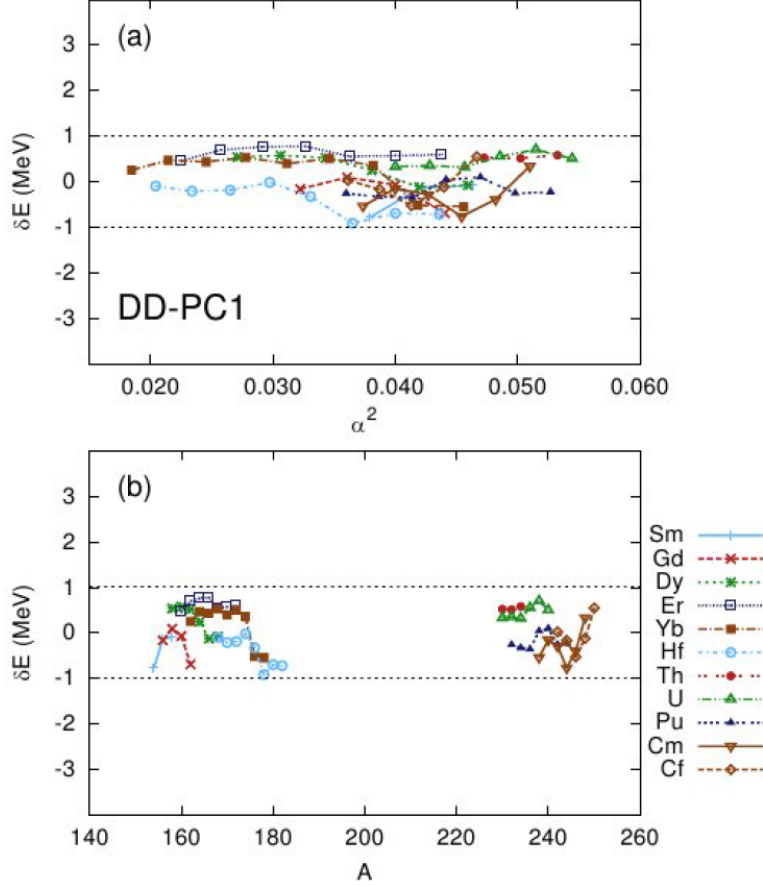
$$\alpha_{TV}(\rho) = b_{TV} e^{-d_{TV} x}, \quad (2.31)$$

gdje je $x = \rho/\rho_{\text{sat}}$. Ovdje ρ_{sat} označava nukleonsku gustoću u području saturacije za simetričnu nuklearnu tvar i za nju je uzeto $\rho_{\text{sat}} = 0.152 \text{ fm}^{-1}$. Zajedno s parametrom jakosti člana s derivacijom δ_S iz jednadžbe (2.17), gornjih 9 parametara u potpunosti određuje funkcional nazvan DD-PC1. Detalji određivanja vrijednosti ovih parametara prilagodbom na dostupne eksperimentalne podatke mogu se naći u [21]. Valja napomenuti da su, za razliku od dotadašnjih funkcionala čiji su parametri u konačnici podešavani na sferične jezgre, u slučaju DD-PC1 funkcionala parametri po prvi put podešeni na energije vezanja aksijalno deformiranih jezgara.

Na slici 2.1 prikazana su apsolutna odstupanja energija vezanja dobivenih računom s DD-PC1 funkcionalom od eksperimentalnih vrijednosti za 64 aksijalno deformirane jezgre, u ovisnosti o koeficijentu izospinske asimetrije $\alpha^2 = \frac{(N-Z)^2}{A^2}$ i masenom broju A u rasponima $A \approx 150-180$ i $A \approx 230-250$. Odstupanja se za sve jezgre nalaze unutar $\pm 1 \text{ MeV}$, što je jako dobra preciznost jer su energije vezanja u tim područjima karte nuklida reda veličine 1500 MeV . Također, odstupanja ne pokazuju nikakvu vidljivu ovisnost o izotopnom lancu ili masenom broju. U posljednje je vrijeme DD-PC1 funkcional uspješno primijenjen kao efektivno međudjelovanje na razini srednjeg polja pri opisu različitih pojava u različitim područjima karte nuklida, poput pojave tri-aksijalnosti u izotopnom lancu jezgara germanija [35] i dvokvazičestičnih pobuđenja u aksijalno deformiranim transaktinidima [36]. Budući da se izotopi samarija i gadolinija nalaze u području karte nuklida koje je korišteno pri određivanju parametara DD-PC1 funkcionala, očekujemo da se rezultati dobiveni na razini srednjega polja u ovom slučaju vrlo dobro slažu s dostupnim eksperimentalnim podacima.

2.4 Relativistički Hartree-Bogoliubovljev model

Modeli srednjeg polja ne uključuju korelacije sparivanja koje igraju važnu ulogu pri kvantitativnom opisu jezgara s otvorenim ljuskama. Korelacije sparivanja moguće je uzeti u obzir fenomenološki, u jednostavnoj Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) aproksimaciji, ili u okviru Hartree-Fock-Bogoliubovljevog modela. HFB model predstavlja generalizaciju BCS aproksimacije te istovremeno uključuje opis dugodosežnih čestica-šupljina (ph -) korelacija na razini srednjeg polja i kratkodosežnih čestica-čestica (pp -) korelacija sparivanja, kao i njihovu međuovisnost [24]. Polazišna točka HFB računa jest uvođenje pojma Bogoliubovljevih kvazičestica, koje dijelom nalikuju na čestice, a dijelom na šupljine. Na taj je način moguće osnovno stanje jezgre



Slika 2.1: Apsolutna odstupanja energija vezanja dobivenih računom s DD-PC1 funkcionalom od eksperimentalnih vrijednosti za 64 aksijalno deformirane jezgre, u ovisnosti o koeficijentu izospinske asimetrije α (a) i masenom broju A (b). Linijama su povezani izotopni lanci naznačeni u legendi. Preuzeto iz [21].

opisati Slaterovom determinantom koja predstavlja vakuum s obzirom na neovisne kvazičestice. Veza između Bogoliubovljevih kvazičestica i fizikalnih čestica dana je linearnom transformacijom iz čestičnih operatera c_l^\dagger, c_l u kvazičestične operatore β_k^\dagger, β_k :

$$\beta_k^\dagger = \sum_l \left(U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l \right), \quad (2.32)$$

gdje se sumira po cijelom konfiguracijskom prostoru, a U_{lk} i V_{lk} predstavljaju vektore kvazičestičnih stanja. Operator β_k dobije se hermitskom konjugacijom jednadžbe (2.32) te se generalizirana Bogoliubovljeva transformacija u matičnom obliku može napisati kao:

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Matrica \mathcal{W} :

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

uvijek je unitarna jer operatori β_k i β_k^\dagger trebaju zadovoljavati standardne fermionske komutacijske relacije. Osnovno stanje atomske jezgre $|\Phi\rangle$ predstavljeno je vakuumom s obzirom na Bogoliubovljeve kvazičestice:

$$\beta_k |\Phi\rangle = 0, \quad (2.35)$$

za svaki k u konfiguracijskom prostoru. Valne funkcije koje zadovoljavaju ovaj uvjet za odgovarajući set kvazičestičnih operatora (2.32) nazivaju se HFB valnim funkcijama. Međutim, HFB valne funkcije ne određuju na jedinstven način koeficijente U_{lk} i V_{lk} pa je korisno uvesti jednoznačne veličine, matricu gustoće ρ i tenzor sparivanja κ :

$$\rho_{ll'} = \langle \Phi | c_l^\dagger c_{l'} | \Phi \rangle, \quad \kappa_{ll'} = \langle \Phi | c_{l'} c_l | \Phi \rangle, \quad (2.36)$$

koji u matričnom zapisu imaju oblik:

$$\rho = V^* V^T, \quad \kappa = V^* U^T = -U V^\dagger. \quad (2.37)$$

Energijski funkcional gustoće $\mathcal{E}[\rho, \kappa, \kappa^*]$, koji odgovara očekivanoj vrijednosti nuklearnog Hamiltonijana u osnovnom stanju atomske jezgre, može se izraziti kao funkcional hermitske matrice gustoće ρ i antisimetričnog tenzora sparivanja κ . Varijacija energijskog funkcionala s obzirom na ρ , κ i κ^* vodi na jednokvazičestične Hartree-Fock-Bogoliubovljeve jednadžbe:

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

gdje su Hartree-Fockov Hamiltonijan h i polje sparivanja Δ :

$$h_{ij}[\rho, \kappa, \kappa^*] = \frac{\partial \mathcal{E}[\rho, \kappa, \kappa^*]}{\partial \rho_{ji}}, \quad \Delta_{ij}[\rho, \kappa] = \frac{\partial \mathcal{E}[\rho, \kappa, \kappa^*]}{\partial \kappa_{ij}^*}. \quad (2.39)$$

Valja napomenuti da kvazičestični vakuum (2.35) nije svojstveno stanje operatora broja čestica pa je ovakav pristup karakteriziran nesačuvanjem broja čestica. Zbog toga jednadžba (2.38) sadrži kemijski potencijal λ , koji se određuje iz dodatnog uvjeta da vrijednost operatora broja čestica u osnovnom stanju odgovara stvarnom broju nukleona u jezgri. Svojstvena rješenja jednadžbe (2.38) sačinjavaju ortonormirani skup jednokvazičestičnih stanja, a pripadajuće svojstvene vrijednosti odgovaraju jednokvazičestičnim energijama. Dobivena je kvazičestična rješenja moguće preslikati u kanonsku bazu jednočestičnih stanja koristeći odgovarajuću transformaciju. Pri tome je kanonska baza definirana kao baza u kojoj je matrica $R_{kk'} =$

$\langle V_k(\mathbf{r}) | V_{k'}(\mathbf{r}) \rangle$ dijagonalna. Relativističko proširenje HFB formalizma, relativistički Hartree-Bogoliubovljev model (RHB), uveden je u [37]. RHB jednadžbe glase:

$$\begin{pmatrix} h_D - m - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h_D + m + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

gdje je h_D jednočestični Diracov Hamiltonijan iz jednadžbe (2.19), m je masa nukleona, λ kemijski potencijal, a Δ polje sparivanja. Iako RHB formalizam omogućuje ujedinjen opis ph - i pp -korelacija, načelno ne postoji razlog da se isto efektivno međudjelovanje koristi u oba kanala. U ovom je radu u ph -kanalu korišten relativistički kontaktni funkcional gustoće DD-PC1 [21], dok je u pp -kanalu odabrana sila konačnog dosegaja koja je separabilna u impulsnom prostoru. Ova je sila u potpunosti određena dvama parametrima koji se odabiru na način da se reproducira zvonolika krivulja procjepa sparivanja Gognyjeve sile u simetričnoj nuklearnoj tvari, što je opisano npr. u [38].

Jednadžbe (2.40) najlakše je riješiti u cilindričnom koordinatnom sustavu, razvojem nuklearnih spinora $U_k(\mathbf{r})$ i $V_k(\mathbf{r})$ u bazi deformiranog aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora [39]. Pri tome se pretpostavlja invarijantnost na vremenski obrat, zbog čega prostorne komponente svih četverostruja iščezavaju u osnovnom stanju atomske jezgre. Međutim, u ovakvome je računu spontano slomljena rotacijska simetrija i ukupan angularni moment j više nije dobar kvantni broj. S druge strane, gustoće i dalje ostaju invarijantne s obzirom na rotaciju oko osi simetrije, za koju odabiremo z -os. Veza između cilindričnih (r_\perp, φ, z) i Kartezijevih koordinata (x, y, z) dana je relacijama:

$$x = r_\perp \cos \varphi, \quad y = r_\perp \sin \varphi \quad \text{i} \quad z. \quad (2.41)$$

Jednočestični Diracovi spinori $U(\mathbf{r})$ i $V(\mathbf{r})$ određeni su trima kvantnim brojevima: svojstvenom vrijednošću projekcije ukupnog angularnog momenta na os simetrije (Ω), paritetom (π) i izospinom (t), a definirani su kao:

$$U(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_U^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ f_U^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \\ ig_U^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ ig_U^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \end{pmatrix} \chi_t(t), \quad (2.42)$$

i

$$V(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_V^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ f_V^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \\ ig_V^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ ig_V^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \end{pmatrix} \chi_t(t). \quad (2.43)$$

Svakom rješenju s pozitivnom vrijednošću Ω :

$$\psi_i \equiv \{f_i^+, f_i^-, g_i^+, g_i^-; \Omega_i\}, \quad i = U, V, \quad (2.44)$$

pridruženo je degenerirano stanje dobiveno djelovanjem operatora vremenskog obrata T :

$$\psi_i = T\psi_i = \{-f_i^+, f_i^-, -g_i^+, g_i^-; -\Omega_i\}, \quad i = U, V. \quad (2.45)$$

Za parno-parne jezgre, vjerojatnosti zaposjednuća stanja povezanih vremenskih obratom jesu jednake i ta stanja jednako doprinose gustoćama (2.24)-(2.26).

Spinore f_i^\pm i g_i^\pm pronalazimo razvojem u bazi svojstvenih stanja aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora:

$$V_{osc}(z, r_\perp) = \frac{1}{2}M\omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2}M\omega_\perp^2 r_\perp^2. \quad (2.46)$$

Budući da ukupan volumen mora biti očuvan, oscilatorske frekvencije $\hbar\omega_z$ i $\hbar\omega_\perp$ mogu se izraziti preko parametra deformacije β_0 i oscilatorske frekvencije $\hbar\omega_0$:

$$\hbar\omega_z = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{5/4\pi}\beta_0}, \quad \hbar\omega_\perp = \hbar\omega_0 e^{\frac{1}{2}\sqrt{5/4\pi}\beta_0}. \quad (2.47)$$

Odgovarajuće oscilatorske duljine su $b_z = \sqrt{\hbar/M\omega_z}$ i $b_\perp = \sqrt{\hbar/M\omega_\perp}$, a iz očuvanja volumena slijedi $b_\perp^2 b_z = b_0^3$. Baza je sada određena konstantama $\hbar\omega_0$ i β_0 , a svojstvena stanja potencijala deformiranog harmoničkog oscilatora određena su kvantnim brojevima:

$$|\alpha\rangle = |n_z, n_\perp, m_l, m_s\rangle, \quad (2.48)$$

gdje n_z i n_\perp označavaju, redom, broj čvorova valne funkcije u z i r_\perp smjeru, a m_l i m_s su projekcije angularnog momenta i spina na os simetrije. Svojstvena vrijednost operatora j_z , koja je sačuvana veličina u ovom računu, dana je sa:

$$\Omega = m_l + m_s, \quad (2.49)$$

dok se paritet određuje prema:

$$\pi = (-1)^{n_z + m_l}. \quad (2.50)$$

Svojstvene funkcije potencijala aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora glase:

$$\Phi_\alpha(z, r_\perp, \varphi, s, t) = \phi_{n_z}(z) \phi_{n_\perp}^{m_l}(r_\perp) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi} \chi_{m_s}(s), \quad (2.51)$$

uz

$$\phi_{n_z}(z) = \frac{N_{n_z}}{\sqrt{b_z}} H_{n_z}(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (2.52)$$

i

$$\phi_{n_{\perp}}^{m_l}(r_{\perp}) = \frac{N_{n_{\perp}}^{m_l}}{b_{\perp}} \sqrt{2} \eta^{m_l/2} L_{n_{\perp}}^{m_l}(\eta) e^{-\eta/2}, \quad (2.53)$$

gdje je $\xi = z/b_z$ i $\eta = r_{\perp}^2/b_{\perp}^2$. Hermiteovi polinomi $H_{n_z}(\xi)$ i pridruženi Laguerreovi polinomi $L_{n_{\perp}}^{m_l}(\eta)$ definirani su u [40]. Normalizacijske konstante iznose:

$$N_{n_z} = \frac{1}{\sqrt{\pi 2^{n_z} n_z!}} \quad \text{i} \quad N_{n_{\perp}}^{m_l} = \sqrt{\frac{1}{(n_{\perp} + |m_l|)!}}. \quad (2.54)$$

Razvoj komponenata spinora (2.42) i (2.43) u bazi harmoničkog oscilatora glasi:

$$f_i(\mathbf{r}, s, t) = \sum_{\alpha}^{\alpha_{max}} f_{\alpha}^i \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}, s) \chi_{t_i}(t), \quad i = U, V, \quad (2.55)$$

$$g_i(\mathbf{r}, s, t) = \sum_{\tilde{\alpha}}^{\tilde{\alpha}_{max}} g_{\tilde{\alpha}}^i \Phi_{\tilde{\alpha}}(\mathbf{r}, s) \chi_{t_i}(t), \quad i = U, V. \quad (2.56)$$

Kako bi se izbjegla pojava nefizikalnih spurioznih stanja, kvantni brojevi α_{max} i $\tilde{\alpha}_{max}$ odaberu se tako da odgovarajući glavni oscilatorski kvantni brojevi $N = n_z + 2n_{\perp} + m_l$ nisu veći od $N_{sh} + 1$ pri razvoju malih komponenti spinora i da nisu veći od N_{sh} pri razvoju velikih komponenti spinora [39].

Opisanim postupkom rješavanja RHB jednadžbi dobije se samo jedna točka na energijskoj površini, koja odgovara lokalnom minimumu [24]. Da bismo dobili energiju kao funkciju kolektivnog parametra q , potrebno je nametnuti dodatno ograničenje na očekivanu vrijednost odgovarajućeg operatora. U praksi, zanima nas valna funkcija $|\phi(q)\rangle$ koja minimizira ukupnu energiju uz ograničenje da jednočestični operator \hat{Q} ima fiksnu očekivanu vrijednost $q = \langle \Phi | \hat{Q} | \Phi \rangle$. Metoda kvadratičnog ograničenja⁶ koristi neograničenu varijaciju funkcije [41]:

$$\langle H \rangle + \frac{C}{2} (\langle \hat{Q} \rangle - q)^2, \quad (2.57)$$

gdje je $\langle H \rangle$ ukupna energija, $\langle \hat{Q} \rangle$ očekivana vrijednost oktupolnog operatora, q odabrani parametar oktupolne deformacije, a C konstanta tromosti⁷. Ovakav pristup omogućuje efikasno određivanje energije vezanja za svaku pojedinu deformaciju u ravnini razapetoj parametrima kvadrupolne i oktupolne deformacije ($\beta_2 - \beta_3$ ravnini).

2.5 Metoda generirajućih koordinata

Račun na razini srednjeg polja karakteriziran je lomljenjem simetrija pa može samo približno opisati svojstva osnovnog stanja atomske jezgre. Kako bi se izračunao spektar kolektivnih pobuđenja i snage elektromagnetskih prijelaza u pojedinim jezgrama,

⁶engl. *method of quadratic constraint*

⁷engl. *stiffness constant*

potrebno je uzeti u obzir i kolektivne korelacije koje potječu od ponovnog uspostavljanja simetrija i fluktuacija kolektivnih koordinata oko minimuma srednjeg polja. Te su korelacije osjetljive na efekte ljusaka i snažno variraju s brojem čestica pa ih nije moguće uključiti u univerzalni funkcional gustoće. Zbog toga se one obično uzimaju u obzir u okviru nekoga modela koji nadilazi razinu srednjega polja⁸. Dva vjerojatno najpopularnija modela jesu model kolektivnog Hamiltonijana (CHM) i metoda generirajućih koordinata (GCM). Detalji modela kolektivnog Hamiltonijana dani su u Dodatku A, a ostatak ovog poglavlja posvećen je metodi generirajućih koordinata.

Metoda generirajućih koordinata kvantnomehanička je varijacijska metoda koja predstavlja jedan od prvih pokušaja uključivanja jednočestične i kolektivne nuklearne dinamike u jedinstven formalizam [42]. Detaljan pregled metode dan je u [24] i [25]. Polazišna točka GCM računa jest izgradnja valnih funkcija koje predstavljaju približna svojstvena stanja Hamiltonijana cijele jezgre i sačinjavaju takozvanu GCM bazu. Te valne funkcije odgovaraju linearnoj kombinaciji generirajućih funkcija $|\Phi(a)\rangle$, od kojih svaka dolazi u umnošku s odgovarajućom težinskom funkcijom $f(a)$:

$$|\psi\rangle = \int da f(a) |\Phi(a)\rangle. \quad (2.58)$$

Općenito, ovaj je integral višedimenzionalan i ide po svim realnim i imaginarnim dijelovima parametara $\{a\} = a_1, a_2, \dots, a_i$, koji se nazivaju generirajućim koordinatama. Metoda generirajućih koordinata može, u načelu, uzeti u obzir proizvoljno mnogo generirajućih koordinata, no u praktičnim se primjenama najčešće potrebno ograničiti na najviše dvije generirajuće koordinate. Odabir konkretne generirajuće koordinate ovisi o svojstvima sustava koji se opisuje, a obično se odabiru parametri kvadrupolne ili oktupolne deformacije. Također, odabir seta generirajućih funkcija $|\Phi(a)\rangle$, koji je načelno proizvoljan, određuje koliko će dobro valne funkcije $|\psi\rangle$ opisivati promatrani fizikalni sustav. Uz to, težinske funkcije $f(a)$ kvadratno su integrabilne funkcije varijable a , no nisu ortogonalne i ne mogu se interpretirati kao kolektivne valne funkcije za varijablu a .

