

# Implementacija nuklearnih energijskih funkcionala gustoće

Antonio Bjelčić

Samostalni seminar iz istraživanja u fizici  
Prirodoslovno-matematički fakultet u Zagrebu, Fizički odsjek  
Email: tony.bjelcic@gmail.com

## Sažetak

Ovaj dokument je strukturiran u tri dijela. U prvom poglavlju dan je kratki pregled teorije kovarijantnog nuklearnog funkcionala gustoće sa separabilnom interakcijom sparivanja. U drugom poglavlju opisano je rješenje jednog konkretnog modela funkcionala baziranog na izmjeni mezona s parametrima koji ovise o gustoći (DD-ME2 parametrizacija Lagrangijana). Pritom se pretpostavlja da imamo parno-parnu jezgru, koja je simetrična na obrat vremena, rotacije oko z osi i zrcaljenje obzirom na xy ravninu. U trećem poglavlju, dani su neki zanimljivi rezultati koje model predviđa.

## Pokrate i Notacija

Koristi se iduća notacija i pokrate:

- RHB - *Relativistic Hartree Bogoliubov*
- DD-ME - *Density Dependent - Meson exchange*
- $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  - koristi se za indeksiranje koeficijenta  $f_\alpha^{(U/V)}$  u razvoju velike komponente  $f^{(U/V)}$  Diracovog spinora uz  $\alpha = (n_r, n_z, \Lambda, m_s)$
- $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \dots$  - koristi se za indeksiranje koeficijenta  $g_{\tilde{\alpha}}^{(U/V)}$  u razvoju male komponente  $g^{(U/V)}$  Diracovog spinora uz  $\tilde{\alpha} = (\tilde{n}_r, \tilde{n}_z, \tilde{\Lambda}, \tilde{m}_s)$
- $|\Phi_\alpha\rangle = \Phi_\alpha(\mathbf{r})\chi_{m_s}$  - u ovoj je konvenciji  $\alpha = (n_r, n_z, \Lambda, m_s)$  kada se pojavi uz vektor  $|\Phi_\alpha\rangle$ , a  $\alpha = (n_r, n_z, \Lambda)$ , ako je uz funkciju  $\Phi_\alpha(\mathbf{r})$
- tekst - font koji se koristi za objekte koji nisu dio samog modela ali se koriste u konkretnoj implementaciji, npr. čvorovi Gauss-Hermiteove integracije:  $xh(0, 1, \dots, NGH)$

## 1 Relativistički Hartree-Bogoliubov model

### 1.1 Funkcional baziran na interakciji izmjenom mezona

U standardnoj reprezentaciji kvantne hadronodinamike, jezgru opisujemo kao sustav neovisnih Diracovih čestica u *srednjem potencijalu* koji potječe od međudjelovanja izmjenom mezona i fotona. Pokazalo se da izoskalarni-skalarni  $\sigma$  mezon, izoskalarni-vektorski  $\omega$  mezon i izovektorski-vektorski  $\rho$  mezon, zajedno s fotonom  $\gamma$ , čine minimalan skup polja nužan za dobar opis većine atomskih jezgara. Lagrangijan kojim opisujemo sustav je:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{Kin} + \mathcal{L}_{Mes} + \mathcal{L}_{Int}. \quad (1)$$

$\mathcal{L}_{Kin}$  je kinetički član slobodnog nukleona:

$$\mathcal{L}_{Kin} = \bar{\Psi}_i(i\gamma^\mu\partial_\mu - m_f)\Psi_i, \quad (2)$$

gdje je  $m = m_p \approx m_n$  masa slobodnog nukleona.  $\mathcal{L}_{Mes}$  je Lagrangijan slobodnog elektromagnetskog i mezonskih polja:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{Mes} = & \frac{1}{2}\partial_\mu\sigma\partial^\mu\sigma - \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 - \frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_\mu\omega^\mu - \\ & - \frac{1}{4}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}_\mu\vec{\rho}^\mu - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (3)$$

s odgovarajućim masama  $m_\sigma, m_\omega, m_\rho$  i tenzorima polja:

$$\Omega_{\mu\nu} = \partial_\mu\omega_\nu - \partial_\nu\omega_\mu, \quad \vec{R}_{\mu\nu} = \partial_\mu\vec{\rho}_\nu - \partial_\nu\vec{\rho}_\mu, \quad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (4)$$

Minimalan skup članova međudjelovanja u  $\mathcal{L}_{Int}$  glasi:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{Int} = & -g_\sigma\bar{\Psi}\sigma\Psi - g_\omega\bar{\Psi}\gamma^\mu\omega_\mu\Psi - g_\rho\vec{\tau}\bar{\Psi}\vec{\gamma}^\mu\vec{\rho}_\mu\Psi - \\ & - e\frac{1-t_z}{2}\bar{\Psi}\gamma^\mu A_\mu\Psi, \end{aligned} \quad (5)$$

s konstantama vezanja  $g_\sigma, g_\omega, g_\rho, e$ . Iz prethodne gustoće Lagrangijana može se dobiti [1] gustoća Hamiltonijana:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}) = & \sum_{i=1}^A \Psi_i^\dagger(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\beta)\Psi_i + \\ & + \frac{1}{2}\left((\nabla\sigma)^2 + m_\sigma^2\sigma^2\right) - \frac{1}{2}\left((\nabla\omega)^2 + m_\omega^2\omega^2\right) - \\ & - \frac{1}{2}\left((\nabla\rho)^2 + m_\rho^2\rho^2\right) - \frac{1}{2}(\nabla A)^2 + \\ & + \left(g_\sigma\rho_s\sigma + g_\omega j_\mu\omega^\mu + g_\rho\vec{j}_\mu \cdot \vec{\rho}^\mu + e j_\mu^p A^\mu\right), \end{aligned} \quad (6)$$

gdje su pripadne Lorentzove bilinearne forme definirane kao:

$$\begin{aligned} \rho_s(\mathbf{r}) = & \sum_{i=1}^A \bar{\Psi}_i(\mathbf{r})\Psi_i(\mathbf{r}), \text{ izoskalarna-skalarna gustoća,} \\ j_\mu(\mathbf{r}) = & \sum_{i=1}^A \bar{\Psi}_i(\mathbf{r})\gamma_\mu\Psi_i(\mathbf{r}), \text{ izoskalarna-vektorska struja,} \\ \vec{j}_\mu(\mathbf{r}) = & \sum_{i=1}^A \bar{\Psi}_i(\mathbf{r})\vec{\tau}\gamma_\mu\Psi_i(\mathbf{r}), \text{ izovektorska-vektorska struja,} \\ j_\mu^p(\mathbf{r}) = & \sum_{i=1}^Z \bar{\Psi}_i(\mathbf{r})\gamma_\mu\Psi_i(\mathbf{r}), \text{ elektromagnetska struja.} \end{aligned} \quad (7)$$

Sumacija se provodi po zaposjednutim orbitalama u Fermijevom moru pozitivnih energija zanemarujući Diracovo more (*no-sea approximation*). Iz gustoće Hamiltonijana, integriranjem dobijemo funkcional energije:

$$E[\Psi, \bar{\Psi}, \sigma, \omega^\mu, \vec{\rho}^\mu, A^\mu] = \int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{H}(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (8)$$

U ranim primjenama prethodnog Lagrangijana primijećeno je da ovakav jednostavan model, sa samo linearnim članovima interakcije, ne daje dobar kvantitativan opis kompliciranog nuklearnog sustava. Uspješna modifikacija prethodnog Lagrangijana jest slijediti ideju [2] o konstantama vezanja koje ovise o gustoći. Preciznije, pretpostavlja se da su  $g_\sigma = g_\sigma(\rho_v)$ ,  $g_\omega = g_\omega(\rho_v)$  i  $g_\rho = g_\rho(\rho_v)$ , funkcije gustoće  $\rho_v = \sqrt{j_\mu j^\mu}$ . Konkretna ovisnost modelirana je fenomenolo-

ški temeljem mikroskopskih računa. Variranjem funkcionala [3], dobivaju se jednočestične jednadžbe gibanja za spinore:

$$\hat{h}_D \Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i,$$

$$\hat{h}_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - \boldsymbol{\Sigma}) + \Sigma_0 + \beta(m + \Sigma_s), \quad (9)$$

gdje su

$$\Sigma_s(\mathbf{r}) = g_\sigma \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}),$$

$$\Sigma_\mu(\mathbf{r}) = g_\omega \omega_\mu(\mathbf{r}) + g_\rho \vec{\tau} \cdot \vec{\rho}_\mu(\mathbf{r}) + e A_\mu(\mathbf{r}) + \Sigma_\mu^R(\mathbf{r}). \quad (10)$$

Posljednji član  $\Sigma_\mu^R(\mathbf{r})$  je posljedica pretpostavljene ovisnosti konstanti vezanja o gustoći (*rearrangement* član):

$$\Sigma_\mu^R = \frac{j_\mu}{\rho_v} \left( \frac{\partial g_\sigma}{\partial \rho_v} \rho_s \boldsymbol{\sigma} + \frac{\partial g_\omega}{\partial \rho_v} j_v \omega^\nu + \frac{\partial g_\rho}{\partial \rho_v} \vec{j}_v \cdot \vec{\rho}^\nu \right). \quad (11)$$

Razmatranje ćemo ograničiti na parno-parne jezgre, invarijantne na vremenski obrat, pa prostorne komponente polja iščezavaju. Preostalu komponentu polja  $\omega^\mu$  i  $\rho^\mu$  označavamo  $\omega$  i  $\rho$ . Uz te pretpostavke, Diracov Hamiltonijan (9) se može pojednostaviti (sada u SI jedinicama):

$$\hat{h}_D = \begin{bmatrix} V(\mathbf{r}) + S(\mathbf{r}) + mc^2 & c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \\ c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) & V(\mathbf{r}) - S(\mathbf{r}) - mc^2 \end{bmatrix}, \quad (12)$$

gdje je **skalarni potencijal**:  $S(\mathbf{r}) = \hbar c g_\sigma \sigma$ , a **vektorski potencijal** je dan jednadžbom:

$$V(\mathbf{r}) = \hbar c \left( g_\omega \omega + g_\rho t_z \rho + \Sigma_0^R \right) + e \frac{1 - t_z}{2} A_0, \quad (13)$$

$$\Sigma_0^R = \frac{\partial g_\sigma}{\partial \rho_v} \rho_s \boldsymbol{\sigma} + \frac{\partial g_\omega}{\partial \rho_v} \rho_v \omega + \frac{\partial g_\rho}{\partial \rho_v} \rho_{tv} \boldsymbol{\rho}. \quad (13)$$

Sada su relevantne bilinearne forme:

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^A \Psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \gamma^0 \Psi_i(\mathbf{r}), \quad \rho_v(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^A \Psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}), \quad (14)$$

dok je  $\rho_{tv}(\mathbf{r})$  razlika neutronske  $\rho_v^n(\mathbf{r})$  i protonske  $\rho_v^p(\mathbf{r})$  vektorske gustoće. Varijacija funkcionala energije (8) po mezonim poljima daje Klein-Gordonove jednadžbe:

$$\begin{aligned} \left[ -\nabla^2 + \frac{m_\sigma^2 c^2}{\hbar^2} \right] \sigma &= -g_\sigma \rho_s, \\ \left[ -\nabla^2 + \frac{m_\omega^2 c^2}{\hbar^2} \right] \omega &= g_\omega \rho_v, \\ \left[ -\nabla^2 + \frac{m_\rho^2 c^2}{\hbar^2} \right] \rho &= g_\rho \rho_{tv}, \end{aligned} \quad (15)$$

i Poissonovu jednadžbu za elektromagnetski potencijal:

$$\nabla^2 A_0 = -\frac{e}{\varepsilon_0} \rho_v^p. \quad (16)$$

## 1.2 Parametrizacija konstanti vezanja

Konstante vezanja  $g_\sigma$ ,  $g_\omega$  i  $g_\rho$ , dane su fenomenološki:

$$g_i(\rho_v) = g_i(\rho_{sat}) f_i \left( \frac{\rho_v}{\rho_{sat}} \right), \quad i = \sigma, \omega, \quad (17)$$

$$f_i(x) = a_i \frac{1 + b_i(x + d_i)^2}{1 + c_i(x + d_i)^2}, \quad x = \frac{\rho_v}{\rho_{sat}}, \quad (18)$$

gdje su  $\{a_i, b_i, c_i, d_i, g_i(\rho_{sat})\}$ , bezdimenzionalni parametri, a  $\rho_{sat} = 0.152 \text{ fm}^{-3}$  gustoća saturacije nuklearne materije. Za vezanje  $\rho$  mezona, koristi se *ansatz*:

$$g_\rho(\rho_v) = g_\rho(\rho_{sat}) e^{-a_\rho \left( \frac{\rho_v}{\rho_{sat}} - 1 \right)}, \quad (19)$$

s parametrima  $g_\rho(\rho_{sat})$  i  $a_\rho$ . Također u parametar modela spada i masa fenomenološkog  $\sigma$  mezona  $m_\sigma$ , dok su za  $\omega$  i  $\rho$  mezone korištene mase slobodnih mezona. Time *density-dependent* model ima ukupno 13 parametra. Ipak,

Tablica 1. DD-ME2 parametrizacija Lagrangijana

$m_\sigma [\text{MeV}/c^2]$	$g_\sigma(\rho_{sat})$	$g_\omega(\rho_{sat})$	$g_\rho(\rho_{sat})$	$b_\sigma$	$c_\sigma$	$c_\omega$	$a_\rho$
550.124	10.540	13.019	3.684	1.094	1.706	1.462	0.565

nisu svi nezavisni. Postavljaju se dodatna ograničenja:

$$f_i(1) = 1, \quad f_i''(1) = f_i''(0), \quad f_i'(0) = 0. \quad (20)$$

Time preostaje 8 nezavisnih parametara koji su određeni tako da model reproduciraja empirijska svojstva nuklearne materije kao i eksperimentalne podatke energija vezanja manjeg skupa jezgara [4]. U tablici 1. nalaze se konačne vrijednosti nezavisnih parametara u tzv. DD-ME2 parametrizaciji.

## 1.3 Teorija kovarijantnog funkcionala gustoće s nuklearnim sparivanjem

Prethodno opisani model prikladan je za opis magičnih jezgara, dok u slučaju jezgre s otvorenim ljuskama moramo uključiti i sparivanje. Razvijena je teorija Hartree-Bogoliubovljevog modela [5] u kojoj su objedinjene čestica-šupljina interakcije na razini srednjeg polja (potpoglavlje 1.1) sa čestica-čestica interakcijama sparivanja. Teorija se prvenstveno bavi osnovnim stanjem jezgre koje je opisano kvazičestičnim vakuumom  $|\Phi\rangle$ , u odnosu na nezavisne kvazičestice. Kvazičestični operatori  $\hat{\alpha}_k$  i  $\hat{\alpha}_k^\dagger$ , definirani su unitarnom Bogoliubovljevom transformacijom jednočestičnih nukleonskih operatora poništenja i stvaranja  $\hat{c}_n, \hat{c}_n^\dagger$ :

$$\hat{\alpha}_k^\dagger = \sum_n U_{nk} \hat{c}_n^\dagger + V_{nk} \hat{c}_n. \quad (21)$$

$U_k = \begin{bmatrix} f_k^{(U)} \\ i g_k^{(U)} \end{bmatrix}$  i  $V_k = \begin{bmatrix} f_k^{(V)} \\ i g_k^{(V)} \end{bmatrix}$  su Hartree-Bogoliubovljeve

valne funkcije, a index  $n$  odnosi se na bazu u kojoj razvijamo. Uvodi se operator gustoće  $\hat{\rho}$  i tenzor sparivanja  $\hat{\kappa}$ :

$$\hat{\rho}_{nm'} = \langle \Phi | \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m | \Phi \rangle, \quad \hat{\kappa}_{nm'} = \langle \Phi | \hat{c}_n \hat{c}_m | \Phi \rangle. \quad (22)$$

Ukupni energijski funkcional glasi:

$$E_{RHB}[\hat{\rho}, \hat{\kappa}] = E[\hat{\rho}] + E_{pair}[\hat{\kappa}], \quad (23)$$

gdje je  $E[\hat{\rho}]$  dan u (8), dok je:

$$E_{pair}[\hat{\kappa}] = \frac{1}{4} \sum_{n_1, n_1'} \sum_{n_2, n_2'} \hat{\kappa}_{n_1 n_1'}^* \langle n_1 n_1' | V^{pp} | n_2 n_2' \rangle \hat{\kappa}_{n_2 n_2'}. \quad (24)$$

$\langle n_1 n_1' | V^{pp} | n_2 n_2' \rangle$  je matrični element dvočestične interakcije sparivanja. Varijacijskim postupkom, slično kao u potpoglavlju 1.1, dobije se konačna RHB jednadžba za  $U$  i  $V$ :

$$\begin{bmatrix} \hat{h}_D - mc^2 - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D^* + mc^2 + \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_k \\ V_k \end{bmatrix} = E_k \begin{bmatrix} U_k \\ V_k \end{bmatrix}, \quad (25)$$

gdje je Hamiltonijan  $\hat{h}_D$  dan u (12),  $m$  je masa nukleona, a  $\lambda$  je kemijski potencijal, takav da je očekivana vrijednost broja čestica u osnovnom stanju jednaka  $Z$  za protone, odnosno  $A - Z$  za neutrone. Operator sparivanja  $\hat{\Delta}$ , definiran je po matričnim elementima:

$$\hat{\Delta}_{n_1, n_2} = \frac{1}{2} \sum_{n_1', n_2'} \langle n_1 n_2 | V^{pp} | n_1' n_2' \rangle \hat{\kappa}_{n_1' n_2'}. \quad (26)$$

Primijetimo da u (25), za svaki svojstveni vektor  $(U_k, V_k)$  i energiju  $E_k$ , postoji svojstveni vektor  $(V_k^*, U_k^*)$  s energijom  $-E_k$ . Kako kvazičestični operatori zadovoljavaju fermionske komutacijske relacije, ta dva stanja nisu istovremeno zaposjednuta. Također, s obzirom na to da radimo u *no-sea* aproksimaciji, zanemarujemo rješenja u Diracovom moru. Efekt Diracovog mora nije malen, ali je efektivno uzet u obzir određivnjem parametara modela. Dakle, zanemarujemo rješenja s  $|E_k| > 1 \text{ GeV}$  koja su tipično u Diracovom moru, a od rješenja

u Fermijevom moru  $|E_k| \leq 1$  GeV, koristimo samo pozitivna  $E_k > 0$  rješenja. Sada se mogu napisati izrazi za gustoće  $\rho_s$ ,  $\rho_v$ , i  $\rho_{rv}$ , koje se javljaju u vektorskom potencijalu (13) unutar Diracovog Hamiltonijana (12) i jednadžbama za fotonsko (16) i mezonska polja (15):

$$\begin{aligned}\rho_s(\mathbf{r}) &= \sum_{t_z=\pm 1} \sum_{E_k < 1 \text{ GeV}} V_{k,t_z}^\dagger(\mathbf{r}) \gamma^0 V_{k,t_z}(\mathbf{r}), \\ \rho_v(\mathbf{r}) &= \sum_{t_z=\pm 1} \sum_{E_k > 0} V_{k,t_z}^\dagger(\mathbf{r}) V_{k,t_z}(\mathbf{r}), \\ \rho_{rv}(\mathbf{r}) &= \rho_v^n(\mathbf{r}) - \rho_v^p(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (27)$$

#### 1.4 Dvočestična separabilna interakcija sparivanja $V^{pp}$

Postoje razni modeli koji opisuju međudjelovanje sparivanja  $V^{pp}$ . Jedna od najuspješnijih je Gognyjeva sila [6]. Nažalost, to međudjelovanje je izuzetno složeno za numeričku implementaciju pa se traže jednostavnije varijante. Razvijena je jednostavnija varijanta međudjelovanja sparivanja koja je separabilna u prostoru impulsa [7]:

$$V^{pp}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = -G \frac{(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)}{4} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') P(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}'), \quad (28)$$

gdje su  $\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}$ ,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  i  $P(\mathbf{r}) = \frac{1}{(4\pi a^2)^{3/2}} e^{-|\mathbf{r}|^2/2a^2}$ . Parametri  $G = 728$  MeVfm<sup>3</sup> i  $a = 0.644$  fm, su podešeni prema rezultatima koje daje Gognyjeva sila. Da bismo dobili operator sparivanja  $\hat{\Delta}$ , prema (26) treba izračunati matricni element  $\langle n_1 n'_1 | V^{pp} | n_2 n'_2 \rangle$  i tenzor sparivanja:

$$\hat{\kappa}_{nm'} = \sum_{E_k > 0}^{E_k < 1 \text{ GeV}} V_{k,n}^\dagger U_{k,n'}, \quad (29)$$

u nekoj konkretnoj bazi, gdje su  $V_{k,n}$  i  $U_{k,n}$  komponente u razvoju spinora u toj bazi. Prema osnovnoj RHB jednadžbi (25), operator sparivanja  $\hat{\Delta}$  možemo zapisati kao :

$$\hat{\Delta} = \begin{bmatrix} \hat{\Delta}_{ff} & \hat{\Delta}_{fg} \\ \hat{\Delta}_{gf} & \hat{\Delta}_{gg} \end{bmatrix}. \quad (30)$$

Pokazuje se da se  $\hat{\Delta}_{fg}$ ,  $\hat{\Delta}_{gf}$  i  $\hat{\Delta}_{gg}$  mogu zanemariti, pa preostaje samo  $\hat{\Delta}_{ff}$ .

## 2 Numerička implementacija modela

U ovom poglavlju opisuje se rješenje modela razvojem u bazi harmoničkog oscilatora [8]. Razmatranje ćemo ograničiti na jezgre koje su invarijantne na rotacije oko  $z$  osi i zrcaljenje s obzirom na  $xy$  ravninu. To nam jamči da su ukupna projekcija  $\Omega = \Lambda + m_s$  angularnog momenta jezgre na  $z$  os i paritet  $\Pi$  dobri kvantni brojevi. Navedena svojstva bitno ubrzavaju izvođenje numeričkih simulacija.