Premda generirajuće koordinate općenito mogu biti kontinuirane, u praktičnim je primjenama najčešće potrebno raditi u diskretnoj aproksimaciji. Odaberimo za generirajuću koordinatu oktupolnu deformaciju q i pretpostavimo da je diskretna. Diskretizirana inačica jednadžbe (2.58) u tom slučaju glasi:

$$|\psi_\alpha\rangle = \sum_j f_\alpha(q_j) |\Phi(q_j)\rangle, \quad (2.59)$$

gdje suma ide po cijeloj diskretiziranoj mreži, a indeks α označava kvantni broj stanja. Na ovaj je način moguće ponovno uspostaviti paritetnu simetriju slomljenu na razini srednjeg polja, povezujući paritet π_α težinske funkcije $f_\alpha(-q_j) = \pi_\alpha f_\alpha(q_j)$ s paritetom GCM stanja $|\psi_\alpha\rangle$. Same težinske funkcije $f_\alpha(q)$ određuju se minimizacijom

⁸engl. *beyond mean-field model*

očekivane vrijednosti Hamiltonijana \hat{H} :

$$E_\alpha = \frac{\langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle}. \quad (2.60)$$

Ovaj zahtjev vodi na Hill-Wheelerovu (HW) jednadžbu:

$$\sum_j f_\alpha(q_j) \left(\langle \Phi(q_i) | \hat{H} | \Phi(q_j) \rangle - E_\alpha \langle \Phi(q_i) | \Phi(q_j) \rangle \right) = 0. \quad (2.61)$$

Definiramo li funkcije preklopa norme $\mathcal{N}(q_i, q_j)$ i Hamiltonijana $\mathcal{H}(q_i, q_j)$,

$$\mathcal{N}(q_i, q_j) = \langle \Phi(q_i) | \Phi(q_j) \rangle \quad \text{i} \quad \mathcal{H}(q_i, q_j) = \langle \Phi(q_i) | \hat{H} | \Phi(q_j) \rangle, \quad (2.62)$$

HW jednadžbu možemo zapisati kao:

$$\sum_j \mathcal{H}(q_i, q_j) f_\alpha(q_j) = E_\alpha \sum_j \mathcal{N}(q_i, q_j) f_\alpha(q_j). \quad (2.63)$$

Izračun funkcija preklopa (2.62) ovisi o odabiru seta generirajućih funkcija $|\Phi(q_j)\rangle$. U ovome smo radu za generirajuće funkcije odabrali Slaterove determinante jednočestičnih stanja dobivene rješavanjem RHB jednadžbi, a detalji izračuna odgovarajućih funkcija preklopa dani su u Dodatku B. Jednadžba (2.63) predstavlja generalizirani problem svojstvenih vrijednosti, a prvi korak pri njenom rješavanju najčešće je dijagonalizacija preklopa norme:

$$\sum_j \mathcal{N}(q_i, q_j) u_k(q_j) = n_k u_k(q_i). \quad (2.64)$$

Budući da je \mathcal{N} norma, svojstvene vrijednosti n_k su nenegativne, dok odgovarajuće svojstvene funkcije $u_k(q_i)$ sačinjavaju kompletan ortonormiran skup u prostoru težinskih funkcija $f(a)$:

$$\sum_k u_k(q_i) u_k^*(q_j) = \delta_{ij}, \quad \sum_i u_k^*(q_i) u_{k'}(q_i) = \delta_{kk'}. \quad (2.65)$$

Operator \mathcal{N} moguće je rastaviti kao $\mathcal{N} = \mathcal{N}^{1/2} \cdot \mathcal{N}^{1/2}$, gdje je:

$$\mathcal{N}^{1/2}(q_i, q_j) = \sum_k u_k(q_i) \sqrt{n_k} u_k^*(q_j). \quad (2.66)$$

Koristeći relaciju (2.66), definiramo novi set funkcija,

$$g_\alpha(q_i) = \sum_j \mathcal{N}^{1/2}(q_i, q_j) f_\alpha(q_j), \quad (2.67)$$

pomoću kojih je HW jednadžbu moguće zapisati kao standardan problem svojstvenih vrijednosti:

$$\sum_j \tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) g_\alpha(q_j) = E_\alpha g_\alpha(q_i). \quad (2.68)$$

Transformirani Hamiltonijan $\tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j)$ glasi:

$$\tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) = \sum_{k,l} \mathcal{N}^{-1/2}(q_i, q_k) \mathcal{H}(q_k, q_l) \mathcal{N}^{-1/2}(q_l, q_j), \quad (2.69)$$

a invertiranje operatora $\mathcal{N}^{1/2}$ moguće je samo pod uvjetom da operator \mathcal{N} nema nijednu svojstvenu vrijednost n_k jednaku nuli. Budući da jednačba (2.68) predstavlja običan problem svojstvenih vrijednosti, funkcije $g_\alpha(q_i)$ su ortonormirane i predstavljaju kolektivne valne funkcije za varijablu q . Potprostor kolektivnih stanja \mathcal{P}_C odgovara najmanjem potprostoru početnog Hilbertovog prostora koji sadrži sve generirajuće funkcije $|\Phi(a)\rangle$, a razapet je takozvanim prirodnim stanjima:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \sum_i u_k(q_i) |\Phi(q_i)\rangle. \quad (2.70)$$

Jednačbu (2.68) rješavamo dijagonalizacijom Hamiltonijana u potprostoru kolektivnih stanja:

$$\sum_l \mathcal{H}_{kl}^{coll} g_l^\alpha = E_\alpha g_k^\alpha, \quad (2.71)$$

gdje je kolektivni Hamiltonijan dan sa:

$$\mathcal{H}_{kl}^{coll} = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \frac{1}{\sqrt{n_l}} \sum_{i,j} u_k(q_i) \tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) u_l(q_j). \quad (2.72)$$

Rješenja jednačbe (2.71) određuju energiju osnovnog i pobuđenih stanja jezgre. Kolektivne valne funkcije $g_\alpha(q)$ i težinske funkcije $f_\alpha(q)$ računaju se iz svojstvenih funkcija preklopa norme:

$$g_\alpha(q_i) = \sum_k g_k^\alpha u_k(q_i) \quad (2.73)$$

i

$$f_\alpha(q_i) = \sum_k \frac{g_k^\alpha}{\sqrt{n_k}} u_k(q_i). \quad (2.74)$$

Poznavajući težinske funkcije $f_\alpha(q)$ moguće je, u načelu, izračunati sve fizikalne observable, poput snaga prijelaza i spektroskopskih multipolnih momenata.

Važno je uočiti da je ovakav pristup karakteriziran nesačuvanjem broja nukleona. Naime, RHB jednačbe osiguravaju samo da je očekivana vrijednost operatora \hat{N} i \hat{Z} jednaka broju neutrona N_0 i broju protona Z_0 promatrane jezgre za sve vrijednosti kolektivne koordinate: $\langle \Phi(q) | \hat{N} | \Phi(q) \rangle = N_0$ i $\langle \Phi(q) | \hat{Z} | \Phi(q) \rangle = Z_0$. Međutim, rješenja HW jednačbe $|\psi_\alpha\rangle$ općenito nisu svojstvena stanja operatora \hat{N} i \hat{Z} . Štoviše, budući da energija vezanja raste s prosječnim brojem nukleona, varijacija težinskih funkcija u GCM računu generirat će osnovno stanje s prosječnim brojem protona i

neutrona koji je veći od stvarnog broja nukleona promatrane jezgre. Kako bi se ponovno uspostavila točna očekivana vrijednost broja protona i neutrona, potrebno je dodatno modificirati Hamiltonijan (2.69), zamjenom:

$$\tilde{\mathcal{H}}'(q_i, q_j) = \tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) - \lambda_P[\hat{Z}(q_i, q_j) - Z_0] - \lambda_N[\hat{N}(q_i, q_j) - N_0], \quad (2.75)$$

gdje λ_P i λ_N predstavljaju Lagrangeove parametre za protone i neutrone koji se određuju iz uvjeta:

$$\langle \psi_\alpha | (\hat{N} - N_0) | \psi_\alpha \rangle = \langle \psi_\alpha | (\hat{Z} - Z_0) | \psi_\alpha \rangle = 0. \quad (2.76)$$

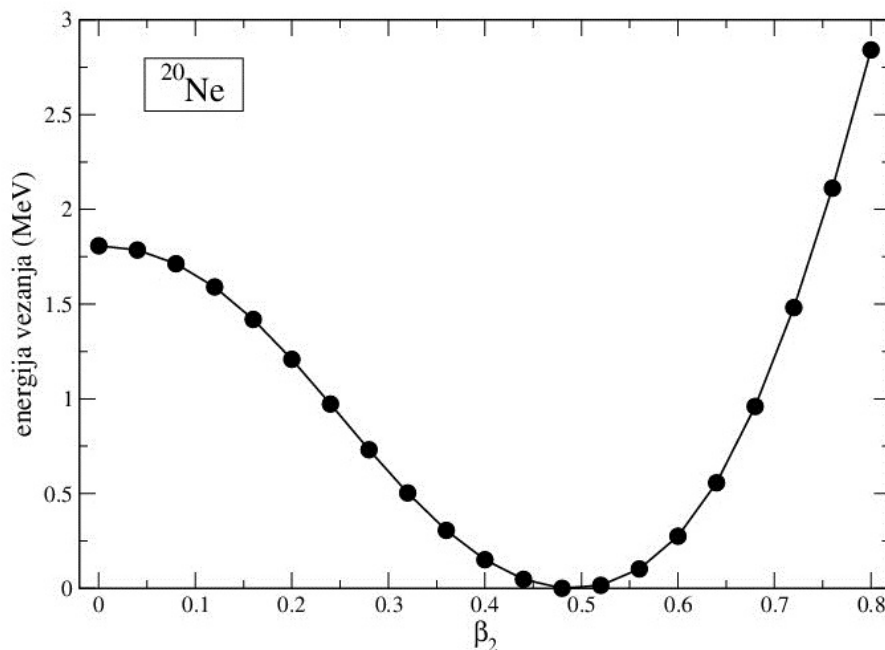
Ponovno uspostavljanje točnog očekivanog broja čestica nužno je da bi GCM račun mogao dati dobro predviđanje energijskog spektra atomske jezgre.

Numerička primjena metode generirajućih koordinata zahtijeva nametanje dodatnih uvjeta koji ne proizlaze iz same teorije. Konkretno, budući da generirajuće funkcije $|\Phi(q_i)\rangle$ nisu linearno neovisne, mnoge svojstvene vrijednosti n_k bit će vrlo blizu nuli. Odgovarajuće svojstvene funkcije $u_k(q_i)$ brzo će oscilirati i nosit će vrlo malo fizikalnog sadržaja, no njihov doprinos kolektivnom Hamiltonijanu (2.71) bit će velik. Ovaj se problem u praksi rješava tako da se sve valne funkcije sa svojstvenim vrijednostima manjim od nekog proizvoljnog ϵ jednostavno uklone iz baze. Također, iz istoga razloga nije korisno neograničeno povećavati broj točaka diskretizirane mreže. Naime, ako generirajuće valne funkcije u neke dvije točke već imaju dovoljno velik preklap, dodavanjem još jedne točke između njih neće se dobiti nikakva dodatna informacija. S druge strane, preklap generirajuće valne funkcije u novoj točki i u ostalim udaljenim točkama bit će vrlo malen pa će se na taj način generirati svojstvena stanja koja se na kraju uklanjaju iz baze. Prema tome, pri odabiru diskretizirane mreže treba paziti da je ona dovoljno fina da se obuhvate svi efekti, ali da se pri tome generira što manje stanja s malim svojstvenim vrijednostima.

3 Provjera modela: atomska jezgra ^{20}Ne

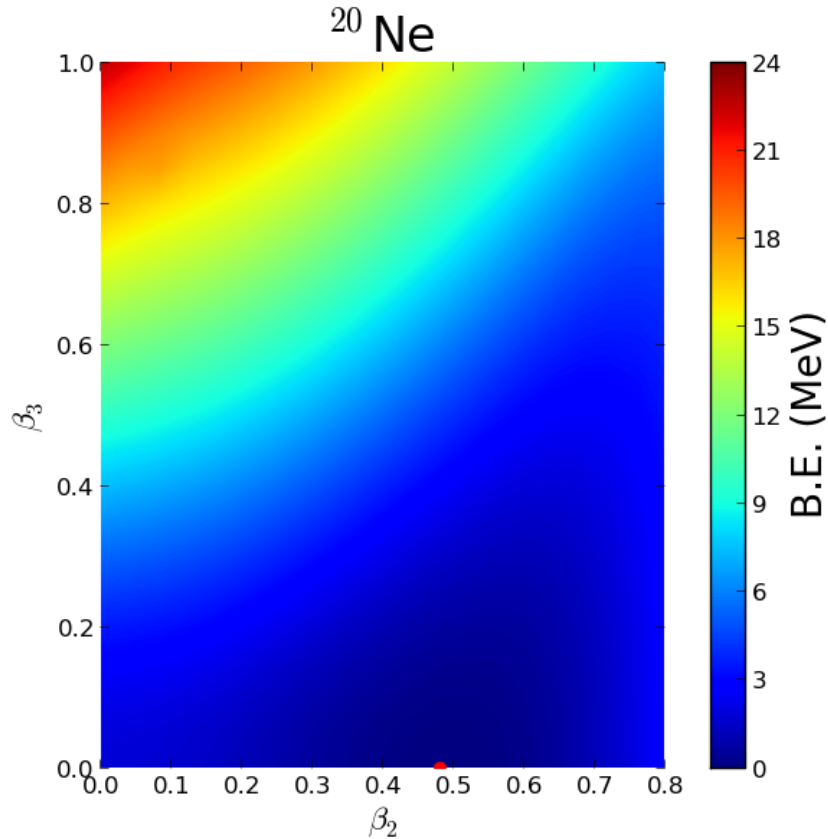
Osnovno stanje atomske jezgre ^{20}Ne odgovara kvadrupolno deformiranom izduženom elipsoidu bez oktopolne deformacije. Međutim, minimum energije vezanja u oktopolnoj koordinati nije dubok i poznato je da ova jezgra ima jednu od najvećih snaga oktopolnog prijelaza među lakim jezgrama. Osim toga, s obzirom na malen broj nukleona, atomska jezgra ^{20}Ne predstavlja optimalan odabir za numerički test konzistentosti kôda prije nego se prijeđe na vremenski bitno zahtjevnije račune s mnogo težim jezgrama. U slučaju jezgre ^{20}Ne dovoljno je zadržati se na $N_{\text{sh}} = 10$ ljusaka pri razvoju nuklearnih spinora u bazi harmoničkog oscilatora, a za vrijednost ϵ definiranu u prethodnom poglavlju uzeto je $\epsilon = 10^{-4}$.

Na slici 3.1 prikazana energija vezanja atomske jezgre ^{20}Ne u ovisnosti o kvadrupolnoj deformaciji za konfiguraciju bez oktopolne deformacije. Kao što je rečeno, apsolutni minimum na deformaciji $\beta_2 = 0.48$ odgovara kvadrupolno deformiranom izduženom elipsoidu. Iznos ravnotežne kvadrupolne deformacije nešto je veći od iznosa dobivenog u [11] gdje je korišten sličan formalizam, ali s drugim međudjelovanjem. Eksperimentalno određene vrijednosti β_2 u literaturi variraju između 0.35 [43] i 0.727 [44]. Međutim, budući da parametar kvadrupolne deformacije nije opservabilna koju je moguće odrediti izravno iz eksperimenta, ovakve procjene uvijek ovise o modelu koji se koristi prilikom interpretacije eksperimentalnih rezultata.



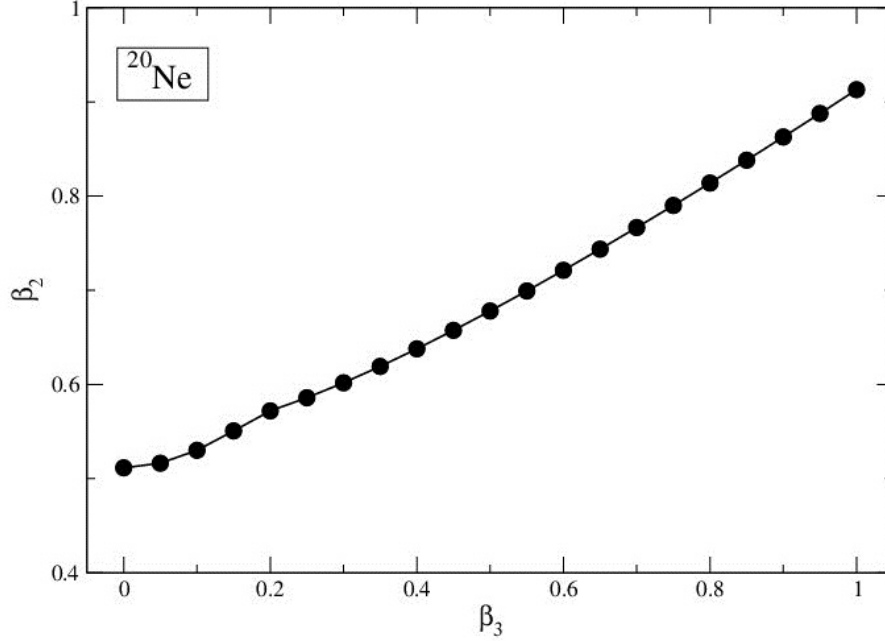
Slika 3.1: Energija vezanja atomske jezgre ^{20}Ne u ovisnosti o kvadrupolnoj deformaciji za konfiguraciju bez oktopolne deformacije ($\beta_3 = 0$). Sve su energije normirane s obzirom na energiju vezanja apsolutnog minimuma.

Uzmemo li u obzir i oktupolni stupanj slobode, moguće je izračunati energije vezanja atomske jezgre ^{20}Ne za svaku pojedinu deformaciju u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjeg polja. Pri tome smo odabrali mrežu $0 \leq \beta_2 \leq 0.8$ i $0 \leq \beta_3 \leq 1.0$, uz podjelu $\Delta\beta_2 = 0.04$ i $\Delta\beta_3 = 0.05$. Apsolutni minimum na deformaciji $(\beta_2, \beta_3) = (0.48, 0)$ sa slike 3.2 pokazuje da jezgra ^{20}Ne nije oktupolno deformirana u svom osnovnom stanju.



Slika 3.2: Energije vezanja atomske jezgre ^{20}Ne u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjega polja. Sve su energije normirane s obzirom na energiju vezanja apsolutnog minimuma. Boja označava energiju svake točke na površini u odnosu na energiju apsolutnog minimuma (crvena točka).

Međutim, uključivanje oktupolne deformacije u račun nije uvijek trivijalno zato što kvadrupolni i oktupolni stupanj slobode nisu nužno neovisni u svakoj atomskoj jezgri. Dobar pokazatelj njihova međuodnosa jest ovisnost ravnotežne kvadrupolne deformacije o nametnutoj oktupolnoj deformaciji, koja je za jezgru ^{20}Ne prikazana na slici 3.3. Ravnotežna kvadrupolna deformacija porasla je gotovo dvostruko u promatranom rasponu oktupolnih deformacija, što ukazuje na činjenicu da u slučaju jezgre ^{20}Ne oktupolni stupanj slobode nije u potpunosti neovisan o kvadrupolnom stupnju slobode. Ovaj je efekt uočljiv i u rezultatima kolektivnih modela koji nadilaze razinu srednjeg polja. Tamo, zbog pojave snažnog α -klasteriranja u jezgri ^{20}Ne , doprinos vezanja ovih dvaju stupnjeva slobode ukupnoj korelacijskoj energiji ne mora biti zanemariv i u tom ga je slučaju potrebno eksplicitno uključiti u račun.

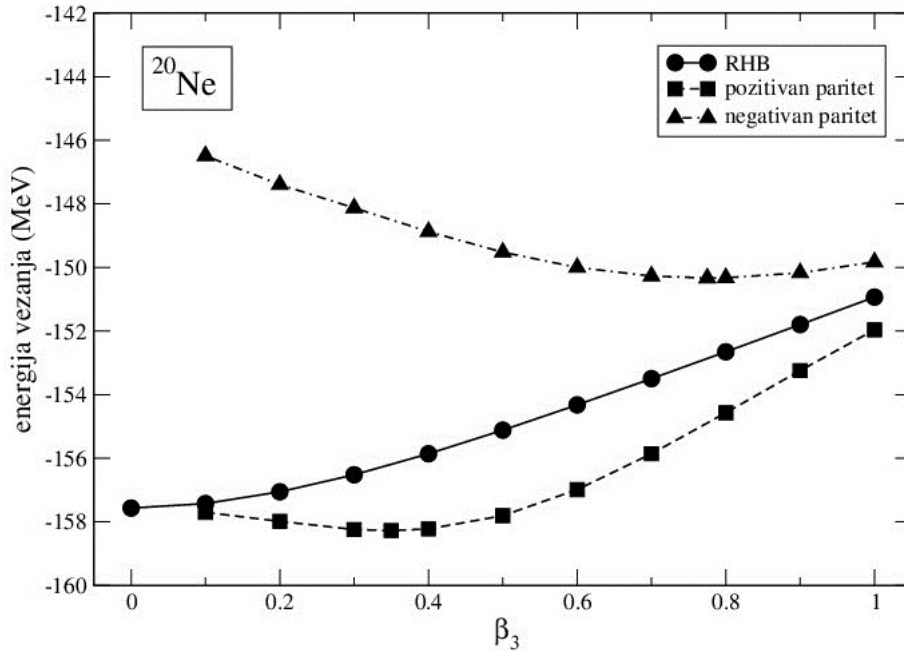


Slika 3.3: Ovisnost ravnotežne kvadrupolne deformacije o nametnutoj oktopolnoj deformaciji u atomskoj jezgri ^{20}Ne na razini srednjega polja.

Također, precizan opis osnovnog stanja atomske jezgre zahtijeva ponovno uspostavljanje simetrija koje su slomljene na razini srednjega polja. Među ostalima, u našem je računu slomljena paritetna simetrija pa RHB valne funkcije nemaju dobro definiran paritet. Dobar je paritet moguće ponovno uspostaviti u okviru GCM-a i bez eksplicitnog korištenja odgovarajućeg operatora projekcije, računajući na mreži deformacija koja je simetrična s obzirom na $\beta_3 = 0$ konfiguraciju. Na slici 3.4 prikazana je ovisnost energije vezanja atomske jezgre ^{20}Ne o oktopolnoj deformaciji za valne funkcije koje odgovaraju RHB stanjima te projekcijama na pozitivan i negativan paritet. Pri tome je odabrana mreža $\Delta\beta_3 = 0.1$, a uključene su i točke koje odgovaraju minimumima projekcija na pozitivan i negativan paritet. Dobar paritet ponovno je uspostavljen na način da je za svaku β_3 deformaciju istovremeno uzeta u obzir i odgovarajuća $-\beta_3$ deformacija. Budući da oktopolni operator ima negativan paritet, energije vezanja za $\beta_3 < 0$ mogu se dobiti jednostavnim zrcaljenjem s obzirom na y -os. Energija osnovnog stanja jest niža pri projekciji sa $\beta_3 \neq 0$, a pridružena korelacijska energija, koja potječe od ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta, definirana je kao:

$$E_{\text{corr}}^{\text{parproj}} = E_{\text{RHB}}^{\text{g.s.}} - E_{\pi=+1}^{\text{g.s.}}, \quad (3.1)$$

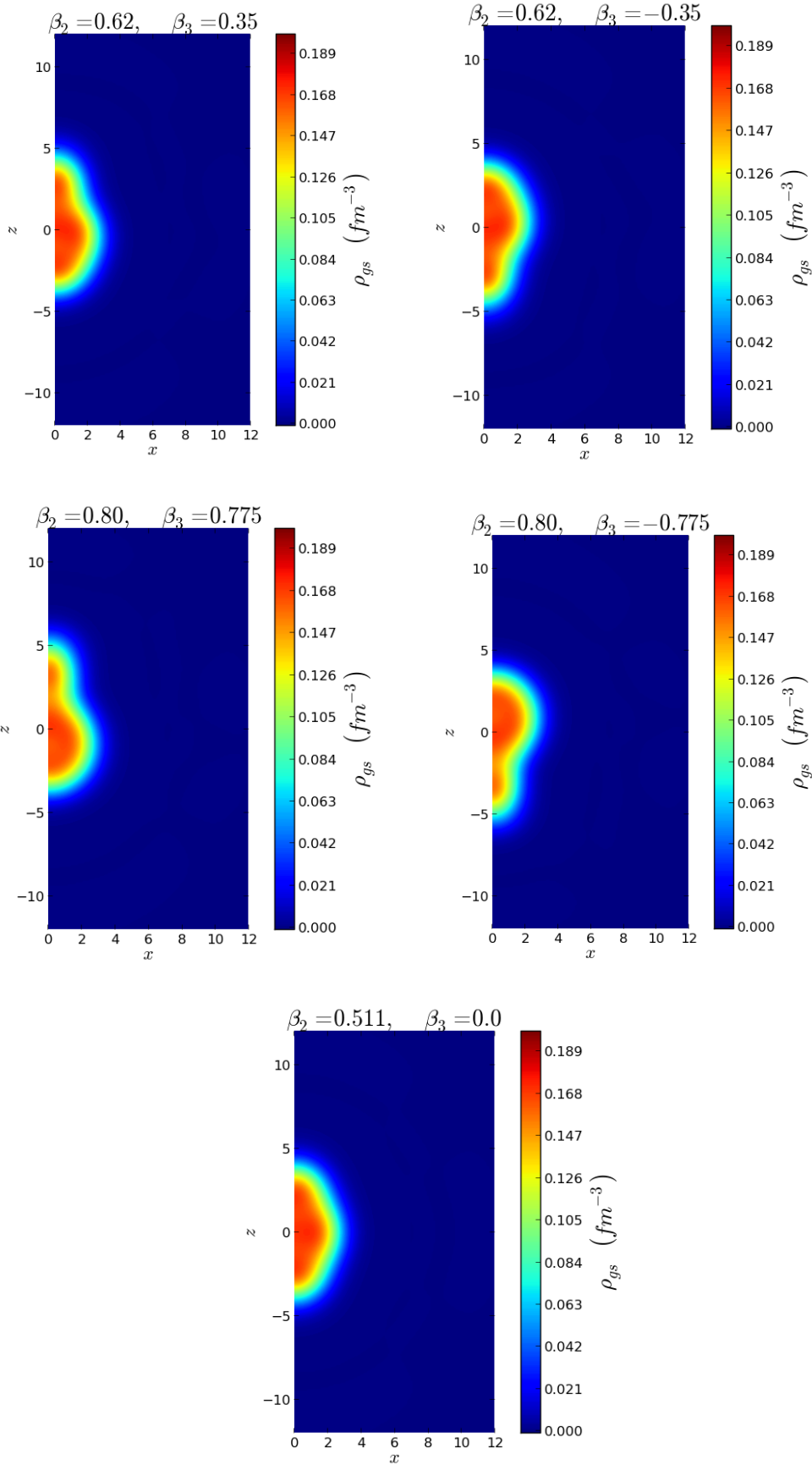
gdje $E_{\text{RHB}}^{\text{g.s.}}$ odgovara energiji RHB osnovnog stanja, a $E_{\pi=+1}^{\text{g.s.}}$ energiji apsolutnog minimuma projekcije na pozitivan paritet. U slučaju atomske jezgre ^{20}Ne , ova korelacijska energija iznosi $E_{\text{corr}}^{\text{parproj}} \approx 0.7$ MeV. Projicirani minimumi nalaze se na $\beta_3^+ \approx 0.35$ i $\beta_3^- \approx 0.775$, na nešto manjim deformacijama nego projicirani minimumi $\beta_3^+ \approx 0.4$ i $\beta_3^- \approx 0.95$ iz [11].



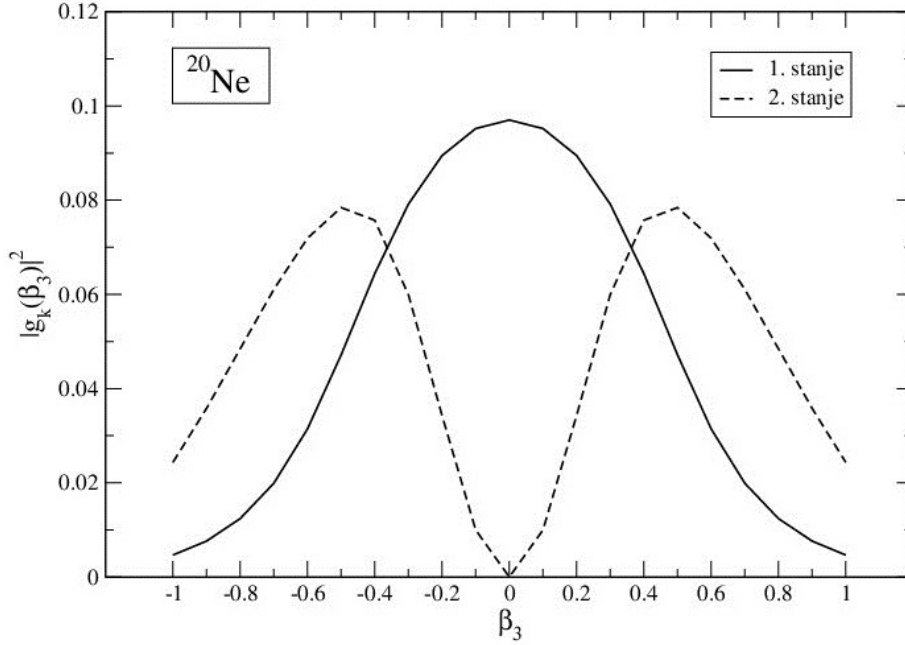
Slika 3.4: Energija vezanja atomske jezgre ^{20}Ne u ovisnosti o oktupolnoj deformaciji. Energije koje odgovaraju RHB valnim funkcijama označene su krugovima i povezane punom linijom, dok su projekcije na pozitivan (negativan) paritet označene kvadratima (trokutima) i povezane isprekidanom (točka-crta) linijom. Kvadrupolne su deformacije određivane samosuglasno.

Na slici 3.5 prikazane su raspodjele gustoće nukleona atomske jezgre ^{20}Ne u projiciranim minimumima $\pm\beta_3^+$ i $\pm\beta_3^-$, kao i u $\beta_3 = 0$. U projiciranim minimumima jezgra ima karakterističan kruškolik oblik: na centriranu i gotovo sferičnu raspodjelu gustoće nadovezuju se kompaktne lokalizirane gustoće, koje odgovaraju α -česticama. Raspodjele gustoća u $-\beta_3^+$ i $-\beta_3^-$ odgovaraju zrcalnim slikama konfiguracija s pozitivnim deformacijama u odnosu na x -os. S druge strane, raspodjela gustoće nukleona u konfiguraciji bez oktupolne deformacije simetrična je s obzirom na takvo zrcaljenje.

Na slici 3.6 prikazane su kolektivne amplitude vjerojatnosti dvaju najnižih GCM stanja atomske jezgre ^{20}Ne . Pri tome je odgovarajuću kvadrupolnu deformaciju moguće fiksirati na vrijednost apsolutnog minimuma energije ili je računati samosuglasno za svaku vrijednost deformacije β_3 . Amplitude vjerojatnosti izgledaju slično u oba slučaja, a ovdje su prikazane za prvi slučaj. Kolektivna stanja imaju dobro definiran paritet. Prvo je stanje parno i odgovara osnovnom (0^+) stanju jezgre ^{20}Ne . Pripadajuća amplituda vjerojatnosti ima maksimum za $\beta_3 = 0$, no njena vrijednost pada dosta blago s porastom oktupolne deformacije, što upućuje na β_3 -mekanu strukturu ovoga stanja. Kako kolektivna stanja nemaju dobro definiran angularni moment, potpuna usporedba sa spektroskopskim podacima nije moguća bez ponovnog uspostavljanja rotacijske simetrije. Takav postupak nadilazi opseg ovog rada. Međutim, zanemarimo li doprinos rotacijske popravke, moguće je drugo kolektivno stanje postojetiti s najnižim 3^- ili 1^- stanjem u spektru jezgre ^{20}Ne . Amplituda vjerojatnosti



Slika 3.5: Raspodjela gustoće nukleona u atomskoj jezgri ^{20}Ne u projiciranim minimumima $\pm\beta_3^+ = \pm 0.35$ (gore) i $\pm\beta_3^- = \pm 0.775$ (u sredini), kao i u $\beta_3 = 0$ (dolje).



Slika 3.6: Kolektivne amplitude vjerojatnosti dvaju najnižih GCM stanja atomske jezgre ^{20}Ne . Kvadrupolna je deformacija pri tome fiksirana na vrijednost iz minimuma srednjeg polja. Kolektivna stanja imaju dobro definiran paritet. Prvo je stanje parno (0^+) i odgovarajuća amplituda vjerojatnosti ima maksimum na refleksijski simetričnoj konfiguraciji. Drugo je stanje neparno (3^- ili 1^-) i odgovarajuća amplituda vjerojatnosti ima maksimum na $\beta_3 \approx 0.5$.

ovog stanja iščezava za $\beta_3 = 0$, monotono raste do $\beta_3 \approx 0.5$ te potom blago opada. Razlika energija prvog neparnog i prvog parnog kolektivnog stanja, E_3 , predstavlja fizikalnu opservablu koju možemo usporediti s eksperimentom. U slučaju kad je β_2 fiksiran na vrijednost iz minimuma srednjega polja dobije se $E_3 = 11.41$ MeV, a u slučaju kad je β_2 određivan samosuglasno $E_3 = 8.04$ MeV. Ovakva je razlika i očekivana s obzirom na rezultat sa slike 3.3. Naime, ravnotežna kvadrupolna deformacija iz minimuma srednjega polja ($\beta_3 = 0$) znatno se razlikuje od ravnotežnih deformacija na većim vrijednostima β_3 . Njenim nametanjem čak i na velikim β_3 jezgra se dovodi u energijski nepovoljnu konfiguraciju, što u konačnici vodi formiranju stanja koje je dosta visoko u energiji. U svakom slučaju, dobivene su energije veće od eksperimentalnih $E_x(1_1^-) = 5.78$ MeV i $E_x(3_1^-) = 5.62$ MeV [45], ali i od teorijskih 6.7 MeV iz [11]. Također, budući da je $\beta_2 = 0.48$ u osnovnom stanju jezgre ^{20}Ne , snaga oktupolnog prijelaza može se izračunati iz rotacijske formule (2.3). Dobivene vrijednosti $B(E3) = 6.71$ W.u. i $B(E3) = 8.99$ W.u. nešto su niže od odgovarajuće eksperimentalne vrijednosti $B(E3) = (13 \pm 3)$ W.u. iz [45]. Ovakvi su rezultati za atomsku jezgru ^{20}Ne očekivani, s obzirom da teorija funkcionala gustoće i inače daje bolje rezultate u sustavima s više čestica, a i parametri DD-PC1 funkcionala podešavani su na podatke o jezgrama sa $A \geq 150$ [21]. Upravo u tom području karte nuklida nalaze se izotopni lanci samarija i gadolinija koji su tema sljedećeg poglavlja.

4 Oktupolna pobuđenja u izotopima samarija i gadolinija

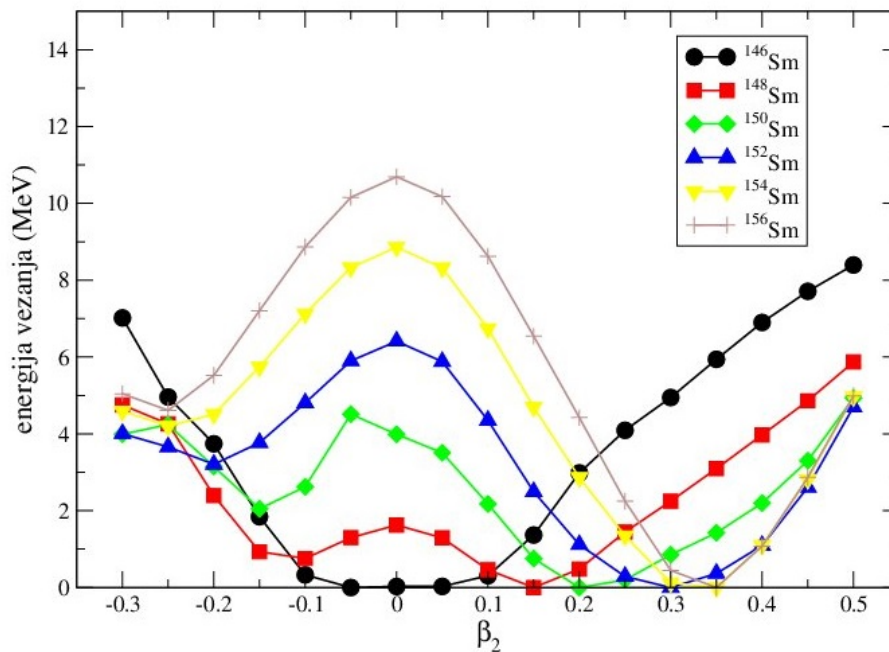
Izotopni lanac parnih atomskih jezgara samarija $^{146-156}\text{Sm}$ posebno je zanimljiv sa stajališta nuklearne strukture zato što se nalazi u području karte nuklida gdje dolazi do simultanih prijelaza kvadrupolno i oktupolno deformiranih oblika u osnovnom stanju atomske jezgre [6]. Međuigra ovih dvaju utjecaja mogla bi dovesti do pojave koegzistencije oblika, koja je dosad eksperimentalno zabilježena u izotopima ^{148}Sm [26], ^{150}Sm [27] i ^{152}Sm [13]. Također, postoje naznake da bi jezgra ^{152}Sm mogla biti primjer kritične točke kvantnog faznog prijelaza prvog reda između sferičnih i kvadrupolno deformiranih oblika [46]. S teorijske strane, pojava oktupolnih pobuđenja u izotopnom lancu jezgara samarija dosad je proučena korištenjem različitih modela. Posebno valja napomenuti novo istraživanje u okviru relativističke teorije srednjega polja [7], kao i novi mikroskopski opis kvadrupolno-oktupolnog vezanja u izotopima samarija i gadolinija korištenjem nerelativističkog Gognyjevog funkcionala gustoće nadopunjenog GCM-om [9]. Globalno istraživanje oktupolnih pobuđenja u 818 parno-parnih atomskih jezgara s protonskim brojevima $8 \leq Z \leq 110$ u okviru HFB/GCM formalizma provedeno je u [11]. Cilj ovoga rada jest dati dodatan doprinos konzistentnom opisu oktupolnih pobuđenja u području karte nuklida oko elemenata rijetkih zemalja, a posebno u izotopnim lancima parnih jezgara samarija $^{146-156}\text{Sm}$ i gadolinija $^{148-158}\text{Gd}$. Očekujemo da bi dobiveni rezultati trebali biti relativno pouzdan zato što su parametri DD-PC1 funkcionala podešavani upravo na podatke o jezgrama sa sličnim brojem nukleona.

Veći dio ovog poglavlja posvećen je sistematičnom opisu oktupolnih pobuđenja u parnim izotopima samarija. Polazišna je točka opis osnovnog stanja na razini srednjega polja, korištenjem RHB računa. U sljedećem se koraku ponovno uspostavlja paritetna simetrija koja je slomljena na razini srednjega polja, a potom se u okviru metode generirajućih koordinata pomiješaju konfiguracije s različitim vrijednostima oktupolne deformacije. Dobivene je rezultate u konačnici moguće usporediti s dostupnim eksperimentalnim podacima, uz određena ograničenja koja su također raspravljena. Rezultati za izotope gadolinija vrlo su slični i za odabrane su izotope navedeni pri kraju poglavlja.

4.1 Račun osnovnog stanja

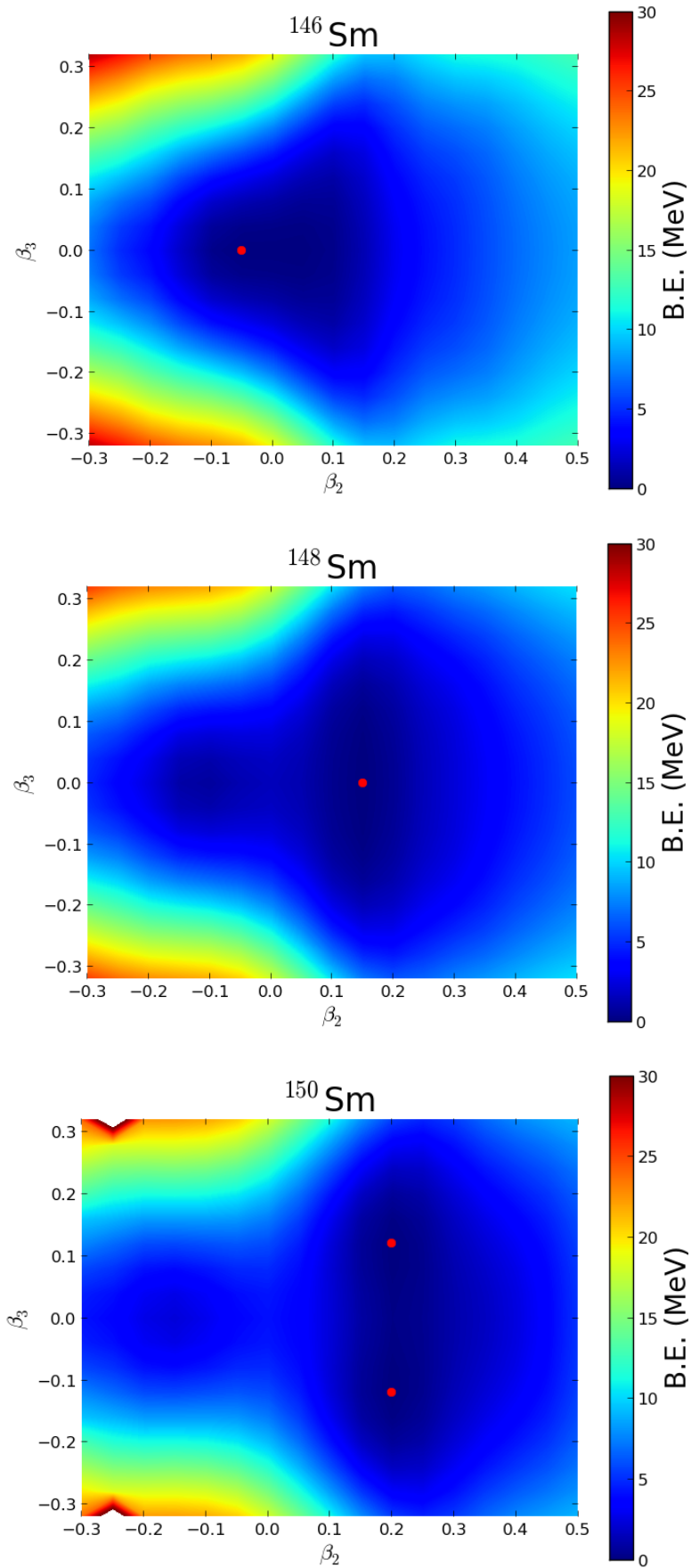
Polazišna točka našega računa jest izračun RHB valnih funkcija na razini srednjega polja i odgovarajućih energija vezanja. Pri tome su komponente spinora (2.42) i (2.43) razvijane u bazi deformiranog aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora, a kako bi se osigurala konvergencija računa za broj oscilatorskih ljusaka uzeto je $N_{\text{sh}} = 14$. Na slici 4.1 prikazana je ovisnost energija vezanja izotopnog lanca jezgara samarija o kvadrupolnoj deformaciji za konfiguracije bez oktupolne deformacije. Jez-

gra ^{146}Sm ima vrlo plitak minimum na blago negativnoj kvadrupolnoj deformaciji, $\beta_2 = -0.05$. Zbog toga je ova jezgra gotovo sferičnog oblika u svom osnovnom stanju, u skladu s činjenicom da se s neutronske brojem $N = 84$ nalazi malo iznad zatvorene ljuske na $N = 82$. Dodavanjem neutrona i dodatnim udaljavanjem od magičnog broja u težim izotopima dolazi do podizanja barijere na sferičnoj konfiguraciji. Apsolutni se minimum pri tome sustavno pomiče prema većim kvadrupolnim deformacijama, a pojavljuju se i lokalni minimumi na negativnim kvadrupolnim deformacijama. U [9] je predloženo da bi uključivanjem triaksijalnog stupnja slobode ovi minimumi mogli postati sedlene točke, no takav je račun izvan opsega ovoga rada.