### 2.1 Baza kvantnog harmoničkog oscilatora (QHO)

Prije nego li definiramo bazu u kojoj razvijamo spinore  $U$  i  $V$  iz RHB jednadžbe (25), uvedimo pomoćne pojmove ključne za konkretnu realizaciju. S obzirom na to da rješavamo problem razvojem u bazi, naslućujemo da ćemo imati posla s velikim brojem numeričkih integracija. Za numeričko integriranje, obično se koriste Newton-Cotesove integracijske formule [9]. Alternativa su Gaussove integracijske formule, s dvostruko većom polinomijalnom egzaktnošću. Njihovo graničenje je da su prikladne za integriranje samo određenih klasa funkcija. Primjerice, Gauss-Hermiteova formula je izrazito točna za eksponencijalno trnuće funkcije. Koristimo Gaussove formule jer gotovo sve funkcije položaja  $\mathbf{r}$  u

jezgri trnu eksponencijalno. Gauss-Hermiteovu integracijsku formulu glasi:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N w_i f(x_i),$$

gdje su  $x_i$  nultočke polinoma  $H_N(x)$  (tzv. čvorovi), a  $w_i$  težine. Koristimo gotove rutine za računanje čvorova i težina [10]. Sve funkcije  $z$  varijable s kojima ćemo mi raditi su parne pa za takve imamo prilagođenu formulu našim potrebama:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{\text{NGH}} w_h(i) f(x_h(i)), \quad (31)$$

gdje su sada  $x_h(i)$  svi nenegativni čvorovi, a u modificirane težine  $w_h(i)$  apsorbiran je faktor  $2e^{x_h(i)^2}$ . U našem slučaju, red formule je  $\text{NGH} = 48$ . Slično tako, koristimo i Gauss-Laguerrovu integracijsku formulu:

$$\int_0^{\infty} e^{-\eta} f(\eta) d\eta \approx \sum_{j=1}^N w_j f(x_j),$$

gdje su  $x_j$  nultočke polinoma  $L_N(\eta)$  i  $w_j$  pripadne težine. Modificirana formula za naše potrebe glasi:

$$\int_0^{\infty} f(\eta) d\eta \approx \sum_{j=0}^{\text{NGL}} w_l(j) f(x_l(j)), \quad (32)$$

gdje su  $x_l(j)$  nepromijenjeni čvorovi, a u težine  $w_l(j)$  je apsorbiran faktor  $e^{x_l(j)}$ . U našem je slučaju red formule  $\text{NGL} = 48$ . Napomenimo samo da su prethodne integracijske formule (odnosno težine i čvorovi) dobiveni zahtjevom egzaktnosti formula za polinome što većeg stupnja. Definirajmo bazu za razvoj:

$$\begin{aligned}|\Phi\rangle_{\alpha=(n_r, n_z, \Lambda, m_s)} &= \frac{1}{\sqrt{b_0^3 b_r^2 b_z}} \Psi_{n_z}(z) \Psi_{n_r}^\Lambda(r) \frac{e^{i\Lambda\phi}}{\sqrt{2\pi}} \chi_{m_s}, \\ \Psi_{n_z}(z) &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} n_z! 2^{n_z}}} H_{n_z}(z) e^{-z^2/2}, \\ \Psi_{n_r}^\Lambda(r) &= \sqrt{\frac{2n_r!}{(n_r + |\Lambda|)!}} \eta^{|\Lambda|/2} L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta) e^{-\eta/2}.\end{aligned}\quad (33)$$

Koriste se standardne pokrate:  $x = \frac{z}{b_0 b_z}$  i  $\eta = \left(\frac{r}{b_0 b_r}\right)^2$ . Prethodna baza čini potpun skup stanja za fermione spina 1/2 jer su te valne funkcije rješenja potencijala harmoničkog oscilatora:  $V(z, r) = \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2} m \omega_r^2 r^2$ . Oscilatorske duljine su definirane slično kao i u jednostavnom deformiranom *shell* modelu:

$$b_0 b_z = \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_0}}}_{b_0} \underbrace{e^{\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \beta_0}}_{b_z}, \quad b_0 b_r = \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_0}}}_{b_0} \underbrace{e^{-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \beta_0}}_{b_r},$$

gdje  $\beta_0$  definira deformaciju baze. U načelu, možemo izabrati bilo koje parametre  $\omega_0$  i  $\beta_0$  za razvoj, no obzirom na to da ćemo mi beskonačan skup stanja aproksimirati konačnim, rezultati ovise o ovom odabiru. Poslužiti ćemo se rezultatom jednostavnog *shell* modela: ako za radijus jezgre približno uzmemo  $1.2 A^{1/3}$  fm, tada je dobra procjena [11] za  $\omega_0$  uzeti:  $\hbar \omega_0 = 41 A^{1/3}$  MeV. Vrijednost parametra deformacije baze  $\beta_0$ , obično odabiremo nula, ali on može biti koristan u slučaju da radimo s konkretnom jezgrom za koju otprilike znamo koju deformaciju očekujemo, pa pogodan izbor  $\beta_0$  može ubrzati račun i povećati točnost razvoja.

U navedenoj bazi razvijamo veliku  $f^{(U/V)}$  i malu  $g^{(U/V)}$  komponentu spinora  $U/V$ :

$$f^{(U/V)}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{(U/V)} |\Phi\rangle_{\alpha}, \quad g^{(U/V)}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} g_{\alpha}^{(U/V)} |\Phi\rangle_{\alpha}. \quad (34)$$

Postavlja se pitanje kako ograničiti sumaciju po indeksima  $\alpha, \tilde{\alpha}$ , odnosno, koje sve funkcije odabrati za razvoj? Ispostavlja se da neorganiziran odabir stanja u razvoju (34), dovodi do pojave tzv. spurioznih stanja. Taj problem je riješen tako da se odabre neki oscilatorski glavni kvantni broj  $N_{max}$  i da se velika komponenta razvija po svim mogućim  $\alpha = (n_r, n_z, \Lambda, m_s)$  takvima da je  $N_\alpha = 2n_r + n_z + |\Lambda| \leq N_{max}$ , dok se mala komponenta razvija po svim mogućim  $\tilde{\alpha} = (\tilde{n}_r, \tilde{n}_z, \tilde{\Lambda}, \tilde{m}_s)$  za koje je  $N_{\tilde{\alpha}} = 2\tilde{n}_r + \tilde{n}_z + |\tilde{\Lambda}| \leq N_{max} + 1$ . U našem slučaju obično se koristi paran  $N_{max} =: N_{OFX} = 12$ .

Primijetimo da zbog pretpostavke o invarijantnosti jezgre na obrat vremena, nema smisla u razvoj stavljati stanja s negativnim  $\Omega = \Lambda + m_s$ , već zbog simetrije, svuda gdje nam treba (primjerice u gustoćama (27)) suma po svim stanjima, samo dodamo faktor 2. Samim time je uvijek  $|\Lambda| = \Lambda$ .

Zbog toga što su svi operatori u RHB jednadžbi (25) invarijantni na  $\Omega^\Pi$  simetriju, bazu je povoljnije urediti u  $\Omega^\Pi$  blokove:

$$\Omega^\Pi = \frac{1^+}{2}, \frac{1^-}{2}, \frac{3^+}{2}, \frac{3^-}{2}, \dots, \frac{25^+}{2}, \frac{25^-}{2}, \frac{27^+}{2},$$

indeksiranim s:  $i_b = 1, 2, \dots, 2N_{OFX}+3 := n_b$ . Kako je paritet male komponente suprotan od velike (operator je  $\gamma^0$ ) i jer je paritet bazne funkcije  $\Phi_\alpha(\mathbf{r})$  jednak  $(-1)^{n_z + \Lambda} = (-1)^{N_\alpha}$ , lako se iskonstruiraju svi mogući kvantni brojevi  $\alpha, \tilde{\alpha}$  baznih vektora u pojedinom  $i_b$  bloku. Jednostavnije je pokazati primjerom za blok  $\Omega^\Pi = 23/2^+$ :

	$N_{\alpha/\tilde{\alpha}}$	$n_r$	$n_z$	$\Lambda$	$m_s$
$f$ komponenta:	12	0	0	12	-1/2
	12	0	1	11	+1/2
$g$ komponenta:	11	0	0	11	+1/2
	13	1	0	11	+1/2
	13	0	1	12	-1/2
	13	0	2	11	+1/2

Ovime su navedeni svi mogući kvantni brojevi takvi da je:  $\Omega = \Lambda + m_s = 23/2$ , paritet velike (male) komponente je +1 (-1) i glavni oscilatorski kvantni broj  $N$  za veliku (malu) komponentu ne prelazi  $N_{OFX}=12$  ( $N_{OFX}+1 = 13$ ). Ako se sve moguće takve kombinacije po svim blokovima zbroje, razvijamo po ukupno 1015 stanja u slučaju  $N_{OFX}=12$ . Javlja se jedan praktični problem, a to je izračunati koliko takvih stanja ima za dani  $N_{OFX}$  kako bismo znali rezervirati polja u memoriju određenih dimezija. U Dodatku D dana je ilustracija takvog računa.

Mezonska polja, također razvijamo u bazi harmoničkog oscilatora. Želimo da polja  $\sigma, \omega, i, \rho$ , imaju  $\Lambda = 0$  i  $\Pi = +1$  paritet, pa mezonska polja razvijamo u bazi (33):

$$[\sigma/\omega/\rho](\mathbf{r}) = \sum_{(n'_r, n'_z)} \Phi_{(n'_r, n'_z, \Lambda=0)}^{[\sigma/\omega/\rho]}(\mathbf{r}), \quad (35)$$

tako da suma ide po svim parovima  $(n'_r, n'_z)$ , za koje je  $N = 2n'_r + n'_z = 0, 2, 4, \dots, N_{OFX}$ . U našem slučaju, koristi se  $N_{OFX} = 20$ . Ta će polja dovoljno brzo trnuti (Yukawina funkcija) pa je razvoj po trnućim funkcijama  $\Phi_\alpha(\mathbf{r})$  dobra aproksimacija, ali u slučaju dalekodosežnog fotonskog  $A_0(\mathbf{r})$  polja, direktno ćemo integrirati Coulombov doprinos.

Funkcije za razvoj  $\Phi_\alpha(\mathbf{r})$  realizirane su tako da su u polja  $q_h, q_{h1}, q_l, q_{l1}$  spremljene vrijednosti funkcija:

$$q_h(n_z, i) = \sqrt{w_h(i)} \Psi_{n_z}(b_0 b_z x_h(i)),$$

$$q_{h1}(n_z, i) = \sqrt{w_h(i)} \frac{d}{d(\frac{z}{b_0 b_z})} \Psi_{n_z}(b_0 b_z x_h(i)), \quad (36)$$

$$q_l(n_r, \Lambda, j) = \sqrt{\frac{w_l(j)}{2}} \Psi_{n_r}^\Lambda(b_0 b_r \sqrt{x_l(j)}),$$

$$q_{l1}(n_r, \Lambda, j) = \sqrt{\frac{w_l(j)}{2}} \frac{d}{d(\frac{r}{b_0 b_r})} \Psi_{n_r}^\Lambda(b_0 b_r \sqrt{x_l(j)}), \quad (37)$$

gdje su  $i = 0, 1, \dots, N_{GH}$ ,  $j = 0, 1, \dots, N_{GL}$ . Detalji, kako se točno izvrijedne funkcije (36,37), dani su u Dodatku E.

## 2.2 Prijelaz u konfiguracijski prostor

Integro-diferencijalnu jednadžbu moguće je razvojem u bazi svesti na matricnu jednadžbu (pogodnu za računanje) u prostoru koeficijenata razvoja - konfiguracijski prostor. Tada je RHB (25) jednadžba, zapisana u bazi  $(|\Phi_\alpha\rangle)_\alpha = \cup_{i_b} (|\Phi_{\alpha, i_b}\rangle)_{\alpha, i_b}$  organiziranoj po blokovima, ekvivalentna svojstvenom problemu po blokovima s matricama (za neutron  $t_z = 1$  i proton  $t_z = -1$  posebno):

$$\begin{bmatrix} \mathcal{A}-\lambda & \mathcal{B}^\tau & \Delta & 0 \\ \mathcal{B} & \mathcal{C}-\lambda & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & -\mathcal{A}+\lambda & -\mathcal{B}^\tau \\ 0 & 0 & -\mathcal{B} & -\mathcal{C}+\lambda \end{bmatrix}_{i_b} \cdot \quad (38)$$

Detaljan raspis prijelaza u konfiguracijski prostor dan je u Dodatku A. Definicije pojedinih podmatrica u (38) su:

$\mathcal{A}_{(\alpha, \alpha')} := \langle \Phi_\alpha | V+S | \Phi_{\alpha'} \rangle$ ,  $\mathcal{C}_{(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')} := \langle \Phi_{\tilde{\alpha}} | V-S-2mc^2 | \Phi_{\tilde{\alpha}'} \rangle$ ,  $\mathcal{B}_{(\tilde{\alpha}, \alpha)} := \langle \Phi_{\tilde{\alpha}} | -ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_\alpha \rangle$  i  $\Delta_{(\alpha, \beta)} := \langle \Phi_\alpha | \hat{\Delta}_{ff} | \Phi_\beta \rangle$ . Prethodne podmatrice, možemo izračunati tek kada znamo gustoće (27):  $\rho_s, \rho_v$  i  $\rho_{fv}$ , na Gaussovoj mreži čvorova  $(b_0 b_z x_h(i), b_0 b_r \sqrt{x_l(j)})$  i tenzor sparivanja (29)  $\hat{\kappa}_{\alpha, \alpha'}$ . Naime, podmatricu  $\mathcal{B}$  uvijek znamo (Dodatak B), ali za podmatrice  $\mathcal{A}$  i  $\mathcal{C}$  potrebni su nam potencijali  $V(\mathbf{r})$  i  $S(\mathbf{r})$  (Dodatak C), a kako su potencijali definirani gustoćama (27), problem treba rješavati samosuglasno (obično se govori o *self-consistent* rješenju). Isto tako, da bismo izračunali tenzor sparivanja (29) iz podmatrice  $\Delta$ , potrebni su nam svojstveni vektori - dakle već gotova rješenja problema (38).