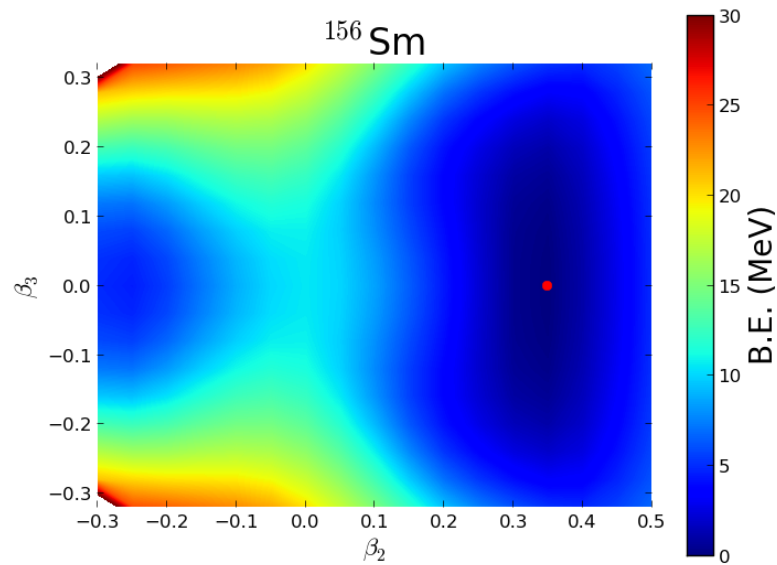
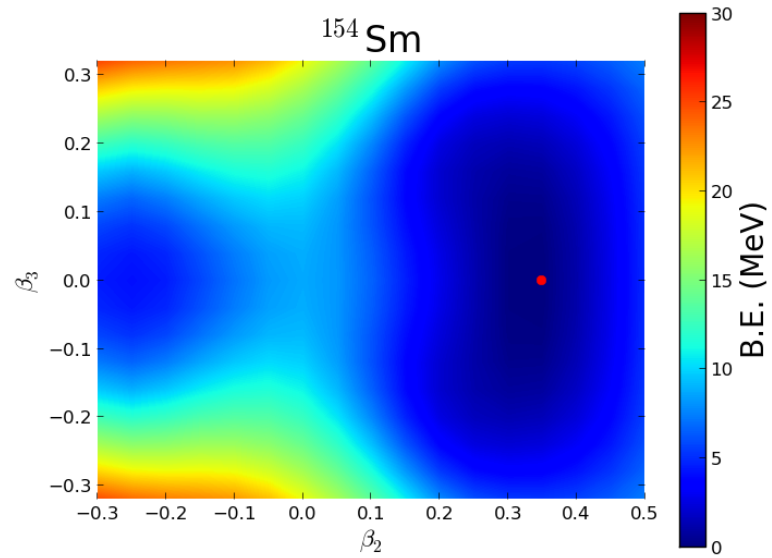
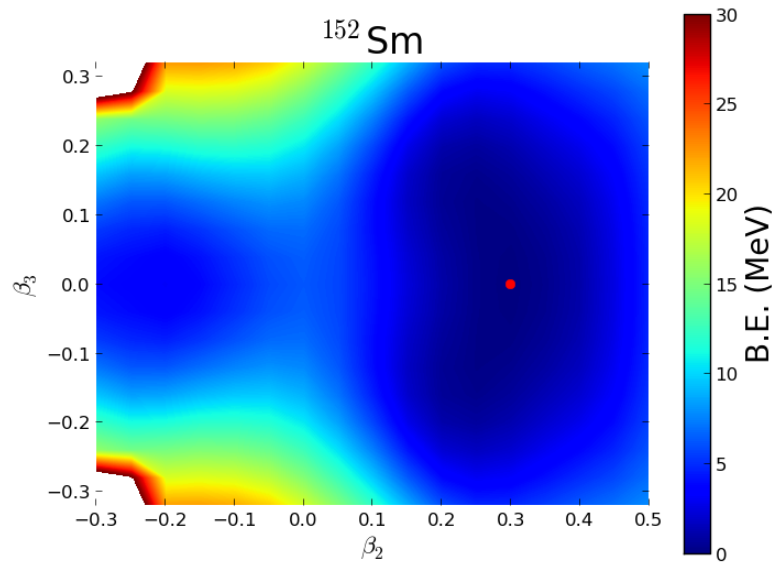


Slika 4.1: Energije vezanja izotopnog lanca atomskih jezgara samarija u ovisnosti o kvadrupolnoj deformaciji za konfiguracije bez oktopolne deformacije ($\beta_3 = 0$). Za svaku su jezgru energije normirane s obzirom na energiju vezanja apsolutnog minimuma.

Na slikama 4.2 i 4.3 prikazane su energije vezanja izotopnog lanca jezgara samarija u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjega polja. Pri tome je odabrana mreža $-0.30 \leq \beta_2 \leq 0.50$ i $-0.32 \leq \beta_3 \leq 0.32$, uz podjelu $\Delta\beta_2 = 0.05$ i $\Delta\beta_3 = 0.04$. Budući da su točke (β_2, β_3) i $(\beta_2, -\beta_3)$ energijski ekvivalentne, eksplicitno su izračunate samo energije konfiguracija s pozitivnim oktopolnim deformacijama. Jedina jezgra koja je oktopolno deformirana na razini srednjega polja jest ^{150}Sm , s apsolutnim minimumom na $(\beta_2, \beta_3) = (0.20, 0.12)$. Iznos ove deformacije blizak je izračunatoj vrijednosti (0.19, 0.14) iz [7]. Oduzimanjem ili dodavanjem neutrona oktopolna deformacija nestaje, a jezgra ide prema sferičnom ili izduženom kvadrupolno deformiranom obliku.



Slika 4.2: Energije vezanja atomskih jezgara $^{146-150}\text{Sm}$ u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjega polja. Za svaku su jezgru energije normirane s obzirom na energiju vezanja apsolutnog minimuma. Boja označava energiju svake točke na površini u odnosu na energiju apsolutnog minimuma (crvena točka).



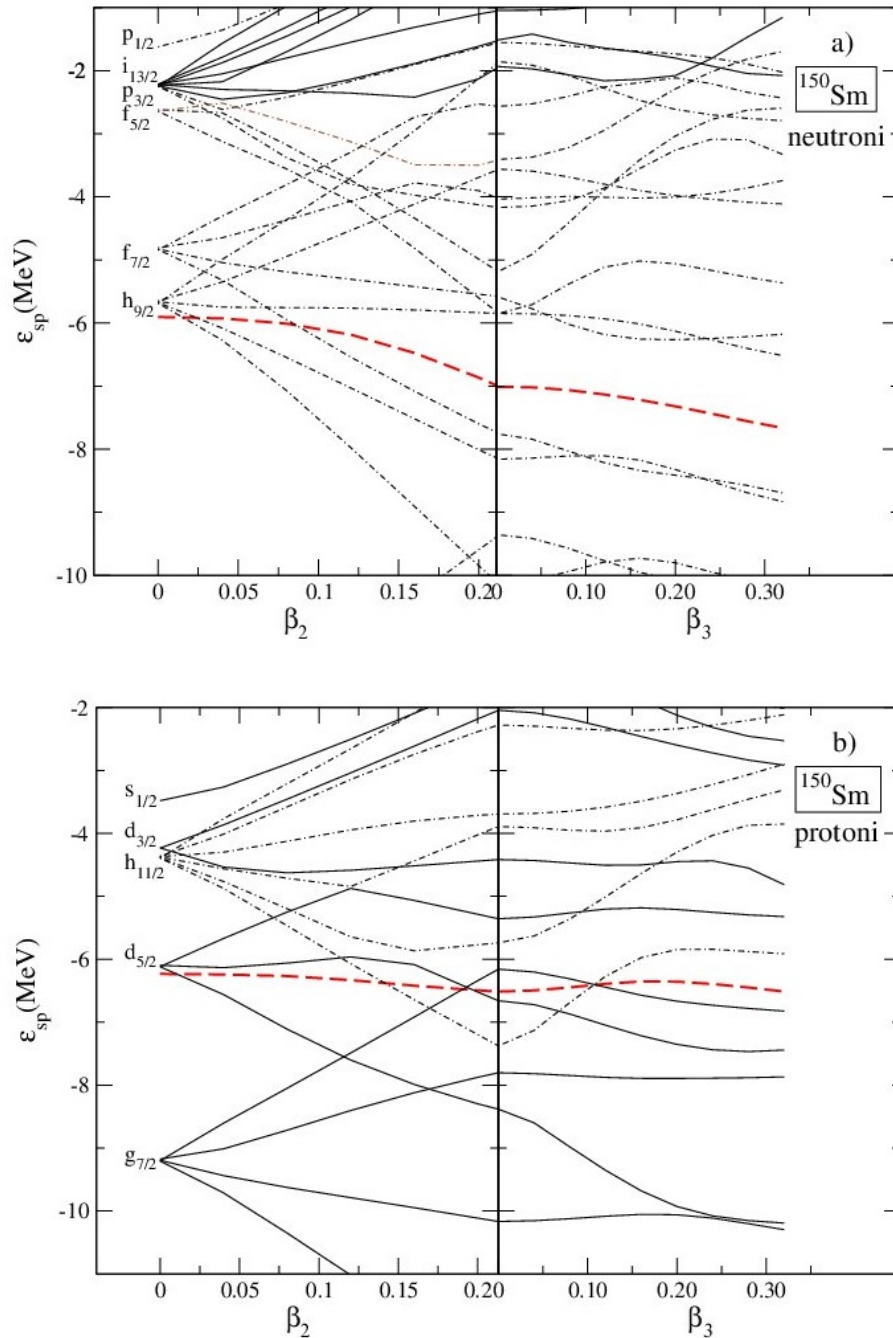
Slika 4.3: Kao na slici 4.2, ali za atomske jezgre $^{152-156}\text{Sm}$.

U tablici 4.1 navedene su energija vezanja, kvadrupolna i oktopolna deformacija osnovnih stanja izotopnog lanca jezgara samarija na razini srednjega polja, kao i odgovarajuće eksperimentalne i empirijske vrijednosti. Budući da β_2 i β_3 nisu opservable, njihove empirijske procjene izravno ovise o modelu koji se pri tome koristi.

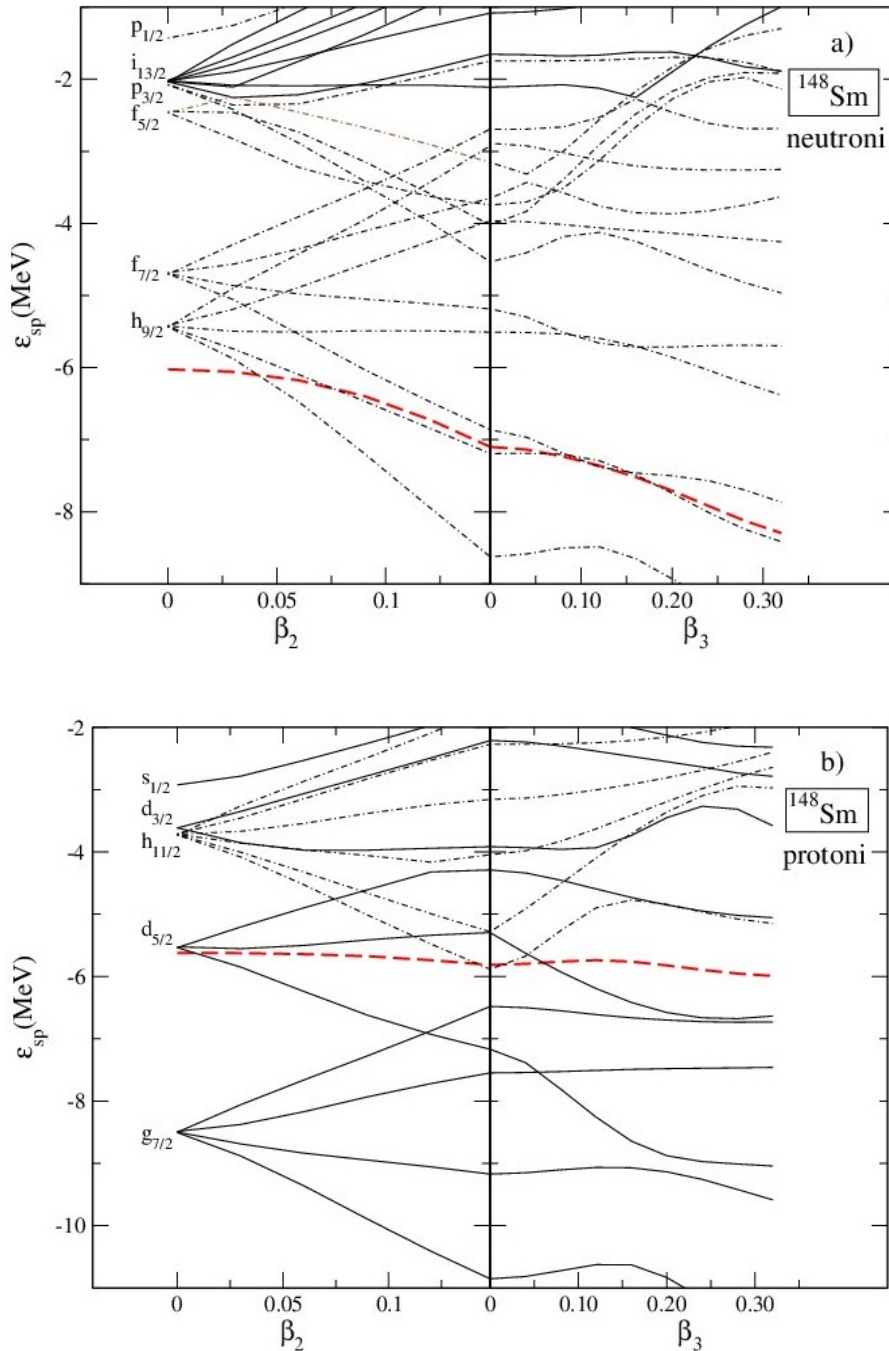
jezgra	E_{gs} (MeV)	β_2	β_3	E_{gs}^{exp} (MeV) [47]	β_2^{emp} [44]	β_3^{emp} [45]
^{146}Sm	-1211.59	-0.05	0	-1210.91	-	-
^{148}Sm	-1225.29	0.15	0	-1225.39	0.1423 ± 0.0030	0.12/0.15
^{150}Sm	-1239.69	0.20	0.12	-1239.25	0.1931 ± 0.0021	0.114/0.142
^{152}Sm	-1253.45	0.30	0	-1253.10	0.3064 ± 0.0027	0.072
^{154}Sm	-1267.26	0.35	0	-1266.94	0.3410 ± 0.0020	0.058
^{156}Sm	-1280.18	0.35	0	-1279.99	-	-

Tablica 4.1: Energija vezanja, kvadrupolna i oktopolna deformacija osnovnih stanja izotopnog lanca atomskih jezgara samarija na razini srednjega polja. Dobivene su vrijednosti uspoređene s dostupnim eksperimentalnim i empirijskim vrijednostima. Za jezgre kod kojih postoji više različitih empirijskih procjena navedene su najmanja i najveća vrijednost.

Energije vezanja izvrsno se slažu s eksperimentalnim vrijednostima, uz relativnu pogrešku koja je za cijeli izotopni lanac manja od 0.06%. Također, dobivene vrijednosti ravnotežnih kvadrupolnih deformacija izvrsno reproduciraju dostupne empirijske vrijednosti. Empirijske vrijednosti parametra oktopolne deformacije β_3 za jezgru ^{150}Sm variraju između 0.114 i 0.142, ovisno o eksperimentu. Prema tome, dobivena vrijednost $\beta_3 = 0.12$ predstavlja vrlo točnu procjenu stvarne vrijednosti. Osim toga, empirijska oktopolna deformacija u jezgri ^{154}Sm vrlo je mala, u skladu s odgovarajućim refleksijski simetričnim β_3 -mekanim minimumom srednjega polja sa slike 4.3. S druge strane, empirijske procjene i neki teorijski računi [7, 9] predviđaju postojanje oktopolne deformacije u osnovnim stanjima atomskih jezgara ^{148}Sm i ^{152}Sm . Općenito je poznato da je promjena oblika atomskih jezgara u izotopnom lancu na razini srednjega polja određena promjenom odgovarajućih jednočestičnih spektara. Konkretno, pojava deformiranog minimuma povezana je s postojanjem procjepa ili područja smanjene gustoće jednočestičnih stanja u blizini Fermijeve razine. Na slikama 4.4, 4.5 i 4.6 prikazane su jednočestične energijske razine neutrona i protona u atomskim jezgrama ^{150}Sm , ^{148}Sm i ^{152}Sm . Pune linije odgovaraju stanjima pozitivnog, a crta-točka linije stanjima negativnog pariteta. Fermijeva je razina predstavljena isprekidanom crvenom linijom. Na lijevoj strani svake slike prikazana je ovisnost jednočestičnih energija o kvadrupolnoj deformaciji β_2 za konfiguraciju bez oktopolne deformacije, sve do točke koja odgovara minimumu srednjeg polja. Na desnim je stranama prikazana ovisnost jednočestičnih energija o oktopolnoj deformaciji β_3 , pri čemu je vrijednost β_2 određivana samosuglasno.

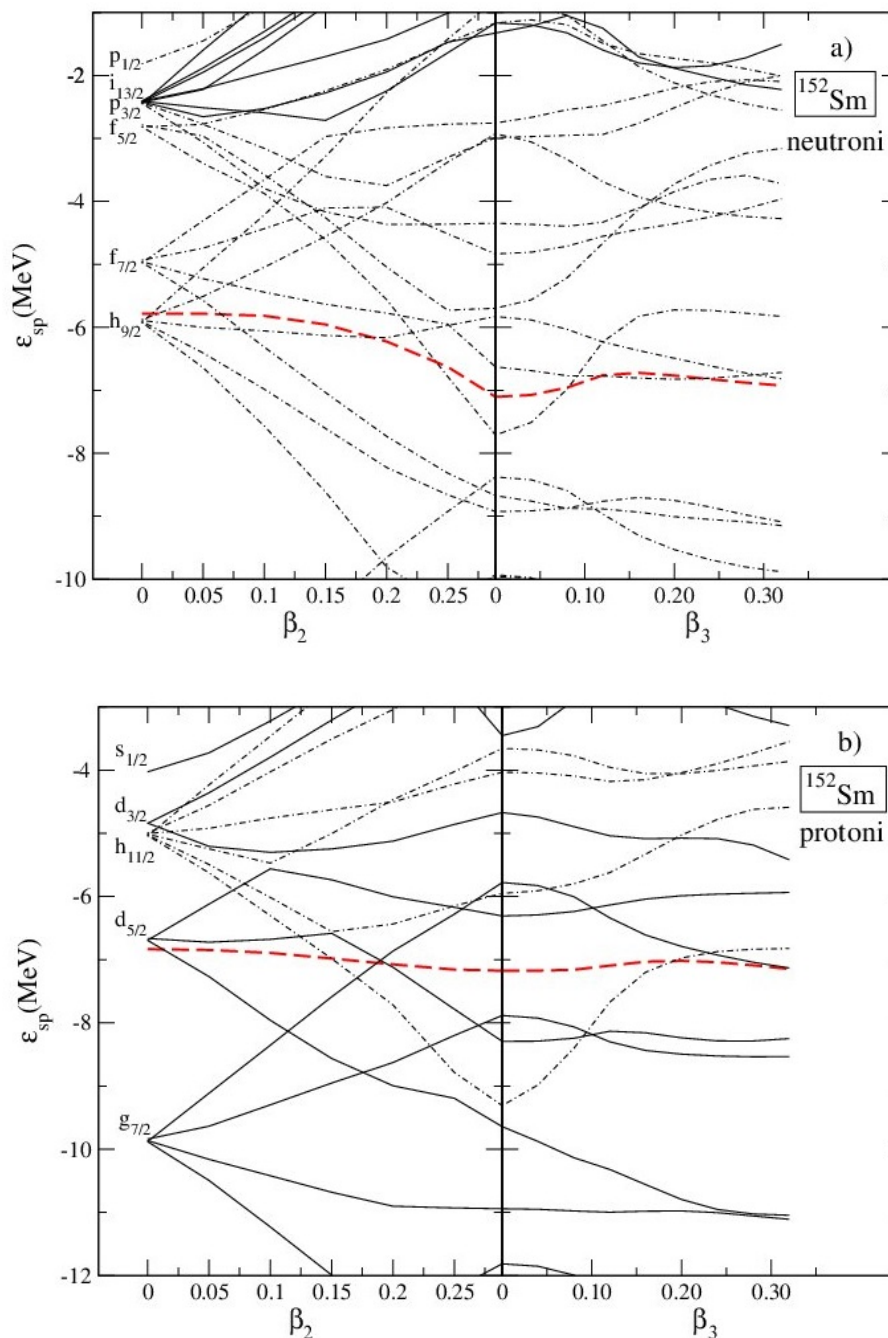


Slika 4.4: Jednočestične energijske razine neutrona (a) i protona (b) u atomskoj jezgri ^{150}Sm . Pune linije odgovaraju stanjima pozitivnog, a crta-točka linije stanjima negativnog pariteta. Fermijeva je razina predstavljena isprekidanom crvenom linijom. Na lijevoj strani svake slike prikazana je ovisnost jednočestičnih energija o kvadrupolnoj deformaciji β_2 za konfiguraciju bez okupolne deformacije, sve do točke koja odgovara minimumu srednjeg polja. Na desnim je stranama prikazana ovisnost jednočestičnih energija o okupolnoj deformaciji β_3 , pri čemu je vrijednost β_2 određivana samosuglasno.



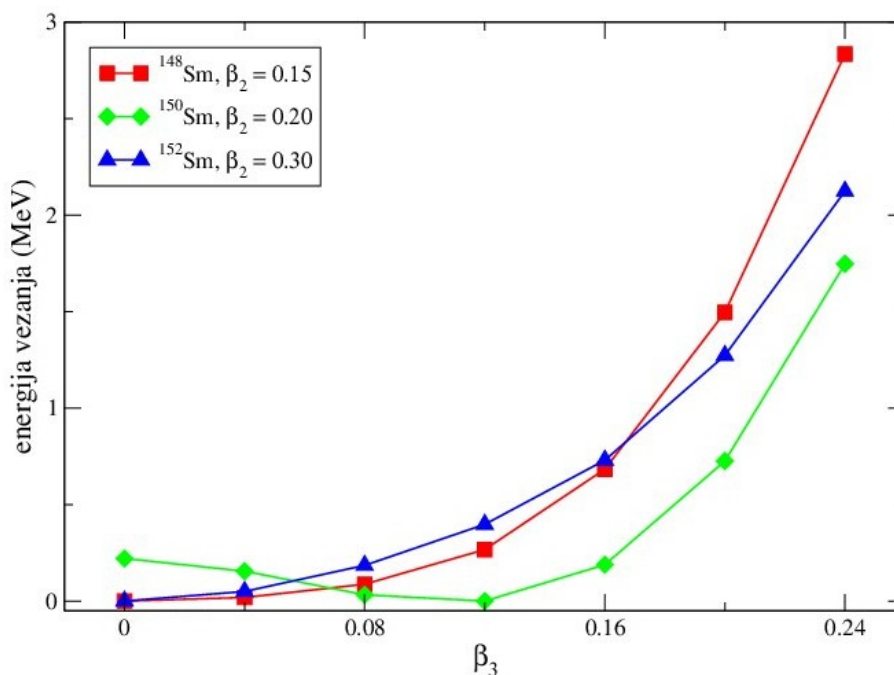
Slika 4.5: Kao na slici 4.4, ali za atomsku jezgru ^{148}Sm .

Kao što je prikazano na slici 4.4, u neutronsom spektru jezgre ^{150}Sm postoji relativno velik energijski procjep između posljednjeg popunjenog i prvog praznog stanja koji je praktički neovisan o vrijednosti β_3 . U odgovarajućem protonskom spektru postoji tek manji procjep u blizini Fermijeve razine, i to na velikim oktopolnim deformacijama. Kao rezultat međugre ovih dvaju doprinosa, u konačnici se formira oktopolno deformirani minimum sa slike 4.2. Dodavanjem ili oduzimanjem dvaju neutrona protonski se spektri neznatno mijenjaju. U jezgri ^{148}Sm postojeći se procjep na velikim oktopolnim deformacijama nešto poveća, dok se u jezgri ^{152}Sm otvori procjep na ma-



Slika 4.6: Kao na slici 4.4, ali za atomsku jezgru ^{152}Sm .

njim oktopolnim deformacijama. Međutim, procjep u neutronsom spektru istovremeno u potpunosti nestane, pa se u slučaju ove dvije jezgre formira simetričan minimum. Priroda ovih minimuma jasno je vidljiva na slici 4.7, gdje je prikazana ovisnost energije vezanja atomskih jezgara $^{148-152}\text{Sm}$ o oktopolnoj deformaciji. Kvadrupolne su deformacije pri tome fiksirane na vrijednosti iz minimuma srednjega polja. Jezgra ^{150}Sm ima vrlo plitak minimum u energiji vezanja na deformaciji $\beta_3 = 0.12$, a simetrična konfiguracija nalazi se na oko 0.25 MeV višoj energiji. Jezgre ^{148}Sm i ^{152}Sm imaju simetrične minimume i vrlo mekanu ovisnost energije vezanja o oktopolnoj deformaciji. Općenito, energijski minimumi na razini srednjega polja svih jezgara sa



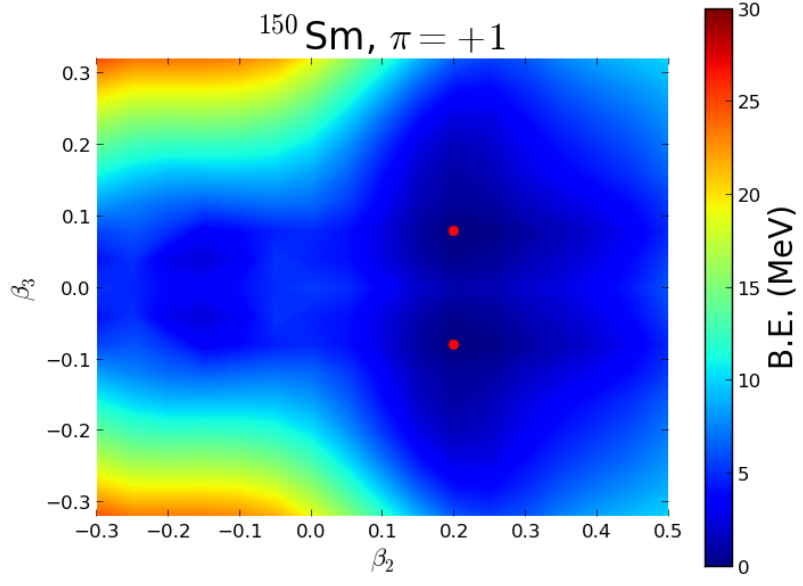
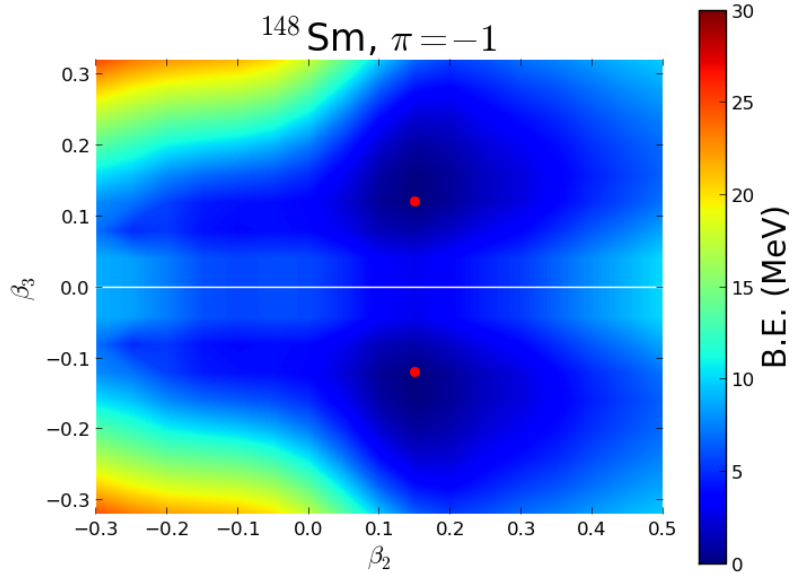
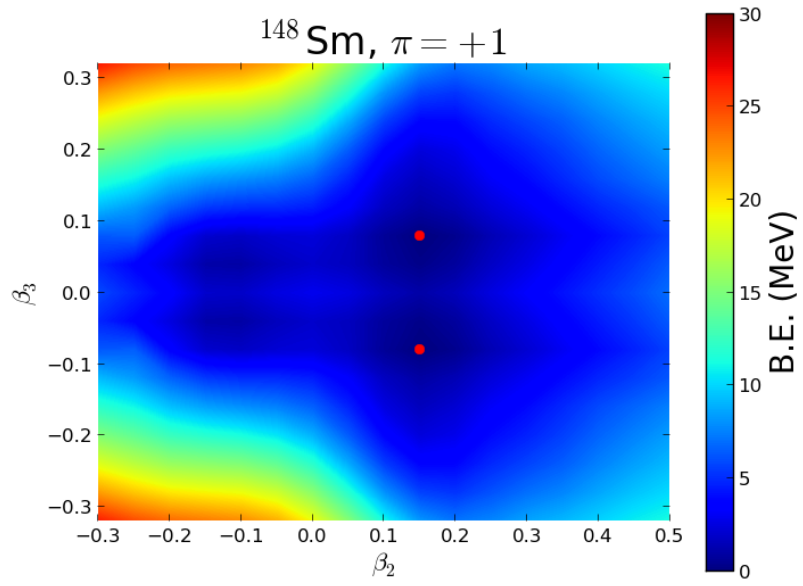
Slika 4.7: Energije vezanja atomskih jezgara $^{148-152}\text{Sm}$ u ovisnosti o oktopolnoj deformaciji. Kvadrupolne deformacije fiksirane su na vrijednosti iz minimuma srednjega polja (tablica 4.1). Za svaku su jezgru energije normirane s obzirom na energiju vezanja apsolutnog minimuma.

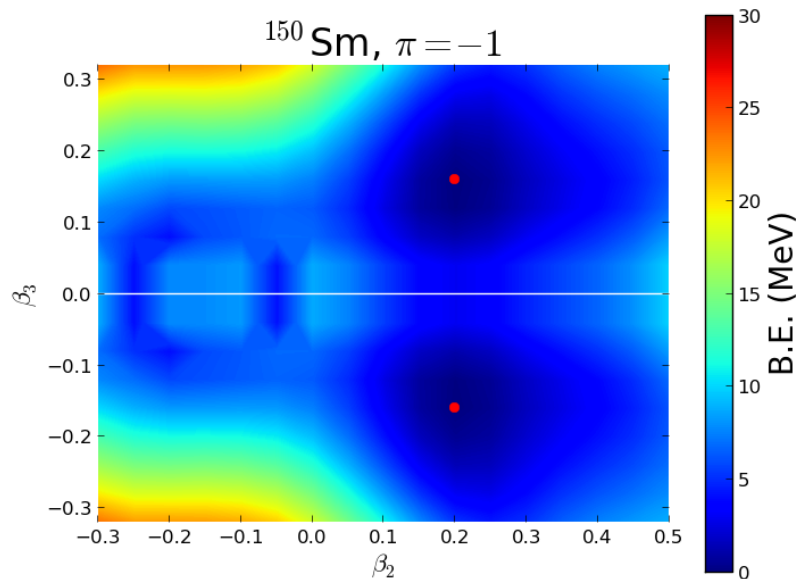
slika 4.2 i 4.3 vrlo su mekani u β_3 smjeru. Ovo upućuje na činjenicu da pri opisu izotopnog lanca jezgara samarija obje vrste dinamičkih korelacija igraju bitnu ulogu. U sljedeća dva potpoglavlja prvo ćemo uzeti u obzir korelacije povezane s ponovnim uspostavljanjem simetrija, a potom i korelacije povezane s miješanjem konfiguracija.

4.2 Projekcija na paritet

U našem su računu na razini srednjega polja slomljene dvije prostorne simetrije: rotacijska simetrija s kvadrupolnom deformacijom kao relevantnim parametrom te refleksijska simetrija (paritet) s oktopolnom deformacijom kao relevantnim parametrom. Budući da su plohe energija vezanja na slikama 4.2 i 4.3 najmekše upravo u β_3 smjeru, najveći bi doprinos ukupnoj korelacijskoj energiji trebao doći od ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta. Naravno, poželjno bi bilo istovremeno ponovno uspostaviti sve slomljene simetrije, uključujući rotacijsku simetriju i dobar broj čestica. Jedno takvo istraživanje prijelaza oktopolnih oblika u atomskoj jezgri ^{224}Ra nedavno je prijavljeno u [48]. Međutim, takav je postupak računski iznimno zahtjevan i nadilazi opseg ovoga rada.

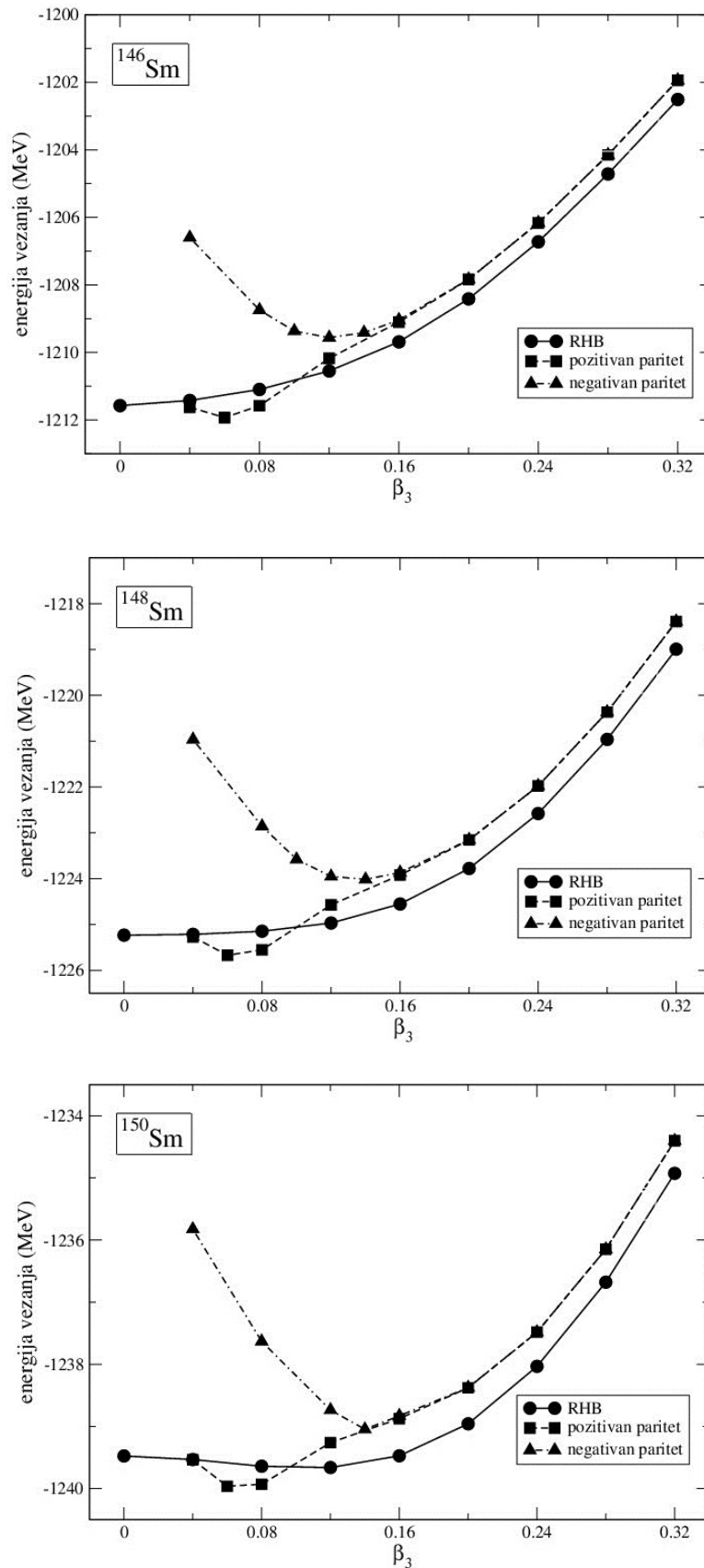
Kao što je već rečeno, dobar je paritet moguće ponovno uspostaviti i bez eksplicitnog korištenja odgovarajućeg operatora projekcije, na način da se za svaku β_3 deformaciju istovremeno uzme u obzir i odgovarajuća $-\beta_3$ deformacija. Na slici 4.8 prikazane su energije vezanja stanja koja odgovaraju projekcijama RHB valne funkci-



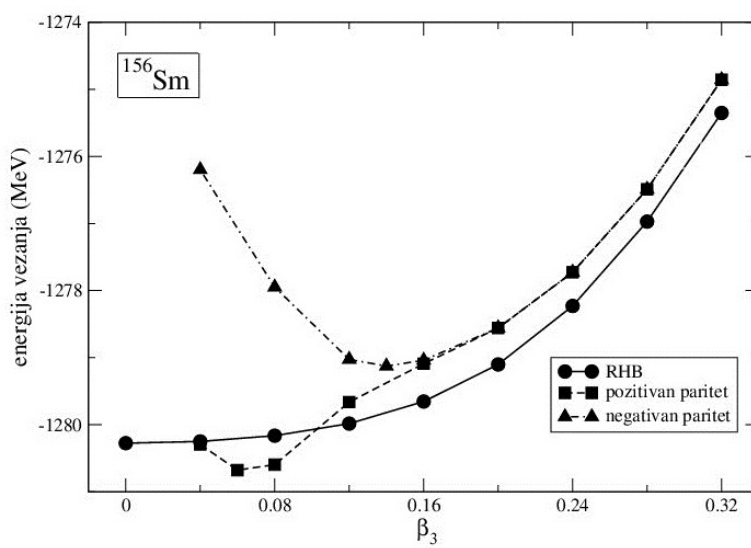
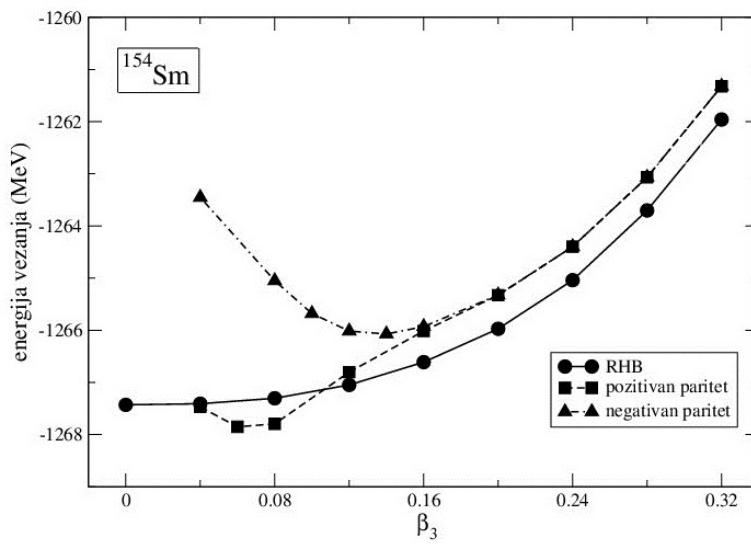
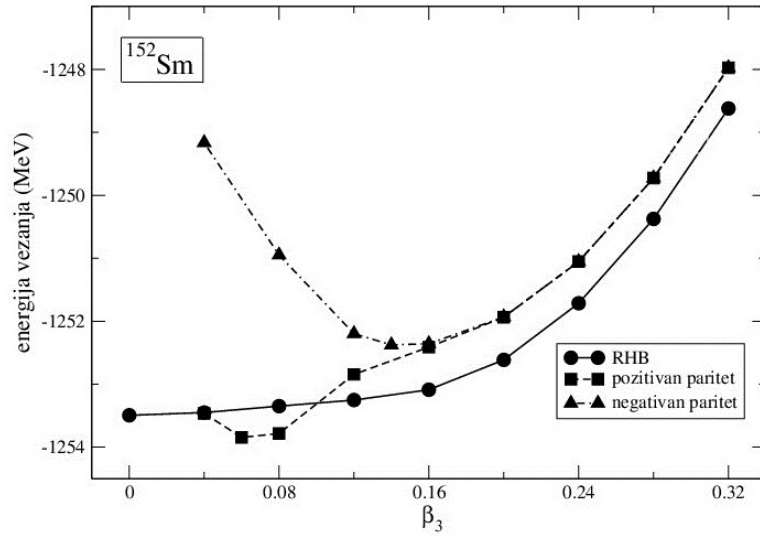


Slika 4.8: Energije vezanja stanja koja odgovaraju projekcijama RHB valnih funkcija na pozitivan i negativan paritet za atomske jezgre ^{148}Sm i ^{150}Sm u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini. Za svaku su jezgru energije normirane s obzirom na energiju vezanja apsolutnog minimuma. Boja označava energiju svake točke na površini u odnosu na energiju apsolutnog minimuma (crvena točka).

je na pozitivan i negativan paritet za atomske jezgre ^{148}Sm i ^{150}Sm u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini. Pri tome duž $\beta_3 = 0$ osi projekcija na pozitivan paritet nije potrebna zato što su odgovarajuće kvadrupolno deformirane RHB valne funkcije već svojstvena stanja operatora pariteta sa svojstvenom vrijednošću $\pi = +1$. Iz istoga razloga projekcija na negativan paritet duž $\beta_3 = 0$ osi nema fizikalnog smisla, pa nije niti prikazana na energijskim ploham na slici 4.8. Usporedbom ovih ploha s plohama dobivenim na razini srednjega polja sa slike 4.2 može se vidjeti kako ponovno uspostavljanje dobroga pariteta utječe na izgled atomske jezgre. S jedne strane, ravnotežne kvadrupolne deformacije ostale su vrlo slične onima dobivenim RHB računom. Međutim, u β_3 smjeru došlo je do značajnih promjena. Konkretno, u jezgri ^{148}Sm oba projicirana stanja dobila su oktupolno deformiran minimum. On je za parno stanje plitak i nalazi se na manjoj oktupolnoj deformaciji, dok je za neparno stanje nešto dublji i smješten na većoj oktupolnoj deformaciji. Parno stanje jezgre ^{150}Sm ima apsolutni minimum na sličnoj oktupolnoj deformaciji kao i odgovarajuće RHB stanje, no energijska ploha više nije tako mekana u β_3 smjeru. Projekcijom RHB stanja na negativan paritet u jezgri ^{150}Sm apsolutni je minimum postao dublji i pomaknuo se prema većim oktupolnim deformacijama, u skladu s rezultatima iz [9]. Priroda ovih minimuma još je bolje vidljiva na slikama 4.9 i 4.10, gdje su prikazane energije vezanja projiciranih stanja, kao i energije vezanja RHB stanja, u ovisnosti o oktupolnoj deformaciji za cijeli izotopni lanac jezgara samarija. Pri tome je kvadrupolna deformacija za svaku jezgru određivana samosuglasno. U svim jezgrama projekcije na negativan paritet imaju dobro definiran oktupolno deformiran minimum na vrijednostima β_3 u raspo-



Slika 4.9: Energije vezanja atomskih jezgara $^{146-150}\text{Sm}$ u ovisnosti o oktrupolnoj deformaciji. Energije koje odgovaraju RHB valnim funkcijama označene su krugovima i povezane punom linijom, dok su projekcije na pozitivan (negativan) paritet označene kvadratima (trokutima) i povezane isprekidanom (crta-točka) linijom. Kvadrupolne su deformacije za svaku jezgru određivane samosuglasno.