Polazeći od grube početne procjene potencijala  $V(\mathbf{r})$  i  $S(\mathbf{r})$ , (npr. potencijali Woods-Saxon oblika) izračunamo početne podmatrice  $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$  i  $\Delta$ , zatim rješavanjem (38) u konfiguracijskom prostoru, izračunamo nove  $U, V$  spinore, odnosno gustoće (27), i pomoću njih izračunamo novu i bolju aproksimaciju podmatrica  $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$  i  $\Delta$ . Postupak se ponavlja sve dok novo dobivene matrice nisu praktički jednake kao i prethodne, naravno, do određene tolerancije  $\epsilon$  u matricnoj normi. U ostatku poglavlja, opisuje se kako je konstruirana inicijalizacija, te kako u  $i$ -toj iteraciji, pronaći podmatrice  $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$  i  $\Delta$ , potrebne za iduću  $(i+1)$ -u iteraciju.

## 2.3 Inicijalizacija podmatrica

Podmatrica  $\mathcal{B}$  pretstavlja kinetički doprinos, i ona je ista u svakoj iteraciji. Definirajmo potencijale  $U(\mathbf{r})=V(\mathbf{r})+S(\mathbf{r})$  i  $W(\mathbf{r})=V(\mathbf{r})-S(\mathbf{r})$ . Oni nam trebaju za podmatrice  $\mathcal{A}$  i  $\mathcal{C}$ . Prethodna istraživanja [12], koja nisu uključivala sparivanje, i nisu bila s *density-dependent* konstantama vezanja, bavila su se samo rješavanjem Hamiltonijana (12). Tražili su se pogodni potencijali  $U$  i  $W$ , koji aproksimiraju potencijale dobivene potpunim samokonzistentnim rješenjem. Kako brzina konvergencije računa bitno ovisi o početnoj pretpostavci rješenja, koriste se rezultati navedenih ranijih istraživanja za inicijalizaciju potencijala  $U$  i  $W$ . Predloženi su jednostavni deformirani Woods-Saxon potencijali sa svega nekoliko parametara:

$$U_{p/n}(\mathbf{r}) = \frac{V_{p/n}^0}{1 + \exp\left(\frac{|r| - R_{p/n}(\mathbf{r})}{a_{p/n}}\right)}, \quad W_{p/n}(\mathbf{r}) = \frac{-\lambda_{p/n} V_{p/n}^0}{1 + \exp\left(\frac{|r| - R_{p/n}(\mathbf{r})}{a_{p/n}}\right)}, \quad (39)$$

gdje su funkcije deformacije ovisne o parametru  $\beta_i$ :

$$\frac{R_{p/n}(\mathbf{r})}{r_0^{p/n} A^{1/3}} = \frac{R_{p/n}^{ls}(\mathbf{r})}{r_0^{ls,p/n} A^{1/3}} = (1 + \beta_i \sqrt{\frac{5}{16\pi}})^{\frac{1}{3}} (1 + \beta_i \sqrt{\frac{5}{16\pi}})^{\frac{2}{3}} (1 + \beta_i \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)).$$

Ponovno, parametar  $\beta_i$  obično se postavi na 0 osim ako točno znamo kakvu deformaciju očekujemo. Konkretni vrijednosti parametara:  $V_{p/n}^0$ ,  $\lambda_{p/n}$ ,  $a_{p/n}$ ,  $a_{p/n}^{ls}$ ,  $r_0^{p/n}$  i  $r_0^{ls,p/n}$ , dane su u [12]. Treba napomenuti da u potencijalima  $U_p$  i  $W_p$ , u slučaju protona, nije uračunat Coulombov doprinos. Prva aproksimacija koja se koristi za inicijalizaciju je energija interakcije protona sa sferičnom sredicom naboja  $eZ$  i radijusa  $r_0^p A^{1/3}$ . Na taj način inicijaliziramo  $U$  i  $W$ , pomoću kojih izračunamo početne podmatrice  $\mathcal{A}$  i  $C$ , za svaki  $i$ b blok.

Za početno sparivanje odabiremo monopolno sparivanje jakosti  $\Delta_0 = 1$  MeV. To samo znači da je za svaki  $i$ b blok, podmatrica  $\Delta_{(\alpha,\beta)} = \Delta_0 \delta_{\alpha,\beta}$  skalarna matrica.

Za početni kemijski potencijal  $\lambda^0$ , temeljem iskustva odaberemo:  $\lambda_{t_z=\pm 1}^0 = -7$  MeV.

## 2.4 Iterativno rješavanje

Sada kada imamo bazu iteracije, pokazujemo korak, odnosno, pretpostavljamo da znamo u  $i$ -toj iteraciji matrice (38) za protone i neutrone, u svakom  $i$ b bloku, te pokazujemo kako doći do istih matrica samo u  $(i+1)$ -oj iteraciji.

Za svaki  $i$ b blok dijagonaliziramo matricu (38) tako da uzmemo staru vrijednost kemijskog potencijala  $\lambda^i$ . Na taj način dobijemo energije  $E_k$  i svojstvene vektore  $(U_k, V_k)$ , u obliku koeficijenata u razvoju. Nakon toga imamo da je vektorska gustoća (27) u *no-sea* aproksimaciji:

$$\rho_{t_z}^i(\mathbf{r}) = \sum_{E_k < 1 \text{ GeV}} \sum_{E_k > 0} |f_{t_z,k}^{(V)}(\mathbf{r})|^2 + |g_{t_z,k}^{(V)}(\mathbf{r})|^2. \quad (40)$$

Integriranjem gustoće po čitavom  $\mathbf{R}^3$ , uz korištenje razvoja (34) i ortonormiranosti vektora baze  $|\Phi_\alpha\rangle$ , slijedi:

$$N_{t_z} = \sum_{E_k < 1 \text{ GeV}} \sum_{E_k > 0} 2 \times \sum_{i,b} \left( \sum_{\alpha_{i,b}} (f_{\alpha_{i,b}}^{(V_{t_z,k})})^2 + \sum_{\tilde{\alpha}_{i,b}} (g_{\tilde{\alpha}_{i,b}}^{(V_{t_z,k})})^2 \right), \quad (41)$$

gdje je  $N_{t_z} = A - Z$  za  $t_z = 1$ , odnosno  $N_{t_z} = Z$  za  $t_z = -1$ . Obzirom da kemijski potencijal još nije točan, ako izračunamo nakon dijagonalizacije desnu stranu u (41), nećemo dobiti zadani broj protona/neutrona. To postavimo kao problem traženja nultočke  $\lambda^* = \lambda^{i+1}$  s varijablom  $\lambda$  i primijenimo kombiniranu metodu sekante i bisekcije [9]. Empirijski uzmemo da je traženi  $\lambda^*$  unutar intervala  $[\lambda^i - 100 \text{ MeV}, \lambda^i + 100 \text{ MeV}]$ , te pomoću sekante pronađemo idućeg kandidata za nultočku. Ako slučajno novi kandidat izađe van intervala unutar kojeg se sigurno nalazi nultočka, napravimo bisekciju rubova intervala za sljedećeg kandidata. U protivnom, uzmemo novog kandidata kojeg daje sekanta i suzimo rubove intervala unutar koje je nultočka. Na taj način dobivamo svojstvene spinore  $(U_k, V_k)$  u konfiguracijskom prostoru tako da su očekivani brojevi protona i neutrona jednaki zadanim.

Primijetimo da nam uvelike pomaže simetrija sustava i organizacija baze po blokovima. Naime, složenost dijagonalizacije je  $O(n^3)$  te kada ne bismo organizirali bazu po blokovima, imali bismo primjerice  $\approx n^3$  operacija. Ako, jednostavnosti radi, imamo 10 blokova jednakih dimenzija, onda je ukupan broj operacija u dijagonalizaciji  $10 \times (\frac{n}{10})^3$  što je oko 100 puta manje operacija po jednoj dijagonalizaciji!

Iduće što treba napraviti je izračunati gustoće (27) u koordinatnom prostoru, odnosno na Gaussovoj mreži čvo-

rova. Najprije izračunamo matricu gustoće po blokovima:

$$\rho_{t_z, n_1, n_2}^{t_z, i, b} = \sum_{E_k^{i,b} < 1 \text{ GeV}} \sum_{E_k^{i,b} > 0} (V_{t_z,k}^{\text{konf.}})_{n_1} (V_{t_z,k}^{\text{konf.}})_{n_2}, \quad (42)$$

gdje je  $V_{t_z,k}^{\text{konf.}} = [(f_{\alpha_{i,b}}^{(V_{t_z,k})})_{\alpha_{i,b}}, (g_{\tilde{\alpha}_{i,b}}^{(V_{t_z,k})})_{\tilde{\alpha}_{i,b}}]$ , Diracov  $V_{k,t_z}(\mathbf{r})$  spinor prikazan u konfiguracijskom prostoru. Iz definicije gustoća (27), uvrštavanjem razvoja (34) tada vrijedi:

$$\rho_{v/s}(\mathbf{r}) = 2 \times \sum_{t_z, i, b} \left[ \sum_{\alpha_{i,b}, \alpha'_{i,b}} \delta_{m_s, m'_s} \delta_{\Lambda, \Lambda'} \rho_{\alpha_{i,b}, \alpha'_{i,b}}^{t_z, i, b} \Phi_{\alpha_{i,b}}(\mathbf{r}) \Phi_{\alpha'_{i,b}}^*(\mathbf{r}) + \sum_{\tilde{\alpha}_{i,b}, \tilde{\alpha}'_{i,b}} \delta_{\tilde{m}_s, \tilde{m}'_s} \delta_{\tilde{\Lambda}, \tilde{\Lambda}'} \rho_{\tilde{\alpha}_{i,b}, \tilde{\alpha}'_{i,b}}^{t_z, i, b} \Phi_{\tilde{\alpha}_{i,b}}(\mathbf{r}) \Phi_{\tilde{\alpha}'_{i,b}}^*(\mathbf{r}) \right]. \quad (43)$$

Kako imamo spremljenu matricu gustoće i funkcije baze (36,37) na Gaussovoj mreži, lako izvrijednimo  $\rho_s$ ,  $\rho_v$ , i  $\rho_{lv}$ , na Gaussovoj mreži čvorova. Također, kao što ćemo upravo vidjeti, treba nam i Laplacijan  $\nabla^2 \rho_v^p(\mathbf{r})$  protonske gustoće na mreži čvorova. Direktnom primijenom  $\nabla^2$  operatora na (43), korištenjem  $\nabla^2(fg) = g\nabla^2 f + f\nabla^2 g + 2\nabla f \cdot \nabla g$ , i činjenice da  $\Phi_\alpha(\mathbf{r})$  rješavaju Schrödingerovu jednadžbu za QHO (znamo  $\nabla^2 \Phi_\alpha(\mathbf{r})$ ), dobiva se (Dodatak F) izraz za  $\nabla^2(\Phi_\alpha \Phi_\alpha^*)$ , a time i izraz za  $\nabla^2 \rho_v^p(\mathbf{r})$  (77).

Sada možemo računati bozonska polja na Gaussovoj mreži jer su nam samo ona potrebna za potencijale  $V(\mathbf{r})$  i  $S(\mathbf{r})$ , u računanju podmatrica  $\mathcal{A}$  i  $C$ . No, najprije izračunajmo Coulombov doprinos u vektorskom potencijalu  $V$  za protone.

## Coulombova interakcija

Međudjelovanje protona na položaju  $\mathbf{r}$  s ostatkom jezgre je:

$$eA_0(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbf{R}^3} \frac{\rho_v^p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int_{\mathbf{R}^3} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-\nabla^2} \rho_v^p(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (44)$$

gdje je korišteno:  $\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{2} \nabla'^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ , Greenov identitet i činjenica da protonska gustoća trne eksponencijalno u beskonačnosti. Nadalje, s kako je protonska gustoća aksijalno simetrična, moguće je egzaktno integrirati po kutu  $\phi$ :

$$eA_0(\mathbf{r}) = 2\pi\hbar c \alpha \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_0^{\infty} r' dr' \sqrt{(r+r')^2 + (z-z')^2} E\left(\frac{4rr'}{(r+r')^2 + (z-z')^2}\right) \nabla'^2 \rho_v^p(\mathbf{r}'), \quad (45)$$

gdje je  $E(m) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - m \sin^2 \phi} d\phi$ , potpun eliptični integral druge vrste. Postoji [13] jednostavna aproksimativna formula za  $E(m)$ , velike preciznosti koju praktično možemo smatrati egzaktnom. Time je efektivno Poissonova jednadžba (16) riješena metodom Greenove funkcije:

$$eA_0(\mathbf{r}) = 2\pi\hbar c b_0^3 b_z^2 \int_0^{\infty} dx' \int_0^{\infty} d\eta' G(x, \eta, x', \eta') \nabla'^2 \rho_v^p(b_0 b_z x', b_0 b_r \sqrt{\eta'}),$$

$$\frac{2\pi}{\alpha} G(x, \eta, x', \eta') = \sum_{s=\pm 1} b_0 \sqrt{b_z^2 (x + sx')^2 + b_r^2 (\sqrt{\eta} - \sqrt{\eta'})^2} E\left(\frac{4b_r^2 \sqrt{\eta} \sqrt{\eta'}}{b_z^2 (x + sx')^2 + b_r^2 (\sqrt{\eta} - \sqrt{\eta'})^2}\right). \quad (46)$$

Točno tako je i implementirana Greenova funkcija. Prije ulaska u postupak iteracije, izračunata je Greenova funkcija na dvostrukoj Gaussovoj mreži čvorova. Dakle, sada kada imamo Laplacijan protonske gustoće, možemo pomoću (31,32), aproksimacijom integrala izvrijedniti  $eA(\mathbf{r})$  na čitavoj mreži čvorova.

## Mezonska polja

Također, sada kada imamo gustoće (27), možemo rješavati Klein-Gordonove jednadžbe (15), koje su sve oblika:

$$\left(-\nabla^2 + \frac{m_i^2 c^2}{\hbar^2}\right) \Psi_i(\mathbf{r}) = s_i(\mathbf{r}), \quad (47)$$

gdje je  $i = \sigma, \omega, \rho$ , a  $s_i(\mathbf{r})$  su pripadni izvori koji su nam sada poznati. U Klein-Gordonove jednadžbe uvrštimo razvoj me-

zonskih polja (35), te skalarnim množenjem slijeva funkcijom  $\Phi_{(n_r, n_z, \Lambda=0)}(\mathbf{r})$ , za neki fiksiran dozvoljen par  $(n_r, n_z)$  u razvoju t.d.  $2n_r + n_z = 0, 2, \dots, N_{\text{OXB}}=20$ , dobivamo:

$$\sum_{(n'_r, n'_z)} \mathcal{H}_{(n_r, n_z)(n'_r, n'_z)} \phi_{(n'_r, n'_z)}^i = \int_{\mathbf{R}^3} s_i(\mathbf{r}') \Phi_{(n_r, n_z, \Lambda=0)}^*(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (48)$$

Gdje je matrica  $\mathcal{H}$  dana u (78) (Dodatak G). Prethodni set jednadžbi shvatimo kao linearan sustav jednadžbi: par indeksa  $(n_r, n_z)$ , kao i za fermione  $\alpha, \tilde{\alpha}$ , shvatimo kao jedan indeks, te za svaki taj indeks izračunamo integral s desne strane. Primijetimo da matrica linearnog sustava  $\mathcal{H}$  ne ovisi o iteraciji, pa ju možemo prije ulaska u iterativan postupak invertirati. Na taj način možemo koeficijente u razvoju mezonskih polja efikasno dobiti kao umnožak matrice  $\mathcal{H}^{-1}$  i vektora:

$$\phi_{(n_r, n_z)}^i = \sum_{(n'_r, n'_z)} \mathcal{H}_{(n_r, n_z)(n'_r, n'_z)}^{-1} \left[ \int_{\mathbf{R}^3} s_i(\mathbf{r}') \Phi_{(n'_r, n'_z, \Lambda=0)}^*(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right], \quad (49)$$

te ubacivanjem izračunatih koeficijenata razvoja u (35), dobijemo polja  $\sigma(\mathbf{r})$ ,  $\omega(\mathbf{r})$ , i  $\rho(\mathbf{r})$ , na mreži čvorova. Sada konačno imamo sve funkcije potrebne za izračunati potencijale  $V(\mathbf{r})$  i  $S(\mathbf{r})$  na mreži čvorova, a samim time (vidi Dodatak C) i matrice  $\mathcal{A}$  i  $\mathcal{C}$  za iduću iteraciju.

Još jedino preostaje matrica  $\Delta$ . Najprije je, prema formuli (26), potrebno izračunati matrice elemente sparivanja  $\langle \alpha_1, \alpha_2 | V^{pp} | \alpha'_1, \alpha'_2 \rangle$ . Izračun matrice elementa sparivanja dan je u Dodatku H. Po definiciji (26), ubacivanjem tenzora sparivanja (29) i matrice elementa sparivanja (81), matrice element  $\Delta_{(\alpha_1, \alpha_2)}$ , u zadanom `ib` bloku je:

$$\Delta_{(\alpha_1, \alpha_2)} = -\frac{G}{2} \sum_{N_r, N_z} W_{1,2}^{N_r, N_z} \left\{ \sum_{\alpha'_1, \alpha'_2} W_{1',2'}^{N_r, N_z} \left[ 2 \times \delta_{\alpha'_1, \alpha'_2} \sum_{\substack{E_k^{ib} < 1 \text{ GeV} \\ E_k^{ib} > 0}} f_{\alpha'_1}^{(V_k)} f_{\alpha'_2}^{(U_k)} \right] \right\}. \quad (50)$$

Suma po  $N_r, N_z$ , objašnjena je u Dodatku H, a suma po  $\alpha'_1, \alpha'_2$  ide po svim indeksima u razvoju velike komponente spinora.

### Ograničavanje kvadrupolnog momenta $\langle \hat{Q} \rangle$

Ovaj model se prvenstveno bavi osnovnim stanjem jezgre i kao rješenje ćemo dobiti deformaciju jezgre  $\beta$  u njenom osnovnom. Mi bismo željeli modificirati račun, tako da nam omogućuje ograničavanje kvadrupolnog momenta:

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int_{\mathbf{R}^3} (2z^2 - x^2 - y^2) \rho_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sqrt{\frac{9}{5\pi}} A (1.2A^{1/3} \text{ fm})^2 \beta_c, \quad (51)$$

na zadanu vrijednost  $q^0$ , odnosno da kao rješenje dobijemo jezgru u pobuđenom stanju sa zadanom deformacijom  $\beta_c$ . Najjednostavnija modifikacija dosadašnjeg računa je da se u varijacijski postupak, dodaje kvadratičan član energiji (8), koji tjera sustav u zadani kvadrupolni moment:

$$\langle \hat{H} \rangle \rightarrow \langle \hat{H} \rangle + \frac{c_0}{2} (q^0 - \langle \hat{Q} \rangle)^2. \quad (52)$$

Parametar  $c_0$  definira intenzitet kvadratičnog ograničenja. Nakon variranja, ovo efektivno znači da u potencijal  $V(\mathbf{r})$ , samo treba dodati novi član koji tjera sustav u zadani  $q^0$ :

$$V(\mathbf{r}) \rightarrow V(\mathbf{r}) + c_0 (\langle \hat{Q} \rangle - q^0) (2z^2 - x^2 - y^2). \quad (53)$$

Problem kod ovakvog jednostavnog pristupa je ovisnost rješenja o parametru krutosti  $c_0$ . Naime, premali  $c_0$  rezultira samosuglasnim rješenjem s velikim odstupanjem  $\langle \hat{Q} \rangle$  od zadanog  $q^0$ . Prevelik  $c_0$  često narušava konvergenciju iterativnog postupka. Ovaj nedostatak rješava proširena Lagrangeova metoda [14]. U energiju se dodaje i linearni član:

$$\langle \hat{H} \rangle \rightarrow \langle \hat{H} \rangle + \Lambda_c (q^0 - \langle \hat{Q} \rangle) + \frac{c_0}{2} (q^0 - \langle \hat{Q} \rangle)^2, \quad (54)$$

koji varijacijom generira novi potencijal:

$$V(\mathbf{r}) \rightarrow V(\mathbf{r}) + [c_0 (\langle \hat{Q} \rangle - q^0) - \Lambda_c] (2z^2 - x^2 - y^2). \quad (55)$$

Parametar  $\Lambda_c$  nije proizvoljan, nego je zadan kroz iteracije. U prvoj iteraciji koristi se  $\Lambda_c^0 = 0$ , a kroz iteracije je:

$$\Lambda_c^{i+1} = \Lambda_c^i + c_0 (q^0 - \langle \hat{Q} \rangle^i). \quad (56)$$

Dakle, na početku definiramo parametar  $c_0$  i željenu deformaciju jezgre  $\beta_c$ , što daje  $q^0 = \sqrt{\frac{9}{5\pi}} AR_0^2 \beta_c$ . U  $i$ -toj iteraciji kada imamo  $\rho_v(\mathbf{r})$ , izračunamo  $\langle \hat{Q} \rangle^i$  aproksimacijom integrala (51) na mreži čvorova. Izračunamo  $\Lambda_c^{i+1}$  i dodamo novi član (55) potencijalu  $V(\mathbf{r})$  na mreži.

Ovime je pokazan korak iteracije, odnosno, imamo nove matrice (38) po blokovima `ib`, s kojima možemo ući u novu iteraciju. Dobra je praksa kroz svaku iteraciju izračunati očekivane vrijednosti nekih opservabli kao što je *rms* radijus, kvadrupolni, heksadekupalni moment i razni doprinosi energiji: kinetički, mezonski, Coulombov doprinos i energija sparivanja. One nisu nužne za samo iterativno rješavanje (osim  $\langle \hat{Q} \rangle^i$ ), ali služe da imamo kratak pregled zbivanja po iteracijama, primjerice, možemo tako dobiti indicaciju da treba povećati ili smanjiti parametar  $c_0$ .

### Broydenova metoda

Direktno korištenje izračunatih matrica nakon  $i$ -te iteracije u sljedećoj iteraciji nije numerički stabilno. Prvo poboljšanje koje se koristi je uzimanje konveksne linearne kombinacije matrica sa početka i kraja  $i$ -te iteracije, ali i taj je pristup često nestabilan. Obzirom da se isti problem javlja u raznim granama fizike gdje se koriste energijski funkcionali gustoće, razvijena je tzv. Broydenova rutina [15], originalno nastala za potrebe simulacija u kvantnoj kemiji. Radi se o efikasnoj generalizaciji metode sekante na višedimenzionalne funkcije  $B(\mathbf{V}) \in \mathbf{R}^m$  višedimenzionalnih varijabli  $\mathbf{V} \in \mathbf{R}^n$ .