Slika 4.10: Kao na slici 4.9, ali za atomske jezgre ^{152–156}Sm.

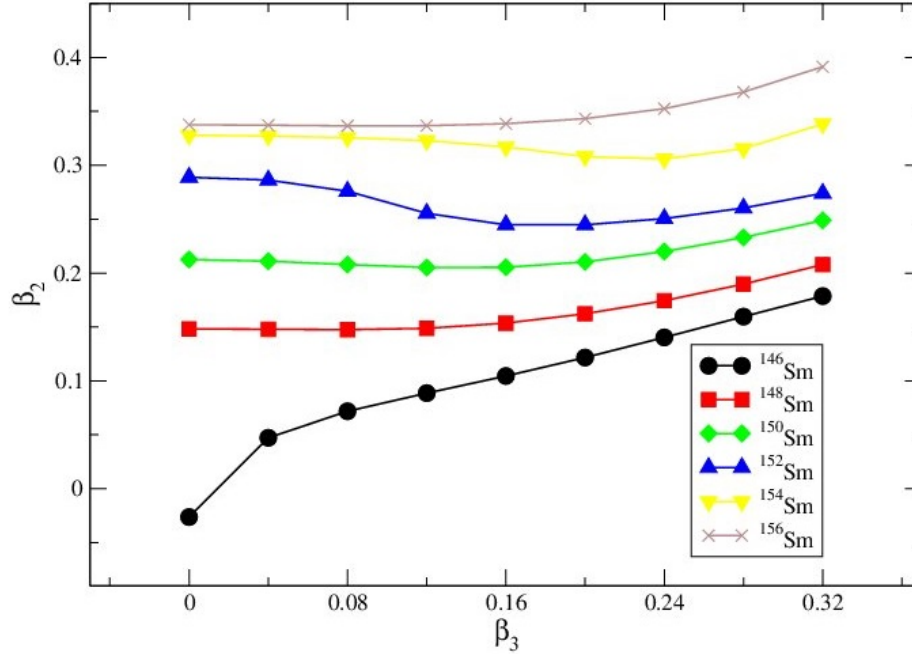
nu 0.12 – 0.14. Također, karakterističan se minimum pojavljuje i pri projekcijama na pozitivan paritet, uvijek na manjim vrijednostima β_3 . Prema tome, intrinzična stanja različitoga pariteta imaju i različite oktrupolne deformacije. Korelacijska energija koja potječe od ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta definirana je jednačbom (3.1) i manja je od 0.5 MeV duž cijelog izotopnog lanca. Drugi veći doprinos ukupnoj korelacijskoj energiji potječe od miješanja oktrupolno deformiranih konfiguracija.

4.3 Miješanje konfiguracija

U okviru metode generirajućih koordinata moguće je istovremeno uzeti u obzir obje vrste dinamičkih korelacija. Pri tome se prirodno postavlja pitanje odabira prikladne generirajuće koordinate. Premda ova metoda načelno može obuhvatiti proizvoljan broj generirajućih koordinata, već istovremeno uključivanje dvaju stupnjeva slobode predstavlja računski vrlo zahtjevan pothvat. Zbog toga smo se u ovome radu odlučili zadržati na oktrupolnoj generirajućoj koordinati, a u nastavku istraživanja namjeravamo eksplicitno uključiti u račun i kvadrupolnu koordinatu, kao i njihovo vezanje.

Naravno, opravdanost ovakvog pristupa ključno ovisi o međuodnosu kvadrupolnog i oktrupolnog stupnja slobode u promatranoj jezgri. Kao što je već rečeno, za izotopni lanac jezgara samarija trenutno nije do kraja razjašnjena uloga kvadrupolno-oktrupolnog vezanja, odnosno nije poznato mogu li se i u kojoj mjeri ova dva stupnja slobode smatrati neovisnima jedan o drugome. Dobar pokazatelj njihova međuodnosa predstavlja ovisnost ravnotežne kvadrupolne deformacije o nametnutoj oktrupolnoj deformaciji na razini srednjega polja, koja je za cijeli izotopni lanac prikazana na slici 4.11. Ta je ovisnost za jezgre $^{148-156}\text{Sm}$ vrlo mekana, što opravdava pretpostavku da u tim jezgrama ne postoji jako vezanje ovih dvaju stupnjeva slobode. Jedini izotop u kojemu ravnotežna kvadrupolna deformacija značajno varira s promjenom oktrupolne deformacije jest ^{146}Sm , pa bi u ovoj jezgri kvadrupolno-oktrupolno vezanje moglo igrati veću ulogu. Također, u [9] je povezanost kvadrupolnog i oktrupolnog stupnja slobode u izotopima samarija ispitana izravno, na način da su korelacijske energije dobivene dvodimenzionalnim GCM računom uspoređene sa zbrojem korelacijskih energija koje su dobivene oktrupolnim, odnosno kvadrupolnim jednodimenzionalnim GCM računom. Energije dobivene na ova dva načina vrlo su slične, što upućuje na pojavu odvezanosti kvadrupolnog i oktrupolnog stupnja slobode u izotopima samarija. Valja istaknuti da je razlika korelacijskih energija u tome računu najveća upravo za izotop ^{146}Sm , u skladu s prethodnom raspravom. Ova dva rezultata predstavljaju dovoljan razlog da u nastavku rada zanemarimo vezanje oktrupolnog stupnja slobode na kvadrupolni te iskoristimo metodu generirajućih koordinata kako bismo pomiješali različite oktrupolno deformirane konfiguracije.

Na slikama 4.12 i 4.13 prikazane su kolektivne amplitude vjerojatnosti dvaju najnižih stanja u izotopnom lanca jezgara samarija dobivene jednodimenzionalnim GCM računom. U računu su stanja u_k sa svojstvenim vrijednostima $\epsilon < 10^{-4}$ uklonjena iz baze, a odabrana je mreža $-0.32 \leq \beta_3 \leq 0.32$ uz korake $\Delta\beta_3 = 0.04$.

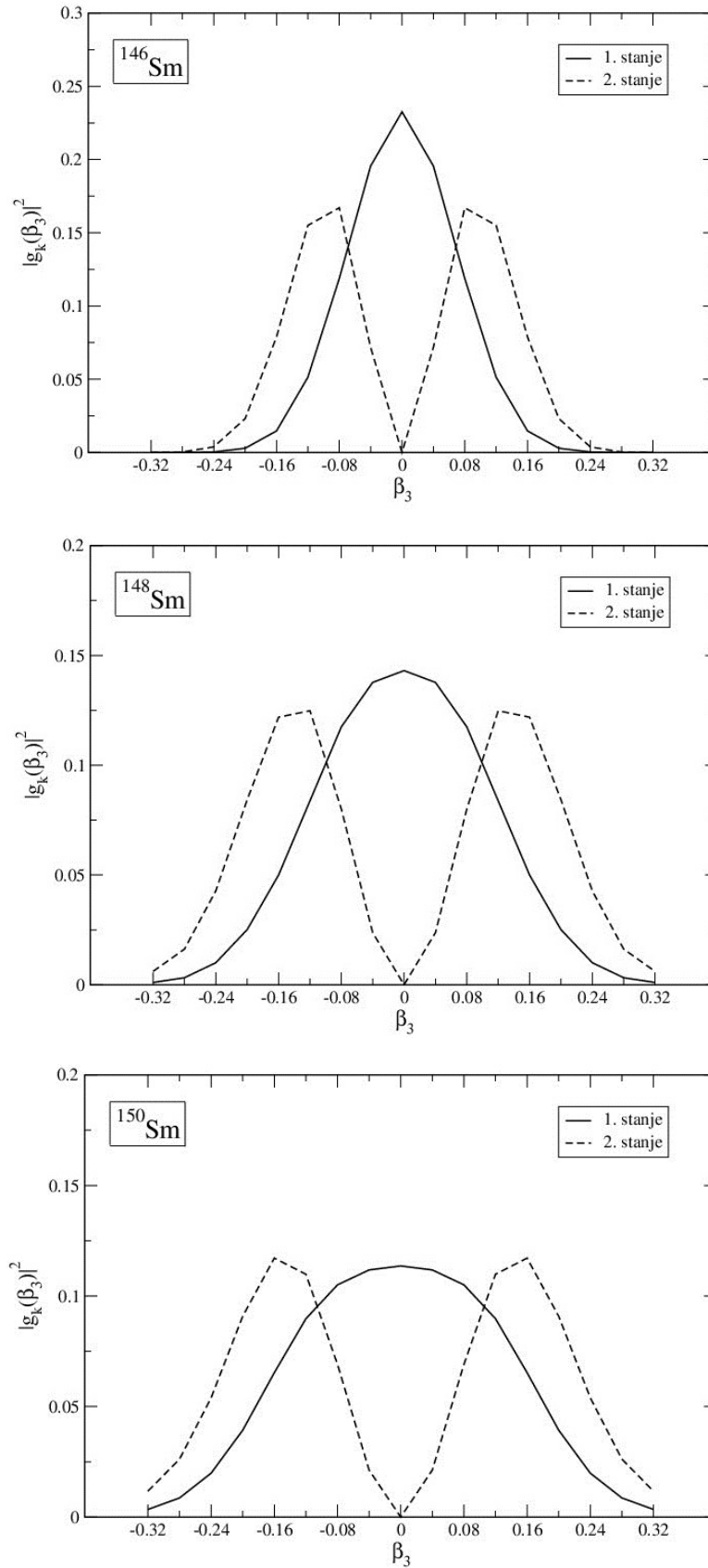


Slika 4.11: Ovisnost ravnotežne kvadrupolne deformacije o nametnutoj oktrupolnoj deformaciji u izotopnom lancu atomskih jezgara samarija na razini srednjega polja.

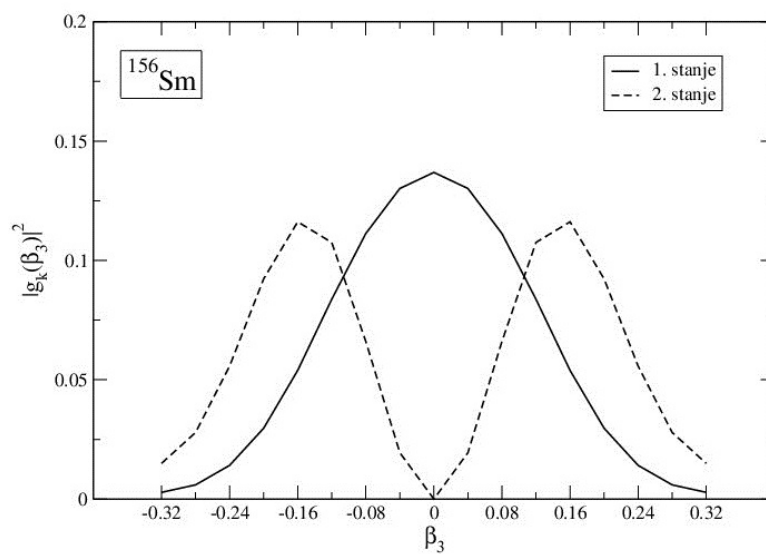
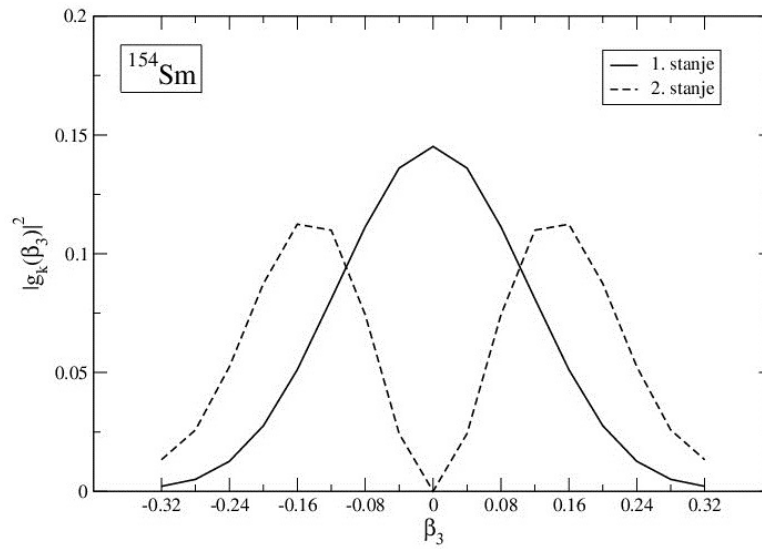
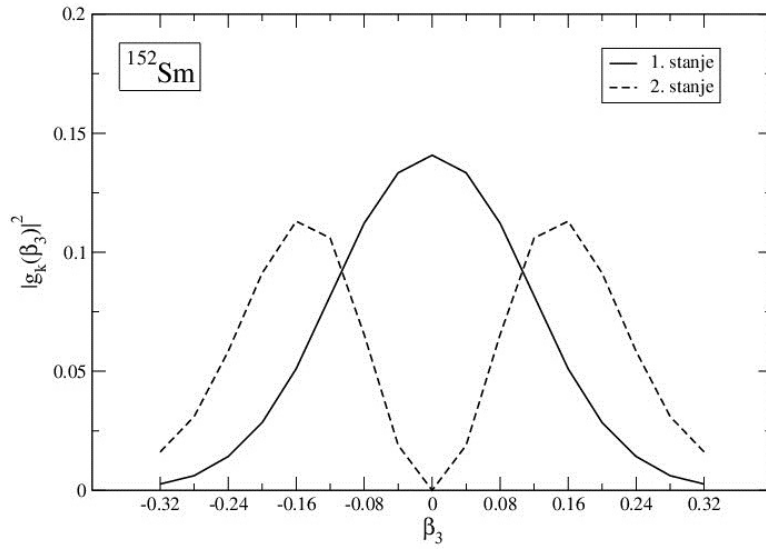
Pri tome su kvadrupolne deformacije za svaku jezgru fiksirane na vrijednosti iz minimuma srednjega polja. Kolektivne amplitude vjerojatnosti za slučaj kad su kvadrupolne deformacije određivane samosuglasno izgledaju vrlo slično pa ovdje nisu prikazane. Kolektivne amplitude vjerojatnosti osnovnih stanja duž cijelog izotopnog lanca imaju globalni maksimum na $\beta_3 = 0$. Ovaj je maksimum najizraženiji u gotovo sferičnoj jezgri ^{146}Sm , dok je u jezgri ^{150}Sm vrlo mekan u β_3 smjeru. S druge strane, globalni maksimumi neparnih stanja uvijek se nalaze na vrijednostima β_3 različitima od nule. Iz poznavanja kolektivnih amplituda vjerojatnosti $|g_k|^2$ moguće je izračunati dinamičku vrijednost parametra oktrupolne deformacije $\langle\beta_3\rangle$ u određenom stanju. Ona je jednaka očekivanoj vrijednosti oktrupolnog operatora u odgovarajućem GCM stanju i može se izračunati iz relacije:

$$\langle\beta_3\rangle = 2 \cdot \sum_k \beta_3^k |g_k|^2, \quad (4.1)$$

gdje se sumira po svim pozitivnim vrijednostima β_3^k na mreži. Dinamičke vrijednosti parametara oktrupolne deformacije u izotopnom lancu atomskih jezgara samarija za prva dva kolektivna stanja navedene su u tablici 4.2. Pri tome je β_2 određivan na dva različita načina, a dobivene se vrijednosti uglavnom jako dobro podudaraju. Također, zanimljivo je usporediti dinamičku oktrupolnu deformaciju osnovnog ($\pi = +1$) stanja s odgovarajućim deformacijama dobivenim na razini srednjega polja, kao i s empirijskim deformacijama iz tablice 4.1. Na razini srednjega polja, oktrupolno je deformirana samo jezgra ^{150}Sm . Međutim, uključivanjem kolektivnih korelacija očekivana vrijednost oktrupolne deformacije postaje različitom od nule u osnovnim stanjima svih



Slika 4.12: Kolektivne amplitude vjerojatnosti dvaju najnižih GCM stanja u atomskim jezgrama $^{146-150}\text{Sm}$. Kvadrupolne su deformacije za svaku jezgru fiksirane na vrijednosti iz minimuma srednjega polja (tablica 4.1).



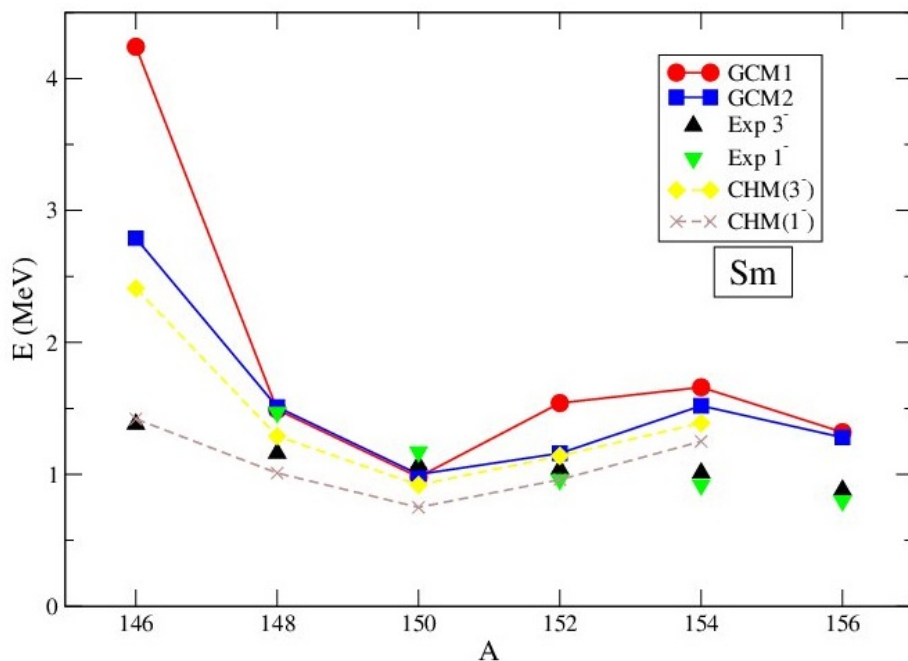
Slika 4.13: Kao na slici 4.12, ali za atomske jezgre $^{152-156}\text{Sm}$.

jezgra	$\langle\beta_3\rangle_{\pi=+1}^1$	$\langle\beta_3\rangle_{\pi=+1}^2$	$\langle\beta_3\rangle_{\pi=-1}^1$	$\langle\beta_3\rangle_{\pi=-1}^2$
^{146}Sm	0.053	0.056	0.106	0.134
^{148}Sm	0.083	0.084	0.151	0.154
^{150}Sm	0.101	0.101	0.161	0.164
^{152}Sm	0.088	0.092	0.166	0.167
^{154}Sm	0.086	0.084	0.159	0.157
^{156}Sm	0.089	0.089	0.164	0.163

Tablica 4.2: Dinamičke vrijednosti parametara oktrupolne deformacije $\langle\beta_3\rangle$ u izotopnom lancu atomskih jezgara samarija za prva dva kolektivna stanja. Vrijednosti dobivene fiksiranjem β_2 na vrijednosti iz minimuma srednjega polja (prvi i treći stupac) uspoređene su s vrijednostima dobivenim samosuglasnim računanjem β_2 (drugi i četvrti stupac).

promatranih jezgara. Pri tome naš račun izvrsno reproducira empirijski trend duž cijelog izotopnog lanca, a izračunate vrijednosti oktrupolnih deformacija u jezgrama ^{148}Sm i ^{150}Sm (^{152}Sm i ^{154}Sm) nešto su niže (više) od odgovarajućih empirijskih vrijednosti. Valja uočiti kako se uključivanjem kolektivnih korelacija oktrupolna deformacija u jezgri ^{150}Sm smanjila u odnosu na onu dobivenu na razini srednjega polja. Ovo je u skladu s računom iz [9], gdje je slična pojava uočena za jezgre ^{148}Sm i ^{150}Sm koje su bile oktrupolno deformirane na razini srednjega polja.

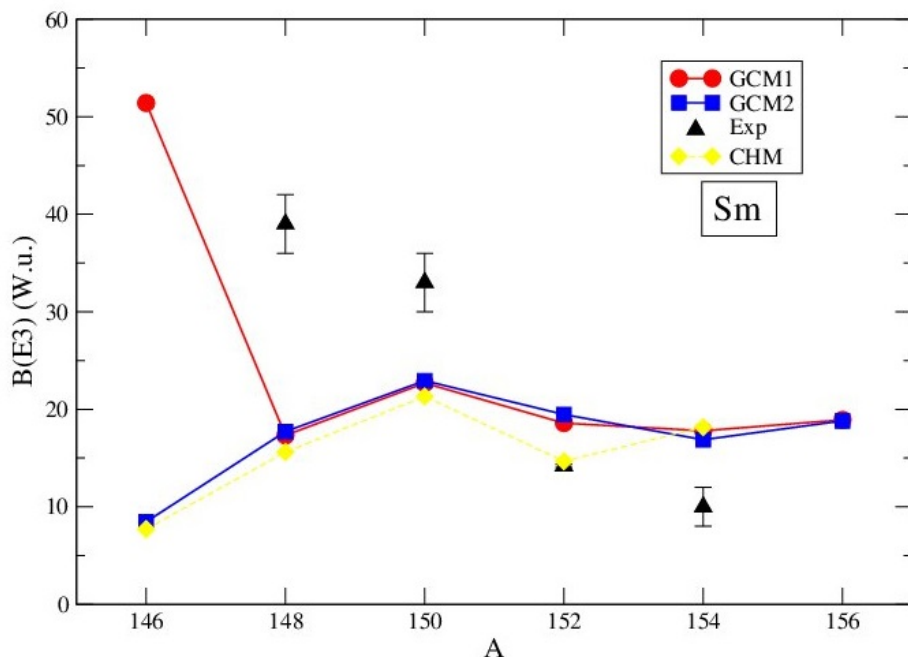
Temeljna fizikalna opservabla koju je moguće usporediti s eksperimentalnim vrijednostima jest energija E_3 , koja odgovara razlici energija prvog neparanog i prvog parnog stanja u kolektivnom spektru. Na slici 4.14 prikazane su E_3 vrijednosti za izotopni lanac jezgara samarija dobivene GCM računom, a pri tome je ravnotežna kvadrupolna deformacija određivana na dva različita načina. Dobiveni se rezultati općenito dobro slažu i do značajnijeg odstupanja dolazi jedino u slučaju jezgre ^{146}Sm . Također, podudaranje s dostupnim eksperimentalnim podacima za položaje prvih 3^- i 1^- stanja jest zadovoljavajuće. Podudaranje je posebno dobro u jezgrama ^{148}Sm i ^{150}Sm , koje su kvadrupolno deformirane i kod kojih oktrupolni stupanj slobode igra najveću ulogu. Dobiveni bi se rezultati mogli dodatno približiti eksperimentalnima ponovnim uspostavljanjem rotacijske simetrije, kao i uključivanjem u račun kvadrupolno-oktrupolnog vezanja. S druge strane, ovakav račun uopće nije prikladan za opis gotovo sferične jezgre ^{146}Sm zato što pretpostavlja postojanje stabilne kvadrupolne deformacije u jezgri. Bolji bi se rezultati vjerojatno mogli postići u okviru kvazičestične aproksimacije nasumičnih faza [50], gdje bi oktrupolno deformirano stanje odgovaralo maloj oscilaciji oko sferosimetričnog osnovnog stanja. Valja napomenuti i da naši rezultati u potpunosti reproduciraju teorijski trend iz [9], a dobrim dijelom i konkretne vrijednosti. Osim toga, zanimljivo je usporediti rezultate dobivene GCM računom s rezultatima dobivenim u modelu kolektivnog Hamiltonija-



Slika 4.14: Razlike energija prvog neparnog i prvog parnog stanja E_3 u izotopnom lancu atomskih jezgara samarija dobivene jednodimenzionalnim GCM računom. Pri tome su u prvom slučaju kvadrupolne deformacije fiksirane na vrijednosti iz minimuma srednjega polja (tablica 4.1), a u drugome su određivane samosuglasno. Dobi-vene su vrijednosti uspoređene s dostupnim eksperimentalnim podacima za položaje prvih 3^- i 1^- stanja u promatranim jezgrama [49], kao i s položajima prvih 3^- i 1^- stanja dobivenim u modelu kolektivnog Hamiltonijana.

na (detalji modela dani su u dodatku A). Budući da u okviru ovoga modela kolektivna stanja imaju dobro definiran angularni moment, na slici 4.14 prikazane su izračunate energije prvih 3^- i 1^- stanja za izotope $^{146-154}\text{Sm}$. Pri tome je za efektivno međudjelovanje na razini srednjega polja također odabran DD-PC1 funkcional. Međutim, treba istaknuti da se ovdje radi o dva potpuno različita modela koja nadilaze razinu srednjega polja i zbog toga nije *a priori* očito da će dati iste rezultate. Unatoč tome, rezultati dobiveni u okviru ova dva modela izvrsno se podudaraju. Jedina je značajna razlika u tome da model kolektivnog Hamiltonijana sustavno predviđa niže energije, što je i očekivano jer on uključuje kvadrupolno-oktupolno vezanje kao dodatni stupanj slobode.

Na slici 4.15 prikazane su snage električnih oktupolnih prijelaza $B(E3, 3^- \rightarrow 0^+)$ u izotopnom lancu jezgara samarija dobivene GCM računom, a ravnotežna je vrijednost kvadrupolne deformacije opet određivana na dva različita načina. Kao i u slučaju E_3 vrijednosti, dobiveni se rezultati dobro slažu za sve jezgre osim za jezgru ^{146}Sm . Također, eksperimentalni su podaci reproducirani sa zadovoljavajućom točnošću, posebno za jezgre ^{152}Sm i ^{154}Sm . Općenito, snage oktupolnih prijelaza dobivene GCM računom duž cijelog izotopnog lanca vrlo su slične vrijednostima dobivenim u okviru modela kolektivnog Hamiltonijana, kao i teorijskim vrijednostima iz [9].

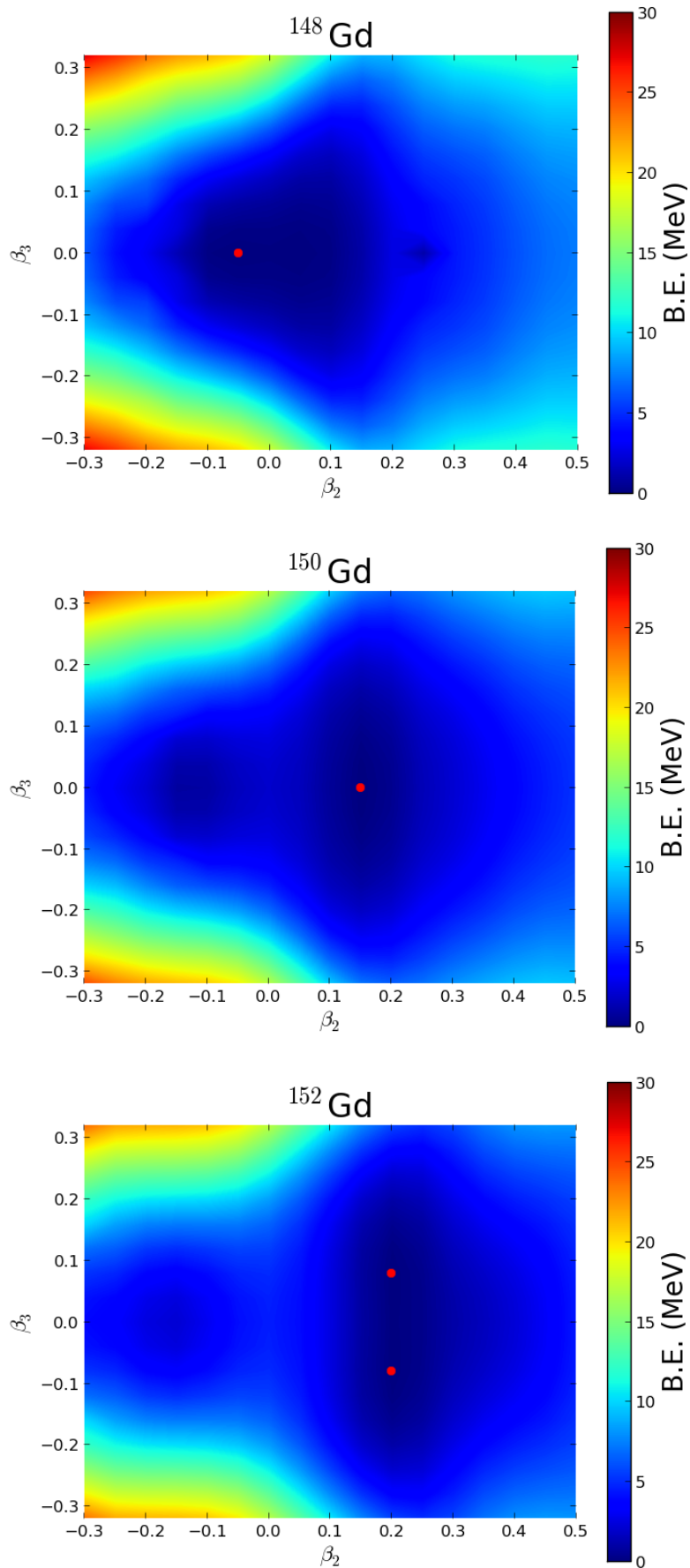


Slika 4.15: Snage električnih oktopolnih prijelaza $B(E3, 3^- \rightarrow 0^+)$ u izotopnom lancu atomskih jezgara samarija dobivene jednodimenzionalnim GCM računom. Pri tome su u prvom slučaju kvadrupolne deformacije fiksirane na vrijednosti iz minimuma srednjega polja (tablica 4.1), a u drugome su određivane samosuglasno. Dobivene su vrijednosti uspoređene s dostupnim eksperimentalnim podacima [45], kao i s rezultatima dobivenim u modelu kolektivnog Hamiltonijana.

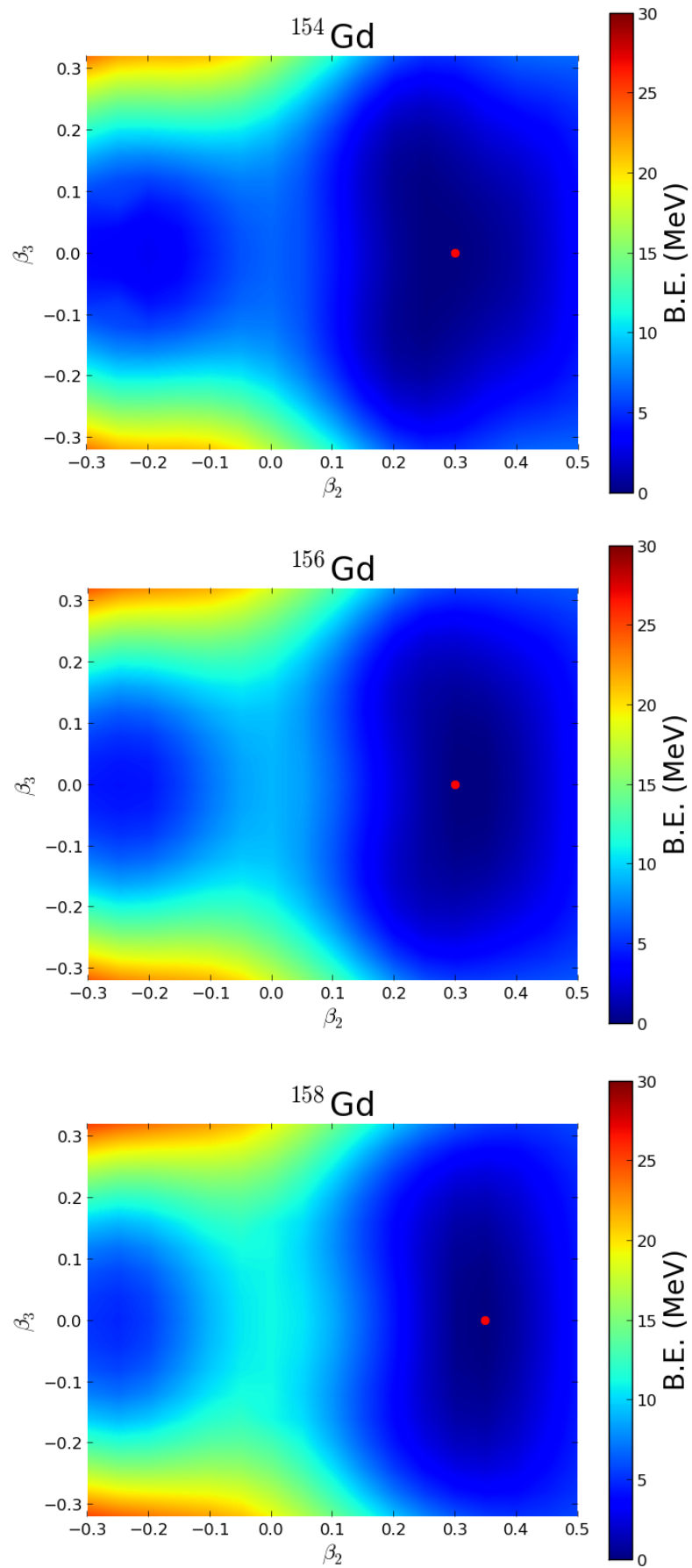
4.4 Oktupolna pobuđenja u izotopima gadolinija

Rezultati za izotopni lanac atomskih jezgara gadolinija vrlo su slični rezultatima za izotopni lanac jezgara samarija i ovdje ih nećemo sistematično iznositi. Umjesto toga, navest ćemo odabrane rezultate i usporediti ih s dostupnim empirijskim i eksperimentalnim vrijednostima.

Na slikama 4.16 i 4.17 prikazane su energije vezanja izotopnog lanca jezgara gadolinija u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjega polja. Pri tome je opet odabrana mreža $-0.30 \leq \beta_2 \leq 0.50$ i $-0.32 \leq \beta_3 \leq 0.32$, uz podjelu $\Delta\beta_2 = 0.05$ i $\Delta\beta_3 = 0.04$. Točke $(\beta_2, -\beta_3)$ energijski su ekvivalentne točkama (β_2, β_3) i nisu eksplicitno računane. Trend promjene oblika atomskih jezgara duž izotopnog lanca gadolinija jednak je onome u izotopnom lancu samarija. Konkretno, dodavanjem neutrona gotovo sferičnoj jezgri ^{148}Gd prvo dolazi do kvadrupolnog deformiranja u jezgri ^{150}Gd , potom se u jezgri ^{152}Gd formira i oktopolno deformiran minimum, a u konačnici jezgre $^{154-158}\text{Gd}$ zauzimaju izrazito izdužen kvadrupolno deformiran oblik. Eksperimentalne vrijednosti energija vezanja i ravnotežnih kvadrupolnih deformacija reproducirane su s izvrsnom preciznošću i navedene u tablici 4.3. Međutim, energijski minimumi duž cijelog izotopnog lanca vrlo su mekani u β_3 smjeru, što opet upućuje



Slika 4.16: Energije vezanja atomskih jezgara $^{148-152}\text{Gd}$ u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjega polja. Za svaku su jezgru energije normirane s obzirom na energiju vezanja apsolutnog minimuma. Boja označava energiju svake točke na površini u odnosu na energiju apsolutnog minimuma (crvena točka).

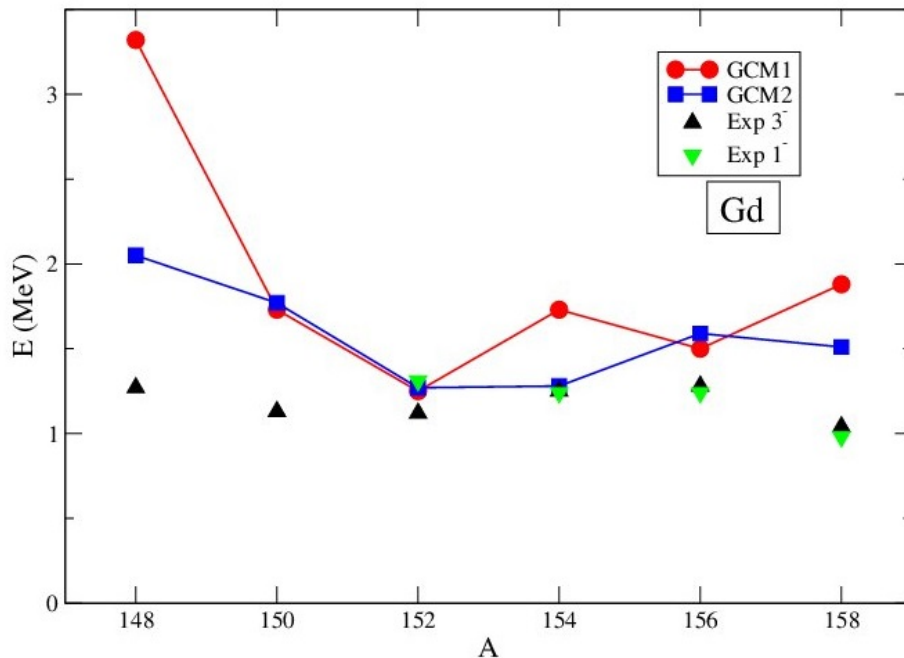


Slika 4.17: Kao na slici 4.16, ali za atomske jezgre $^{154-158}\text{Gd}$.

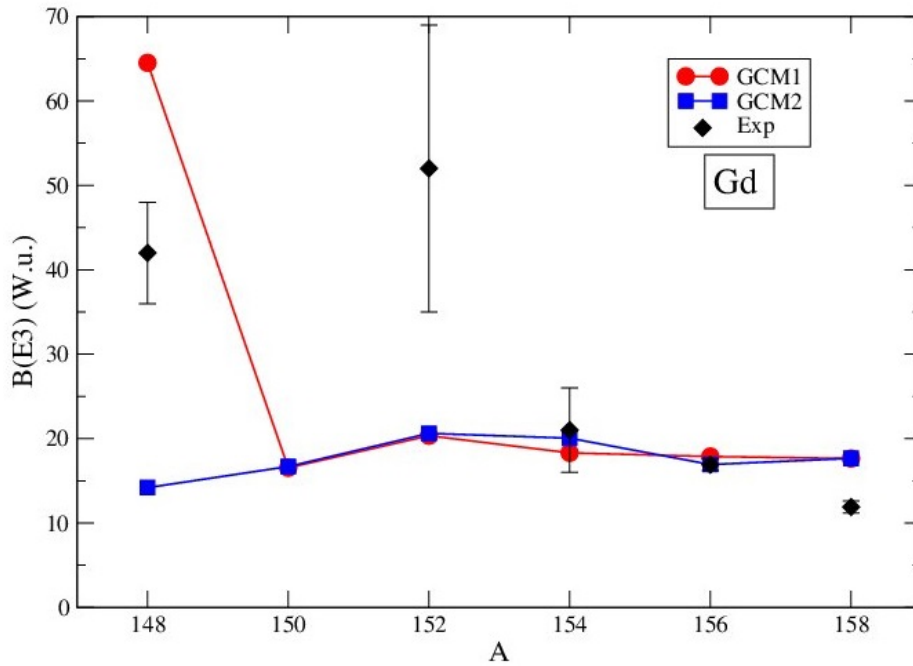
jezgra	E_{gs} (MeV)	β_2	β_3	E_{gs}^{exp} (MeV) [47]	β_2^{emp} [44]	β_3^{emp} [45]
^{148}Gd	-1220.71	-0.05	0	-1220.76	-	0.158
^{150}Gd	-1235.95	0.15	0	-1236.40	-	-
^{152}Gd	-1251.55	0.20	0.08	-1251.48	0.206 ± 0.009	-
^{154}Gd	-1266.47	0.30	0	-1266.63	0.3120 ± 0.0028	-
^{156}Gd	-1281.45	0.30	0	-1281.60	0.3378 ± 0.0018	-
^{158}Gd	-1295.73	0.35	0	-1295.89	0.3484 ± 0.0017	-

Tablica 4.3: Energija vezanja, kvadrupolna i oktopolna deformacija osnovnih stanja izotopnog lanca jezgara gadolinija. Dobivene su vrijednosti uspoređene s dostupnim eksperimentalnim i empirijskim vrijednostima.

na važnost kolektivnih korelacija koje potječu od ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta i miješanja konfiguracija. Na slikama 4.18 i 4.19 prikazane su E_3 vrijednosti i snage oktopolnih prijelaza $B(E3, 3^- \rightarrow 0^+)$ u izotopnom lancu jezgara gadolinija dobivene GCM računom te dostupne eksperimentalne vrijednosti. Kao i u izotopnom lancu samarija, eksperimentalni su podaci reproducirani sa zadovoljavajućom točnošću. Energija pobuđenja najbolje se poklapa s eksperimentalnom u slučaju oktu-



Slika 4.18: Razlike energija prvog neparne i prvog parne stanja E_3 u izotopnom lancu atomskih jezgara gadolinija dobivene jednodimenzionalnim GCM računom. Pri tome su u prvom slučaju kvadrupolne deformacije fiksirane na vrijednosti iz minimuma srednjega polja (tablica 4.1), a u drugome su određivane samosuglasno. Dobivene su vrijednosti uspoređene s dostupnim eksperimentalnim podacima za položaje prvih 3^- i 1^- stanja u promatranim jezgrama [49].



Slika 4.19: Snage električnih oktupolnih prijelaza $B(E3, 3^- \rightarrow 0^+)$ u izotopnom lancu atomskih jezgara gadolinija dobivene jednodimenzionalnim GCM računom. Pri tome su u prvom slučaju kvadrupolne deformacije fiksirane na vrijednosti iz minimuma srednjega polja (tablica 4.1), a u drugome su određivane samosuglasno. Dobivene su vrijednosti uspoređene s dostupnim eksperimentalnim podacima [45].

polno deformirane jezgre ^{152}Gd , a rezultati za snage oktupolnih prijelaza opet su bolji u težim izotopima. S druge strane, u gotovo sferičnoj jezgri ^{148}Gd dobivene E_3 i $B(E3)$ vrijednosti značajno odstupaju od eksperimentalnih. Štoviše, ravnotežna β_3 vrijednost u ovoj jezgri na razini srednjega polja mnogo je manja od empirijske vrijednosti iz tablice 4.3, a uključivanjem kolektivnih korelacija poraste na manje od polovice empirijske vrijednosti. Ovo još jednom upućuje na činjenicu da ovakav model nije prikladan za opis jezgara koje su gotovo sferične u svom osnovnom stanju.

5 Zaključak

Oktupolno deformirane atomske jezgre predstavljaju zanimljivu i još nedovoljno istraženu pojavu u nuklearnoj fizici. Mikroskopsko porijeklo oktopolnih deformacija povezuje se s postojanjem orbitala oko Fermijeve razine koje imaju suprotan paritet, dok im se vrijednosti angularnih momenata razlikuju za $3\hbar$. Glavna obilježja oktopolno deformiranih jezgara jesu pojava naizmjeničnih stanja pozitivnog i negativnog pariteta u niskoležećem spektru, pojava niskoležećih 3^- i 1^- stanja, kao i vrlo velika snaga oktopolnog prijelaza u osnovno stanje.