U rutinu se najprije ubaci inicijalni vektor  $\mathbf{V}_0$ , a rutina vraća isti taj vektor  $B(\mathbf{V}_0) = \mathbf{V}_0$ . Pretpostavimo da smo do sada ubacili vektore  $\mathbf{V}_0, \mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_i$ , i da želimo ubaciti novi  $\mathbf{V}_{i+1}$ . Rutina najprije uspoređi vektor  $\mathbf{V}_{i+1}$  sa zadnje vraćenim vektorom  $B(\mathbf{V}_0, \mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_i)$ . Ako se ti vektori razlikuju za manje od  $\varepsilon$  u 1-normi:  $\|\mathbf{X}\|_1 = \sum_{j=1}^n |X_j|$ , rutina javlja da je postignuta samokonzistencija. U protivnom, rutina vraća novi vektor:  $B(\mathbf{V}_0, \mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_i, \mathbf{V}_{i+1})$ .

U našem slučaju korištena je  $\varepsilon = 10^{-6}$  preciznost. Mi želimo da nam matrice (38), prelaskom iz  $i$ -te u iduću iteraciju budu iste, pa je varijabla  $\mathbf{V}_i$ , za Broydenovu rutinu u našem slučaju :

$$\mathbf{V}_i = \left[ \bigoplus_{t_z, \text{ib}} LT(\mathcal{A}_{\text{ib}}^{t_z}) \oplus LT(\mathcal{C}_{\text{ib}}^{t_z}) \oplus LT(\Delta_{\text{ib}}^{t_z}) \right] \oplus (\lambda_n) \oplus (\lambda_p) \oplus (\Lambda_c), \quad (57)$$

gdje  $LT(A)$  označava donji trokut neke  $n \times n$  matrice  $A$ , napisan kao vektor s  $n(n+1)/2$  komponenti, a  $\bigoplus$  označava operaciju konkatencije vektora. Samo jedan trokut matrice nam je bitan jer su podmatrice u (38) simetrične, a podmatrica  $\mathcal{B}$  se ne mijenja kroz iteracije pa ju ne uključujemo.

Kako je opisano, Broydenova rutina nam, kada smo izračunali nove matrice (38) u  $i$ -toj iteraciji, ispituje jesu li dobivene matrice jednake prethodnim do na  $\varepsilon$ , te ovisno o tome ili generira nove matrice za iduću iteraciju, ili prekida iterativan postupak jer je postignuta samosuglasnost. Potreban broj iteracija ovisi o kompliciranosti strukture promatrane jezgre. Primjerice, za dvostruko magičnu jezgru  $^{16}\text{O}$  u osnovnom stanju dovoljno je 20 iteracija, dok za osnovno stanje jezgre  $^{20}\text{Ne}$  treba oko 180 iteracija.

## 2.5 Prijelaz u kanonsku bazu

Kada je postignuta samokonzistencija, riješena je RHB jednadžbu u kvazičestičnoj bazi (21) i treba se vratiti u kanonsku bazu da bismo dobili bolje razumijevanje Hartree-Bogoliubovljeve valne funkcije  $|\Phi\rangle$ . Matrica gustoće [16], je operator dan po blokovima s:

$$\hat{\rho}^{t_z, i_b}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\substack{E_k^{i_b} < 1 \text{ GeV} \\ E_k^{i_b} > 0}} V_{t_z, k}(\mathbf{r}) V_{t_z, k}^\dagger(\mathbf{r}'). \quad (58)$$

Njena matricna reprezentacija u bazi  $\{(|\Phi_{\alpha_{i_b}}\rangle, |\Phi_{\bar{\alpha}_{i_b}}\rangle)\}_{\alpha_{i_b}, \bar{\alpha}_{i_b}}$  je (42). Po definiciji [17], kanonsku bazu dobijemo iz prethodne kao onu koja dijagonalizira matricu gustoće. Svojevrsne vrijednosti  $v_\mu^2$  su vjerojatnosti okupacije pojedinih svojstvenih stanja  $|\Phi_\mu\rangle$ , a osnovno stanje jezgre  $|\Phi\rangle$  je BCS stanje s pripadnim vjerojatnostima okupacije jednonukleonskih stanja. Jednočestična energija stanja  $|\Phi_\mu\rangle$  u kanonskoj bazi je  $\epsilon_\mu = \langle \Phi_\mu | \hat{h}_D | \Phi_\mu \rangle$ , a energija sparivanja  $\Delta_\mu = \langle \Phi_\mu | \hat{\Delta} | \Phi_\mu \rangle$ . Prilikom dijagonalizacije, mnoge okupacije  $v_\mu^2 \in \{0, 1\}$  su degenerirane i nemaju jedinstveno određene energije. Zato dijagonalizacijom  $\hat{h}_D$  u degeneriranim potprostorima konačno dobivamo kanonsku bazu  $\{|\Phi_\mu\rangle\}_\mu$ , kao linearnu kombinaciju vektora baze  $\cup_{i_b} \{(|\Phi_{\alpha_{i_b}}\rangle, |\Phi_{\bar{\alpha}_{i_b}}\rangle)\}_{\alpha_{i_b}, \bar{\alpha}_{i_b}}$ , sa dobro definiranim vjerojatnostima okupacije i energijama. To možemo jer RHB generalizirani Hamiltonijan komutira s generaliziranom matricom gustoće (60).

Ovaj prijelaz u kanonsku bazu nije nužan ako nas primjerica zanima samo prostorna distribucija jezgre, ali nam služi da dobijemo uvid u spektar na jednočestičnoj razini.

Konačna energija jezgre računa se po formuli (23) (u kvazičestičnoj bazi) uz korekciju kinetičke energije prelaskom u sustav centra mase:

$$E_{cm} = -\frac{\langle \hat{\mathbf{P}}_{tot}^2 \rangle}{2mA}, \quad (59)$$

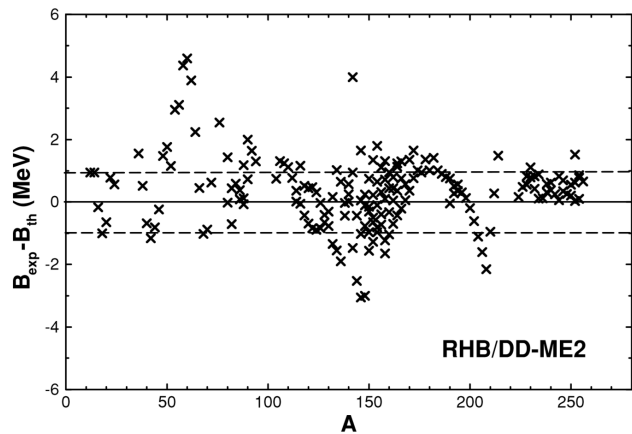
koja se računa u kanonskoj bazi raspisivanjem  $\hat{\mathbf{P}}_{tot}^2$  kao sumu po svim parovima operatora impulsa pojedinih svojstvenih stanja kanonske baze.

Konačna distribucija gustoće jezgre  $\rho_v(\mathbf{r})$ , koju znamo samo na Gaussovoj mreži s  $\text{NGH} \times \text{NGL} = 48 \times 48$  čvorova, interpolira se dvodimenzionalnom spline interpolacijom na ekvidistantnu mrežu  $(r_i[\text{fm}], z_i[\text{fm}]) \in [0, 8] \times [-8, 8]$ , obično s korakom  $\Delta r = \Delta z = 0.1$  fm, što je prikladno za crtanje grafova.

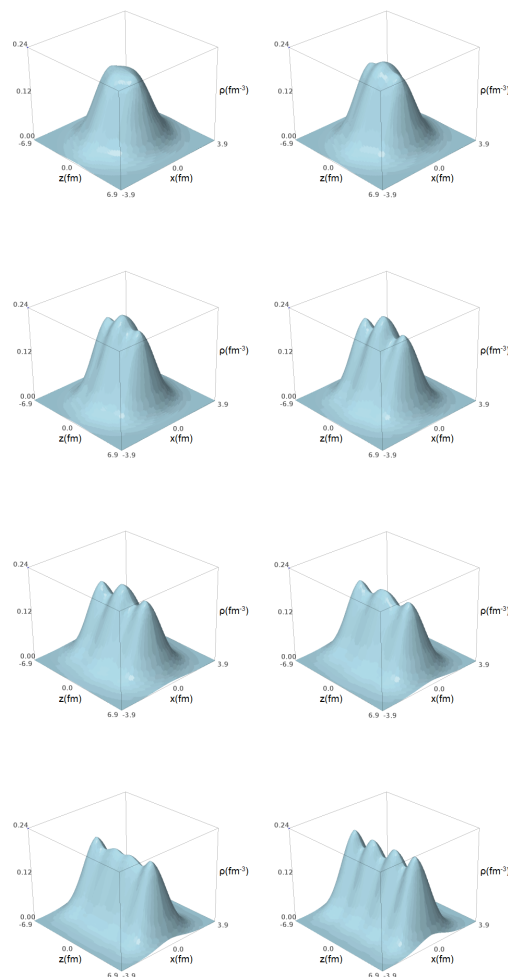
## 3 Rezultati

Najprije bi trebalo pogledati koliko dobro DD-ME2 parametrizacija Lagrangijana (tablica 1.) reproducira energije vezanja poznatih, parno-parnih jezgri. Na slici 1. prikazano je odstupanje eksperimentalnih od izračunatih energija vezanja za približno 200 stabilnih jezgara duž mape nuklida. Razne ostale usporedbe teorijskih s eksperimentalnim podacima dani su u ref. [18]. Valja napomeniti da je u ref. [18] korištena Gognyjeva interakcija sparivanja, no to nije toliko bitno za samu energiju vezanja jer je doprinos energiji zbog sparivanja reda veličine  $\approx 10$  MeV, dok su primjerice energije vezanja za teške jezgre  $\approx 1000$  MeV.

Zanimljivo je da DD-ME2 parametrizacija daje puno bolji opis formacije grozdova (tzv. *cluster* konfiguracije) u odnosu na često korištene nerelativističke funkcionalne, iako u sami model nigdje nije eksplicitno ugrađen mehanizam za lokalizaciju nuklearne materije. U ref. [19] i [20], detaljnije su proučene clusterske konfiguracije koje predviđa model. Ilustracije radi, promotrimo dvostruko magičnu jezgru  $^{16}\text{O}$  koja je u osnovnom stanju sferičnog oblika. Kako imamo mogućnost ograničavanja deformacije jezgre  $\beta_c$  (odnosno kvadrupolnog momenta (51)), promatrajmo kako izgleda



Slika 1. Odstupanja eksperimentalnih od teorijskih energija vezanja.



Slika 2. Distribucija gustoće jezgre  $^{16}\text{O}$ , na  $xz$  ravnini, u ovisnosti o ograničenoj deformaciji, redom:  $\beta_c = 0.8, 0.9, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0$  i  $3.5$ .

distribucija gustoće nukleona kada postupno deformiramo jezgru. Na slici 2. je prikazana evolucija gustoće jezgre  $\rho_v(\mathbf{r})$ , ako ju „rastežemo” povećavanjem  $\beta_c$ . Jasno se vide grozdovi četiri  $\alpha$  čestice, i u konačnici, jezgru možemo shvatiti kao „nuklearnu molekulu”:  $^{16}\text{O} = 4\alpha$ . To svojstvo DD-ME2 parametrizacije svakako predstavlja napredak ka formiranju

univerzalnog funkcionala koji bi dobro reproducirao sva poznata svojstva duž mape nuklida, što je uostalom i krajnji cilj teorije funkcionala gustoće. Navedimo da energija vezanja osnovnog stanja jezgre  $^{16}\text{O}$  koju predviđa model iznosi  $B_{th} = -127.82$  MeV, dok energija vezanja pobuđenog stanja s ograničenom deformacijom  $\beta_c = 3.5$  (posljednja konfiguracija sa slike 2) iznosi  $B_{th} = -91.34$  MeV. Dakle, tek na visoko pobuđenim deformacijama, postaju potpuno izraženi svi  $\alpha$  grozdovi.

Iako se model bavi osnovnim stanjem, moguće ga je u okviru aproksimacije slučajnih faza (QRPA) primijeniti i na dinamičke probleme. Primjerice u ref. [21] primijenjen je na problem izoskalarnih monopolnih pobuđenja. Ukratko, u osnovnu jednadžbu gibanja:

$$i\hbar\partial_t\mathcal{R}(t) = [\mathcal{H}(\mathcal{R}(t)), \mathcal{R}(t)], \quad \mathcal{R} = \begin{bmatrix} \hat{\rho} & \hat{\kappa} \\ -\hat{\kappa}^* & 1 - \hat{\rho}^* \end{bmatrix} \quad (60)$$

ubačena je slaba harmonička vanjska pobuda i promatrana je odzivna funkcija: izoskalarni monopolni operator. Generaliziran Hamiltonijan  $\mathcal{H}$  dan je u (25), a  $\mathcal{R}$  je generalizirana matrica gustoće.

Prethodno opisani model, bavio se isključivo aksijalno simetričnim jezgrama. Na sličan se način mogu implementirati modeli koji se bave sferičnim i općenitim triaksijalnim jezgrama [8]. Tada se razvija u bazi sferičnog, odnosno triaksijalnog, harmoničkog oscilatora. Slično se izračunaju matricni elementi podmatrica iz (38) u svakom slučaju posebno. Čak i kod triaksijalnog slučaja, pretpostavlja se simetrija obzirom na 8 oktana kako bi se ubrzao račun, slično kao i kod aksijalnog slučaja gdje nam je simetrija omogućila da rješavamo po  $\Omega^{\text{II}}$  blokovima nezavisno.

Vidimo da nakon što je implementiran jedan funkcional s određenom simetrijom, relativno lako možemo preinačiti implementaciju za razne druge relativističke funkcionale, s moguće različitim interakcijama sparivanja. Tako se, primjerice, koristi i efektivna *Density dependent Point Coupling* parametrizacija Lagrangijana (DD-PC1), iz koje je izbačena interakcija mezonima preko mezonskih polja, a svedena je na efektivnu, 4-fermionsku, kontaktnu interakciju:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi - \frac{1}{2}\alpha_S(\rho)(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \\ & - \frac{1}{2}\alpha_V(\rho)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TV}(\rho)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi) - \\ & - \frac{1}{2}\delta_S(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) - e\frac{1-t_z}{2}\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu\psi. \end{aligned} \quad (61)$$

Efektivna parametrizacija je pogodnija za računanje jer, primjerice u triaksijalnom slučaju, ne trošimo puno vremena računajući mezonska polja potrebna za potencijale  $V(\mathbf{r})$  i  $S(\mathbf{r})$ . Član s parametrom  $\delta_S$  je nužan za dobar opis interakcija konačnog dosega. Sada se slično kao i u poglavlju 1.1, može izračunati Hamiltonijan, odnosno, točan oblik potencijala  $V(\mathbf{r})$  i  $S(\mathbf{r})$ . Konstante vezanja dane su praktičnim ansatzom:

$$\alpha_i(\rho) = a_i + \left(b_i + c_i\frac{\rho}{\rho_{sat}}\right)e^{-d_i\frac{\rho}{\rho_{sat}}}, \quad i = S, V, TV, \quad (62)$$

gdje je  $\rho = \sqrt{j_\mu j^\mu}$ , slično kao i u 1.1. Rezultati koje predviđa parametrizacija (61), dani su u ref. [22].

## 4 Zaključak

U ovom seminaru detaljno je opisana implementacija rješenja konkretnog energijskog funkcionala gustoće. Pokazano je da simetrija fizikalnog sustava može uvelike ubrzati numeričko rješavanje problema. Opisani model,

iako kreće od fizikalnog Lagrangijana, nije *ab-initio* model, jer pretpostavlja konkretnu ovisnost konstanti vezanja o gustoći. Ipak, pokazano je da model zadovoljavajuće dobro reproducira bitne fizikalne opservable kao što su energija vezanja i formacija alfa clustera u jezgrama. Time DD-ME2 funkcional predstavlja bitan napredak ka formiranju univerzalnog funkcionala gustoće, koji bi se koristio za pouzdana (eksperimentu nedostupna) astrofizička istraživanja egzotičnih jezgri.

## Zahvale

Ovaj seminar nastao je pod mentorstvom prof. dr. sc. Tamare Nikšić. Zahvaljujem joj se na uloženom vremenu i pomoći.

## Literatura

- [1] P. Ring, Prog. Part. Nucl. Phys. 37 (1996) 193.
- [2] R. Brockmann, H. Toki, Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 3408.
- [3] R.J. Furnstahl, B.D. Serot, H.-B. Tang, Nuclear Phys. A618 (1997) 446.
- [4] G.A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 71 (2005) 024312.
- [5] H. Kucharek, P. Ring, Z. Phys. A 339 (1991) 23.
- [6] J.F. Berger, M. Girod, and D. Gogny, Nucl. Phys. A 428, 23c (1984).
- [7] Y. Tian, Z.Y. Ma, P. Ring, Phys. Rev. C 80 (2009) 024313.
- [8] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring, Prog. Comp. Phys. Comm. 185, 1808 (2014). Numerički kod moguće je preuzeti sa: [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AESN\\_v1\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AESN_v1_0.html).
- [9] Z. Drmač, V. Hari, M. Marušić, M. Rogina, Sanja Singer, Saša Singer, Numerička analiza, skripta PMF–Matematičkog odsjeka (2003).
- [10] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical recipes in FORTRAN; the art of scientific computing* (2nd edn. Cambridge University Press, New York, 1993).
- [11] Samuel S. M. Wong, *Introductory Nuclear Physics*, (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2004).
- [12] W. Koepf, P. Ring, Z. Phys. A - Hadrons and Nuclei 339, 81-90 (1991).
- [13] M. Abramowitz, I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York, 1970).
- [14] A. Staszack, M. Stoitsov, A. Baran, W. Nazarewicz, Eur. Phys. J. A 46 (2010) 85.
- [15] A. Baran, A. Bulgac, M.M. Forbes, G. Hagen, W. Nazarewicz, N. Schunck, M.V. Stoitsov, Phys. Rev. C 78 (2008) 014318.
- [16] P. Ring, P. Shuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, (Springer, 1980).
- [17] D. Vretenar, A.V. Afanasjev, G.A. Lalazissis, P. Ring, Phys. Rep. 409 (2005) 101.
- [18] G.A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 71 (2005) 024312.
- [19] J.-P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, and D. Vretenar, Nature 487, 341 (2012).
- [20] J.-P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, D. Vretenar, Phys. Rev. C 90, 054329.
- [21] T. Nikšić, N. Kralj, T. Tutiš, D. Vretenar, and P. Ring, Phys. Rev. C 88, 044327 (2013).
- [22] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 78 034318 (2008).



## 5 Dodaci

### Dodatak A:

#### RHB jednadžba u konfiguracijskom prostoru

Imamo RHB jednadžbu na operatorskoj razini:

$$\begin{bmatrix} \hat{h}_D - mc^2 - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D^* + mc^2 + \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = E_k \begin{bmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (63)$$

gdje spinore  $U_k(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} f^{(U_k)}(\mathbf{r}) \\ ig^{(U_k)}(\mathbf{r}) \end{bmatrix}$  i  $V_k(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} f^{(V_k)}(\mathbf{r}) \\ ig^{(V_k)}(\mathbf{r}) \end{bmatrix}$ , razvijamo u bazi  $\{|\Phi_\alpha\rangle\}_\alpha$  kao u (34).

Prvi redak u (63), kada se uvrsti  $\hat{h}_D$  iz (12), je ekvivalentan s:

$$\begin{bmatrix} V + S - \lambda & c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \\ c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) & V - S - 2mc^2 - \lambda \end{bmatrix} U_k + \begin{bmatrix} \hat{\Delta}_{ff} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V_k = E_k U_k. \quad (64)$$

Prvi redak prethodne jednadžbe je ekvivalentan s:

$$(V + S - \lambda)f^{(U_k)} + ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})g^{(U_k)} + \hat{\Delta}_{ff}f^{(V_k)} = E_k f^{(U_k)},$$

pa uvrštavanjem razvoja (34) i skalarnim množenjem s  $\langle \Phi_\alpha |$ , za neki fiksirani  $\alpha$ , dobiva se:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha'} \langle \Phi_\alpha | V + S - \lambda | \Phi_{\alpha'} \rangle f_{\alpha'}^{(U_k)} + \sum_{\alpha'} \langle \Phi_\alpha | ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_{\alpha'} \rangle g_{\alpha'}^{(U_k)} + \\ + \sum_{\beta'} \langle \Phi_\alpha | \hat{\Delta}_{ff} | \Phi_{\beta'} \rangle f_{\beta'}^{(V_k)} = E_k f_\alpha^{(U_k)}. \end{aligned} \quad (65)$$

Slično je i drugi redak u (64) ekvivalentan s:

$$-ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})f^{(U_k)} + (V - S - 2mc^2 - \lambda)g^{(U_k)} = E_k g^{(U_k)},$$

pa uvrštavanjem razvoja i skalarnim množenjem s  $\langle \Phi_{\tilde{\alpha}} |$ , za neki fiksirani  $\tilde{\alpha}$ , dobiva se:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha'} \langle \Phi_{\tilde{\alpha}} | -ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_{\alpha'} \rangle f_{\alpha'}^{(U_k)} + \\ + \sum_{\alpha'} \langle \Phi_{\tilde{\alpha}} | V - S - 2mc^2 - \lambda | \Phi_{\alpha'} \rangle g_{\alpha'}^{(U_k)} = E_k g_{\tilde{\alpha}}^{(U_k)}. \end{aligned} \quad (66)$$

Potpuno se analjno napravi i za drugi redak u jednadžbi (63), odnosno, za fiksirane  $\beta$  i  $\tilde{\beta}$  vrijede iduće jednadžbe:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha'} \langle \Phi_\beta | -\hat{\Delta}_{ff}^* | \Phi_{\alpha'} \rangle f_{\alpha'}^{(U_k)} + \sum_{\beta'} \langle \Phi_\beta | -V - S + \lambda | \Phi_{\beta'} \rangle f_{\beta'}^{(V_k)} + \\ + \sum_{\beta'} \langle \Phi_\beta | -ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_{\beta'} \rangle g_{\beta'}^{(V_k)} = E_k f_\beta^{(V_k)}, \end{aligned} \quad (67)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha'} \langle \Phi_\beta | ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_{\alpha'} \rangle f_{\alpha'}^{(V_k)} + \\ + \sum_{\beta'} \langle \Phi_\beta | -V + S + 2mc^2 + \lambda | \Phi_{\beta'} \rangle g_{\beta'}^{(V_k)} = E_k g_\beta^{(V_k)}. \end{aligned} \quad (68)$$

Primijetimo da zbog pretpostavke o očuvanju  $\Omega^\Pi$  (svojstvo svih operatora koji se javljaju) i zbog toga što smo funkcije u razvoju  $\{|\Phi_\alpha\rangle\}_\alpha$  organizirali po  $\Omega^\Pi$  blokovima, točnije  $(|\Phi_\alpha\rangle)_\alpha = \bigcup_{\text{ib}} (|\Phi_{\alpha_{\text{ib}}}\rangle)_{\alpha_{\text{ib}}}$ , gdje je  $\text{ib}$  indeks bloka, imamo da će svi gore navedeni matricni elementi iščezavati osim ako su  $\langle \Phi_\gamma |$  i  $|\Phi_\delta\rangle$  iz istog  $\Omega^\Pi$  bloka. Nadalje, zbog toga što ako izračunamo  $\hat{O}|\Phi_{\gamma_{\text{ib}}}\rangle$ , za neki od gore navedenih operatora  $\hat{O}$  koji čuva  $\Omega^\Pi$ , taj izračunati vektor ostaje u potprostoru razapetom vektorima baze  $(|\Phi_{\alpha_{\text{ib}}}\rangle)_{\alpha_{\text{ib}}}$ , istog bloka  $\text{ib}$ . No, upravo rečeno, po definiciji matricnog prikaza operatora na konačnodimenzionalnom prostoru (takav je naš jer mi beskonačne sume aproksimiramo konačnima), znači da je matricni prikaz cijele RHB jednadžbe (63) **blok dijagonalan**. Tada je jasno da svojstvene vrijednost/vektore možemo tražiti zasebno po  $\Omega^\Pi$  blokovima i na kraju ih samo konkatenerirati.