U ovome je radu primijenjen formalizam relativističkih energijskih funkcionala gustoće pri opisu oktopolnih pobuđenja u parnim izotopnim lancima atomskih jezgara samarija i gadolinija. Na razini srednjeg polja, iskorišten je relativistički Hartree-Bogoliubovljev model s kontaktnim funkcionalom gustoće DD-PC1 i separabilnom silom sparivanja. U oba je izotopna lanca zabilježen identičan trend promjene oblika atomskih jezgara s promjenom odgovarajućeg nukleonskog broja. Konkretno, davanjem neutrona polazišnoj gotovo sferičnoj jezgri prvo se formira kvadrupolno, a potom i oktopolno deformirani minimum, dok u konačnici teži izotopi zauzimaju izrazito izdužen kvadrupolno deformiran oblik. Eksperimentalne energije vezanja i ravnotežne kvadrupolne deformacije u našem su računu reproducirane s izvrsnom točnošću, što predstavlja još jednu potvrdu globalne primjenjivosti DD-PC1 funkcionala. Međutim, pokazuje se da su dobiveni minimumi energija vezanja vrlo mekani u β_3 smjeru pa je ključno ponovno uspostaviti slomljene simetrije. Metoda generirajućih koordinata primijenjena je kako bi se uzelo u obzir kolektivne korelacije koje potječu od ponovnog uspostavljanja dobroga pariteta, kao i one koje potječu od miješanja konfiguracija. Prvo kolektivno stanje odgovara osnovnom (0^+) stanju promatranih jezgara i uvijek ima globalni maksimum na $\beta_3 = 0$, dok drugo kolektivno stanje odgovara prvom neparnom (3^- ili 1^-) stanju te ima maksimum na vrijednostima β_3 različitim od nule. Potpuna usporedba sa spektroskopskim podacima nije moguća bez ponovnog uspostavljanja rotacijske simetrije, što nadilazi opseg ovoga rada. Unatoč tome, uključivanjem kolektivnih korelacija uspješno je reproduciran empirijski trend oktopolnih deformacija osnovnih stanja u izotopnom lancu jezgara samarija. Također, energije pobuđenja prvog neparnog stanja i odgovarajuće snage električnih oktopolnih prijelaza vrlo se dobro poklapaju s eksperimentalnima u oba izotopna lanca. Jedino značajno odstupanje zabilježeno je u izotopima ^{146}Sm i ^{148}Gd , što upućuje na činjenicu da ovakav model nije prikladan za opis gotovo sferičnih jezgara. Zanimljivo je primijetiti i da se dobiveni rezultati vrlo dobro slažu s GCM računom iz [9], ali i s rezultatima dobivenim u okviru modela kolektivnog Hamiltonijana. Budući da oba modela uključuju kvadrupolno-oktopolno vezanje, ovakav rezultat upućuje na moguću pojavu odvezanosti ovih stupnjeva slobode u promatranim izotopima.

Kako bismo izravno provjerili ovu tvrdnju, u nastavku istraživanja namjeravamo

eksplicitno uključiti u model vezanje kvadrupolnog i oktupolnog stupnja slobode. Očekujemo da ćemo na taj način teorijska predviđanja dodatno približiti eksperimentalnim vrijednostima. Također, bit ćemo u mogućnosti dati predviđanja u područjima karte nuklida gdje kvadrupolno-oktupolno vezanje sasvim sigurno igra bitnu ulogu, a posebno u izotopima u kojima su nedavna istraživanja pokazala postojanje oktupolnih deformacija [14].

Dodaci

Dodatak A Model kolektivnog Hamiltonijana

U okviru modela kolektivnog Hamiltonijana (CHM) moguće je istovremeno opisati kolektivna pobuđenja atomske jezgre određena kvadrupolnim i oktupolnim vibracijskim i rotacijskim stupnjevima slobode [51]. Površina deformirane jezgre općenito je opisana jednadžbom (2.1), a u ovom slučaju vrijedi $\lambda_{\max} = 3$. Kako bi se odvojilo vibracijsko i rotacijsko gibanje aksijalno simetrične jezgre, kolektivne se koordinate obično parametriziraju dvama parametrima deformacije (β_2 i β_3) te trima Eulerovim kutevima ($\Omega \equiv (\phi, \theta, \psi)$). Eulerovi kutevi određuju orijentacije glavnih osi laboratorijskog sustava, a parametri deformacije β_λ povezani su s parametrima $\alpha_{\lambda\mu}$ iz jednadžbe (2.1) relacijom:

$$\alpha_{\lambda\mu} = \beta_\lambda D_{0\mu}^\lambda(\Omega), \quad \lambda = 2, 3, \quad (\text{A.1})$$

gdje je $D_{\mu\nu}^\lambda$ Wignerova funkcija. Klasični kolektivni Hamiltonijan odgovara zbroju vibracijske kinetičke energije,

$$\mathcal{T}_{\text{vib}} = \frac{1}{2}B_{22}\dot{\beta}_2^2 + B_{23}\dot{\beta}_2\dot{\beta}_3 + \frac{1}{2}B_{33}\dot{\beta}_3^2, \quad (\text{A.2})$$

rotacijske kinetičke energije,

$$\mathcal{T}_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \mathcal{I}_k \omega_k^2, \quad (\text{A.3})$$

i kolektivnog potencijala $\mathcal{V}_{\text{coll}}(\beta_2, \beta_3)$. Maseni parametri B_{22} , B_{23} , B_{33} i momenti inercije \mathcal{I}_k funkcije su parametra kvadrupolne deformacije β_2 i parametra oktupolne deformacije β_3 . Nakon kvantizacije, kolektivni Hamiltonijan glasi:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{coll}} = & -\frac{\hbar^2}{2\sqrt{w\mathcal{I}}} \left[\frac{\partial}{\partial\beta_2} \sqrt{\frac{\mathcal{I}}{w}} B_{33} \frac{\partial}{\partial\beta_2} - \frac{\partial}{\partial\beta_2} \sqrt{\frac{\mathcal{I}}{w}} B_{23} \frac{\partial}{\partial\beta_3} \right. \\ & \left. - \frac{\partial}{\partial\beta_3} \sqrt{\frac{\mathcal{I}}{w}} B_{23} \frac{\partial}{\partial\beta_2} + \frac{\partial}{\partial\beta_3} \sqrt{\frac{\mathcal{I}}{w}} B_{22} \frac{\partial}{\partial\beta_3} \right] \\ & + \frac{\hat{j}^2}{2\mathcal{I}} + V_{\text{coll}}(\beta_2, \beta_3), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

gdje je $w = B_{22}B_{33} - B_{23}^2$, a odgovarajući volumni element kolektivnog prostora iznosi:

$$\int d\tau_{\text{coll}} = \int \sqrt{w\mathcal{I}} d\beta_2 d\beta_3 d\Omega. \quad (\text{A.5})$$

Kolektivni Hamiltonijan (A.4) uključuje kvadrupolni i oktupolni stupanj slobode, kao i vezanje ovih kolektivnih modova. Kako bi se riješio odgovarajući problem svojstve-

nih vrijednosti, svojstvene je funkcije moguće razviti u kompletnoj bazi kvadratno integrabilnih funkcija:

$$|n_2 n_3 I M K\rangle = (w\mathcal{I})^{-1/4} \phi_{n_2}(\beta_2) \phi_{n_3}(\beta_3) D_{MK}^I(\Omega), \quad (\text{A.6})$$

gdje ϕ_{n_2} (ϕ_{n_3}) označava valnu funkciju jednodimenzionalnog harmoničkog oscilatora za varijablu β_2 (β_3). Za stanja pozitivnog pariteta n_3 i I trebaju biti parni, a za stanja negativnog pariteta neparni. Budući da deformirana aksijalno simetrična jezgra kao cjelina može rotirati samo oko osi koja je okomita na os simetrije, projekcija ukupnog angularnog momenta na os simetrije uvijek iščezava, odnosno vrijedi $K = 0$. Konačno, kolektivne valne funkcije glase:

$$\Psi_\alpha^{IM\pi}(\beta_2, \beta_3, \Omega) = \psi_\alpha^{I\pi}(\beta_2, \beta_3) D_{M0}^I(\Omega), \quad (\text{A.7})$$

a pripadajuće svojstvene vrijednosti odgovaraju spektru pobuđenja atomske jezgre. Snage multipolnih prijelaza između stanja angularnog momenta I_i i stanja angularnog momenta I_f moguće je izračunati iz formule:

$$B(E\lambda, I_i \rightarrow I_f) = \langle I_i 0 \lambda 0 | I_f 0 \rangle^2 \left| \int d\beta_2 d\beta_3 \sqrt{w\mathcal{I}} \psi_i \mathcal{M}_{E\lambda}(\beta_2, \beta_3) \psi_f^* \right|^2, \quad (\text{A.8})$$

gdje $\mathcal{M}_{E\lambda}(\beta_2, \beta_3)$ označava električni multipolni moment reda λ . Budući da je u ovome modelu ponovno uspostavljena rotacijska simetrija, dobivene je rezultate moguće izravno usporediti s izmjerenim spektrom pobuđenja i snagama multipolnih prijelaza promatrane atomske jezgre. Ukupno sedam parametara određuje čitavu dinamiku modela kolektivnog Hamiltonijana: tri masena parametra (B_{22} , B_{23} , B_{33}), tri momenta inercije (\mathcal{I}_k , $k = 1, 2, 3$) i kolektivni potencijal V_{coll} . Njih je moguće izračunati u perturbativnoj *cranking* aproksimaciji, koristeći RHB kvazičestične valne funkcije i energije kao mikroskopske ulazne podatke.

Dodatak B Račun funkcija preklopa norme i Hamiltonijana

Pri rješavanju Hill-Wheelerove jednadžbe, potrebno je izračunati funkcije preklopa norme i Hamiltonijana oblika $\langle \Phi_1 | \Phi_0 \rangle$ i $\langle \Phi_1 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle$. Ovdje su $|\Phi_0\rangle$ i $|\Phi_1\rangle$ Slaterove determinante jednočestičnih stanja dobivene rješavanjem RHB jednadžbi čiji preklop po pretpostavci ne iščezava. Koristeći definicije matrica U i V :

$$\begin{aligned} U &= U_0^\dagger U_1 + V_0^\dagger V_1, \\ V &= V_0^T U_1 + U_0^T V_1, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

kao i Thoulesove matrice Z :

$$Z = (VU^{-1})^* = -U^{\dagger-1} V^\dagger = -Z^T, \quad (\text{B.2})$$

može se pokazati da je preklop norme jednak [24]:

$$\langle \Phi_1 | \Phi_0 \rangle = \sqrt{\det U} = \sqrt{\det(U_0^\dagger U_1 + V_0^\dagger V_1)}. \quad (\text{B.3})$$

Budući da su valne funkcije $|\Phi_0\rangle$ i $|\Phi_1\rangle$ po definiciji (2.35) određene do na fazu, ovaj je preklop također određen do na fazu. U računu se obično pretpostavi da je U hermitska i pozitivno definitna matrica. Preklop Hamiltonijana moguće je izračunati iz:

$$\langle \Phi_1 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_1 | \Phi_0 \rangle \cdot \left\{ \text{Tr}(\epsilon \rho^{10}) + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \text{Tr}_1(\rho^{10} \bar{v} \rho^{10}) + \frac{1}{4} \text{Tr}_2 \text{Tr}_2(\kappa^{01*} \bar{v} \kappa^{10}) \right\}, \quad (\text{B.4})$$

gdje je ϵ Hartree-Fockova energija, \bar{v} antisimetrizirano dvočestično međudjelovanje, a prijelazne gustoće ρ^{10} , κ^{10} i κ^{01*} definirane su kao:

$$\rho_{ll'}^{10} = \frac{\langle \Phi_1 | c_l^\dagger c_{l'} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_1 | \Phi_0 \rangle}, \quad (\text{B.5})$$

$$\kappa_{ll'}^{10} = \frac{\langle \Phi_1 | c_{l'} c_l | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_1 | \Phi_0 \rangle}, \quad (\text{B.6})$$

$$\kappa_{ll'}^{01*} = \frac{\langle \Phi_1 | c_l^\dagger c_{l'}^\dagger | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_1 | \Phi_0 \rangle}. \quad (\text{B.7})$$

Ove je matrice moguće izraziti preko HFB koeficijenata U_0 i V_0 koji odgovaraju stanju $|\Phi_0\rangle$ te HFB koeficijenata U_1 i V_1 koji odgovaraju stanju $|\Phi_1\rangle$:

$$\rho^{10} = V_0^* U^{T^{-1}} V_1^T, \quad (\text{B.8})$$

$$\kappa^{10} = V_0^* U^{T^{-1}} U_1^T, \quad (\text{B.9})$$

$$\kappa^{01*} = -U_0^* U^{T^{-1}} V_1^T. \quad (\text{B.10})$$

Za $|\Phi_1\rangle \rightarrow |\Phi_0\rangle$ ove gustoće postaju obične gustoće ρ , κ i κ^* . Na sličan je način moguće izračunati preklop i bilo kojeg drugog operatora, izraženog preko operatora c_l^\dagger i c_l [24].

Literatura

- [1] A. Bohr i B. R. Mottelson, *Nuclear Structure* (Benjamin, New York, 1969), Vol. I; *Nuclear Structure* (Benjamin, New York, 1975), Vol II.
- [2] R. F. Casten, *Nuclear Structure from a Simple Perspective* (Oxford University Press, Oxford, 1990).
- [3] Samuel S. M. Wong, *Introductory Nuclear Physics* (WILEY-VCH Verlag Gmbl I & Co. KGaA, Weinheim, 2004).
- [4] N. J. Stone, *Table of nuclear magnetic dipole and electric quadrupole moments*, *At. Data Nucl. Data Tables* **90**, 75 (2005).
- [5] F. Asaro, F. Stephens, Jr. i I. Perlman, *Complex Alpha Spectra of Radiothorium (Th^{228}) and Thorium-X (Ra^{224})*, *Phys. Rev.* **92**, 1495 (1953).
- [6] P. A. Butler i W. Nazarewicz, *Intrinsic reflection asymmetry in atomic nuclei*, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 349 (1996).
- [7] W. Zhang, Z. P. Li, S. Q. Zhang i J. Meng, *Octupole degree of freedom for the critical-point candidate nucleus ^{152}Sm in a reflection-asymmetric relativistic mean-field approach*, *Phys. Rev. C* **81**, 034302 (2010).
- [8] L. M. Robledo i R. Rodríguez-Guzmán, *Octupole deformation properties of actinide isotopes within a mean field approach*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **39**, 105103 (2012).
- [9] R. Rodríguez-Guzmán, L. M. Robledo i P. Sarriguren, *Microscopic description of quadrupole-octupole coupling in Sm and Gd isotopes with the Gogny energy density functional*, *Phys. Rev. C* **86**, 034336 (2012).
- [10] K. Nomura, D. Vretenar, T. Nikšić i Bing-Nan Lu, *Microscopic description of octupole shape-phase transitions in light actinides and rare-earth nuclei*, *Phys. Rev. C* **89**, 024312 (2014).
- [11] L. M. Robledo i G. F. Bertsch, *Global systematics of octupole excitations in even-even nuclei*, *Phys. Rev. C* **84**, 054302 (2011).
- [12] L. M. Robledo, *Improvements on the present theoretical understanding of octupole correlations*, *EPJ Web of Conferences* **66**, 02091 (2014).
- [13] P. E. Garrett *i dr.*, *New Features of Shape Coexistence in ^{152}Sm* , *Phys. Rev. Lett.* **103**, 062501 (2009).
- [14] L. P. Gaffney *i dr.*, *Studies of a pear-shaped nuclei using accelerated radioactive beams*, *Nature (London)* **497**, 199 (2013).

- [15] M. Pospelov i A. Ritz, *Electric dipole moments as probes of new physics*, Ann. Phys. **318**, 119 (2005).
- [16] T. Nikšić, D. Vretenar i P. Ring, *Relativistic Nuclear Energy Density Functionals: Mean-Field and Beyond*, Prog. Part. Nucl. Phys. **66**, 519 (2011).
- [17] G. A. Lalazissis, P. Ring i D. Vretenar, *Extended Density Functionals in Nuclear Structure Physics*, Lecture Notes in Physics 641 (Springer, Heidelberg 2004).
- [18] M. Bender, P.-H. Heenen i P.-G. Reinhard, *Self-consistent mean-field models for nuclear structure*, Rev. Mod. Phys. **75**, 121 (2003).
- [19] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Finelli i P. Ring, *Relativistic Hartree-Bogoliubov model with density-dependent meson-nucleon couplings*, Phys. Rev. C **66**, 024306 (2002).
- [20] G. A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar i P. Ring, *New relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon couplings*, Phys. Rev. C **71**, 024312 (2005).
- [21] T. Nikšić, D. Vretenar i P. Ring, *Relativistic nuclear energy density functionals: Adjusting parameters to binding energies*, Phys. Rev. C **78**, 034318 (2008).
- [22] P. W. Zhao, Z. P. Li, J. M. Yao i J. Meng, *New parametrization for the nuclear covariant energy density functional with point-coupling interaction*, Phys. Rev. C **82**, 054319 (2010).
- [23] P. Ring, *Relativistic Mean Field Theory in Finite Nuclei*, Prog. Part. Nucl. Phys. **37**, 193 (1996).
- [24] P. Ring i P. Schück, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Heidelberg 1980).
- [25] P. Bonche *i dr.*, *Analysis of the generator coordinate method in a study of shape isomerism in ^{194}Hg* , Nucl. Phys. A. **510**, 466 (1990).
- [26] W. Urban *i dr.*, *High-spin octupole correlations in the $N = 86$, ^{146}Nd and ^{148}Sm nuclei*, Phys. Lett. B **258**, 293 (1991).
- [27] W. Urban *i dr.*, *Evidence for coexistence of reflection asymmetric and symmetric shapes in ^{150}Sm* , Phys. Lett. B **185**, 331 (1987).
- [28] S. G. Rohoziński, *A parametrisation of the octupole deformation*, J. Phys. G. **16**, L173 (1990).
- [29] P. A. Butler i W. Nazarewicz, *Intrinsic dipole moments in reflection-asymmetric nuclei*, Nucl. Phys. A **533**, 249 (1991).

- [30] L. M. Robledo i G. F. Bertsch, *Electromagnetic transition strengths in soft deformed nuclei*, Phys. Rev. C **86**, 054306 (2012).
- [31] W. Kohn, *Nobel Lecture: Electronic structure of matter - wave functions and density functionals*, Rev. Mod. Phys. **71**, 1253 (1999).
- [32] P. Hohenberg i W. Kohn, *Inhomogeneous Electronic Gas*, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [33] R. M. Dreizler i E. K. U. Gross, *Density Functional Theory* (Springer, Berlin, 1990).
- [34] P.-G. Reinhard, *The relativistic mean-field description of nuclei and nuclear dynamics*, Rep. Prog. Phys. **52**, 439 (1989).
- [35] T. Nikšić, P. Marević i D. Vretenar, *Microscopic analysis of shape evolution and triaxiality in germanium isotopes*, Phys. Rev. C **89**, 044325 (2014).
- [36] V. Prassa, Bing-Nan Lu, T. Nikšić, D. Ackermann i D. Vretenar, *High- K isomers in transactinide nuclei close to $N = 162$* , Phys. Rev. C **91**, 034324 (2015).
- [37] H. Kucharek i P. Ring, *Relativistic field theory of superfluidity in nuclei*, Z. Phys. A **339**, 23 (1991).
- [38] T. Nikšić, P. Ring, D. Vretenar, Y. Tian i Z. Y. Ma, *3D relativistic Hartree-Bogoliubov model with a separable pairing interaction: Triaxial ground-state shapes*, Phys. Rev. C **81**, 054318 (2010).
- [39] Y. K. Gambhir, P. Ring i A. Thimet, *Relativistic Mean Field Theory for Finite Nuclei*, Ann. Phys. (N.Y.) **198**, 132 (1990).
- [40] M. Abramowitz i I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
- [41] H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman i D. Vautherin, *Nuclear deformation energy curves with the constrained Hartree-Fock method*, Nucl. Phys. A **203**, 433 (1973).
- [42] D. L. Hill i J. A. Wheeler, *Nuclear Constitution and the Interpretation of Fission Phenomena*, Phys. Rev. **89**, 1102 (1953).
- [43] Y. Horikawa, *Deformation of Ground-Bands in ^{20}Ne , ^{24}Mg and ^{28}Si* , Prog. Theor. Phys. **47**, 867 (1972).
- [44] S. Raman, C. W. Nestor Jr. i P. Tikkanen, *Transition probability from the ground to the first excited 2^+ state of even-even nuclides*, At. Data Nucl. Data Tables **78**, 1 (2001).

- [45] T. Kibédi i R. Spear, *Reduced electric-octupole transition probabilities, $B(E3; 0_1^+ \rightarrow 3_1^-)$* , At. Data Nucl. Data Tables **80**, 35 (2002).
- [46] R. F. Casten i N. V. Zamfir, *Empirical Realization of a Critical Point Description in Atomic Nuclei*, Phys. Rev. Lett. **87**, 052503 (2001).
- [47] G. Audi, A. H. Wapstra i C. Thibault, *The AME2003 atomic mass evaluation*, Nucl. Phys. A **729**, 337 (2003).
- [48] J. M. Yao, E. F. Zhou i Z. P. Li, *Spin-controlled octupole-shape transition in ^{224}Ra : a microscopic description*, arXiv:1507.03298v1 [nucl-th]
- [49] Evaluated Nuclear Structure Data Files (ENSDF): www.nndc.bnl.gov/ensdf.
- [50] N. Paar, P. Ring, T. Nikšić i D. Vretenar, *Quasiparticle random phase approximation based on the relativistic Hartree-Bogoliubov model*, Phys. Rev. C, **67**, 034312 (2003).
- [51] Z. P. Li, B. Y. Song, J. M. Yao, D. Vretenar i J. Meng, *Simultaneous quadrupole and octupole shape phase transitions in Thorium*, Phys. Lett. B **726**, 866 (2013).