Fiksirajmo i promatrajmo sada neki  $\Omega^\Pi$  blok  $\text{ib}$ . Neka su  $n_f$  i  $n_g$  brojevi koliko mnogo ima funkcija u razvoju (34) od  $f^{(U/V)}$  i  $g^{(U/V)}$  respektivno u fiksiranom bloku  $\text{ib}$ . Npr. u slučaju  $\Omega^\Pi = 23/2^+$  iz 2.1 je  $n_f = 2$  i  $n_g = 4$ .

Definirajmo  $n_f \times n_f$  matricu  $(\mathcal{A}_{(\alpha,\alpha')}) := \langle \Phi_\alpha | V + S | \Phi_{\alpha'} \rangle$ ,

$n_g \times n_g$  matricu  $(\mathcal{C}_{(\tilde{\alpha},\tilde{\alpha}')} ) := \langle \Phi_{\tilde{\alpha}} | V - S - 2mc^2 | \Phi_{\tilde{\alpha}'} \rangle$ ,

$n_f \times n_f$  matricu  $(\mathcal{B}_{(\alpha,\alpha)}) := \langle \Phi_\alpha | -ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_\alpha \rangle$  i  $n_f \times n_f$

matricu  $(\Delta_{(\alpha,\beta)}) := \langle \Phi_\alpha | \hat{\Delta}_{ff} | \Phi_\beta \rangle$ , gdje se podrazumijeva da su navedeni bazni vektori iz  $\text{ib}$  bloka. Sada zbog antihermitičnosti i simetričnosti operatora  $\hat{\Delta}_{ff}$ , jednadžbe (65,66,67,68), za dani blok  $\text{ib}$ , mogu se zapisati u konfiguracijskom prostoru:

$$\begin{bmatrix} \mathcal{A}-\lambda & \mathcal{B}^\tau & \Delta & 0 \\ \mathcal{B} & \mathcal{C}-\lambda & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & -\mathcal{A}+\lambda & -\mathcal{B}^\tau \\ 0 & 0 & -\mathcal{B} & -\mathcal{C}+\lambda \end{bmatrix}_{\text{ib}} \begin{bmatrix} (f_\alpha^{(U_k)})_\alpha \\ (g_{\tilde{\alpha}}^{(U_k)})_{\tilde{\alpha}} \\ (f_\beta^{(V_k)})_\beta \\ (g_{\tilde{\beta}}^{(V_k)})_{\tilde{\beta}} \end{bmatrix}_{\text{ib}} = E_k \begin{bmatrix} (f_\alpha^{(U_k)})_\alpha \\ (g_{\tilde{\alpha}}^{(U_k)})_{\tilde{\alpha}} \\ (f_\beta^{(V_k)})_\beta \\ (g_{\tilde{\beta}}^{(V_k)})_{\tilde{\beta}} \end{bmatrix}_{\text{ib}}, \quad (69)$$

za indekse  $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, n_f$  i  $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta} = 1, 2, \dots, n_g$ .

U prethodnoj svojstvenoj jednadžbi, stupac skalara je zapisan npr. za  $U$  spinor kao:  $(f_\alpha^{(U_k)})_\alpha = (f_1^{(U_k)}, f_2^{(U_k)}, \dots, f_{n_f}^{(U_k)})$  i  $(g_{\tilde{\alpha}}^{(U_k)})_{\tilde{\alpha}} = (g_1^{(U_k)}, g_2^{(U_k)}, \dots, g_{n_g}^{(U_k)})$ . Slično i za  $V$  spinor.

### Dodatak B:

#### Izračun $\mathcal{B}$ matricnih elemenata

Lako je vidjeti da u cilindričnom sustavu vrijedi:

$$\frac{ic(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{\hbar c} = \begin{bmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} + i \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial}{r\partial\phi} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z}.$$

Neka su  $|\Phi_{\tilde{\alpha}}\rangle$ ,  $|\Phi_\alpha\rangle$  dva bazna vektora (33) iz istog  $\Omega^\Pi$  bloka, zadana s:  $\alpha = (n_r, n_z, \Lambda, m_s)$  i  $\tilde{\alpha} = (\tilde{n}_r, \tilde{n}_z, \tilde{\Lambda}, \tilde{m}_s)$ . Korištenjem poznatih rekurzija:  $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$  i  $H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$ , lako se izračuna:

$$\langle \Phi_{\tilde{\alpha}} | \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} | \Phi_\alpha \rangle = \frac{\delta_{n_r, \tilde{n}_r} \delta_{\Lambda, \tilde{\Lambda}} \delta_{m_s, \tilde{m}_s}}{b_0 b_z} \left( \sqrt{\frac{n_z}{2}} \delta_{n_z, \tilde{n}_z+1} - \sqrt{\frac{\tilde{n}_z}{2}} \delta_{n_z, \tilde{n}_z-1} \right). \quad (70)$$

$$\text{Slično, } \langle \Phi_{\tilde{\alpha}} | \begin{bmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} + i \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial}{r\partial\phi} | \Phi_\alpha \rangle = \frac{I_1 + I_2}{b_0},$$

$$I_{1/2} = \frac{\delta_{n_r, \tilde{n}_r} \delta_{\Lambda, \tilde{\Lambda} \pm 1} \delta_{m_s, \tilde{m}_s \mp 1}}{b_r} \int_0^\infty \psi_{n_r}^\Lambda \left( \frac{d\psi_{n_r}^\Lambda}{d(\frac{r}{b_0 b_r})} \pm \frac{\Lambda}{\sqrt{\eta}} \psi_{n_r}^\Lambda \right) \frac{d\eta}{2}, \quad (71)$$

gdje je integracijska varijabla  $\eta = (\frac{r}{b_0 b_z})^2$ . Član iz (70) se implementira direktno, ispitujući kvantne brojeve iz  $\alpha$  i  $\alpha'$ . Kako u polju  $q_1(n_r, \Lambda, j)$  imamo spremljeno  $q_1(n_r, \Lambda, j) = \sqrt{\frac{w_1(j)}{2}} \psi_{n_r}^\Lambda(b_0 b_r \sqrt{x_1(j)})$ , a u  $q_1(n_r, \Lambda, j) = \sqrt{\frac{w_1(j)}{2}} \frac{d}{d(\frac{r}{b_0 b_r})} \psi_{n_r}^\Lambda(b_0 b_z \sqrt{x_1(j)})$ , za  $j = 0, 1, \dots, \text{NGL}$ , tada možemo aproksimirati integrale  $I_1$  i  $I_2$ :

$$I_{1/2} \approx \frac{\delta_{n_r, \tilde{n}_r} \delta_{\Lambda, \tilde{\Lambda} \pm 1} \delta_{m_s, \tilde{m}_s \mp 1}}{b_0 b_r} \sum_{j=0}^{\text{NGL}} q_1(\tilde{n}_r, \tilde{\Lambda}, j) \left( q_1(n_r, \Lambda, j) \pm \frac{\Lambda q_1(n_r, \Lambda, j)}{x_1(j)} \right). \quad (72)$$

Dakle, sada je jasno kako bi se spremila matrica  $\mathcal{B}$  u memoriju, naprosto za dani blok  $\text{ib}$  prođemo po svim parovima

indeksa  $(\tilde{\alpha}, \alpha)$  u razvoju i iz (70,72) izračunamo:

$$-\frac{B(\tilde{\alpha}, \alpha)}{(\hbar c)/b_0} \approx I_1 + I_2 + \frac{\delta_{n_r, \tilde{n}_r} \delta_{\Lambda, \tilde{\Lambda}} \delta_{m_s, \tilde{m}_s}}{b_z} \left( \sqrt{\frac{n_z}{2}} \delta_{n_z, \tilde{n}_z+1} - \sqrt{\frac{\tilde{n}_z}{2}} \delta_{n_z, \tilde{n}_z-1} \right). \quad (73)$$

Primijetimo da ovaj kinetički dio RHB jednadžbe, ne ovisi o interakcijama pa ga je dovoljno samo jednom izračunati.

#### Dodatak C:

##### Izračun $\mathcal{A}$ i $\mathcal{C}$ matrice elemenata

Podsjetimo, u Gauss-Laguerrovoj integraciji (32) imamo aproksimaciju  $\int_0^\infty f(\eta) d\eta \approx \sum_{j=0}^{\text{NGL}} w_l(j) f(x_l(j))$ , dok u Gauss-Hermiteovoj integraciji (31), imam za parnu funkciju  $\int_{-\infty}^\infty f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{\text{NGH}} w_h(i) f(x_h(i))$ . Ponovno, uzmemo li dva bazna vektora iz bloka  $i_b$  određena s  $\alpha$  i  $\alpha'$ , imamo:

$$\mathcal{A}_{(\alpha, \alpha')} = \delta_{m_s, \tilde{m}_s} \int_{\mathbf{R}^3} \Phi_\alpha(\mathbf{r})^* (V(\mathbf{r}) + S(\mathbf{r})) \Phi_{\alpha'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (74)$$

što, uz  $U(\mathbf{r} = (z, r)) = V(\mathbf{r}) + S(\mathbf{r})$ , možemo aproksimirati s:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{(\alpha, \alpha')} &\approx \delta_{m_s, \tilde{m}_s} \delta_{\Lambda, \tilde{\Lambda}} \sum_{j=0}^{\text{NGL}} q_l(n_r, \Lambda, j) q_l(\tilde{n}_r, \tilde{\Lambda}, j) \times \\ &\times \sum_{i=0}^{\text{NGH}} q_h(n_z, i) q_h(\tilde{n}_z, i) \times U(b_0 b_z x_h(i), b_0 b_r \sqrt{x_l(j)}), \end{aligned} \quad (75)$$

Račun za  $\mathcal{C}(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')$  je potpuno isti, do na dijagonalan član  $2mc^2$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}') &\approx \delta_{\tilde{m}_s, \tilde{m}_s'} \delta_{\tilde{\Lambda}, \tilde{\Lambda}'} \sum_{j=0}^{\text{NGL}} q_l(\tilde{n}_r, \tilde{\Lambda}, j) q_l(\tilde{n}_r', \tilde{\Lambda}', j) \times \\ &\times \sum_{i=0}^{\text{NGH}} q_h(\tilde{n}_z, i) q_h(\tilde{n}_z', i) \times W(b_0 b_z x_h(i), b_0 b_r \sqrt{x_l(j)}) - \\ &- 2mc^2 \delta_{\tilde{m}_s, \tilde{m}_s'} \delta_{\tilde{\Lambda}, \tilde{\Lambda}'} \delta_{\tilde{n}_r, \tilde{n}_r'} \delta_{\tilde{n}_z, \tilde{n}_z'}, \end{aligned} \quad (76)$$

gdje je  $W(\mathbf{r} = (z, r)) = V(\mathbf{r}) - S(\mathbf{r})$ .

Dakle, ako na Gaussovoj integracijskoj mreži čvorova  $(b_0 b_z x_h(i), b_0 b_r \sqrt{x_l(j)})$ , imamo spremljene potencijale  $W$  i  $U$ , dikretnim prolaskom po svim parovima indeksa  $(\alpha, \alpha')$ ,  $(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')$ , lako izračunamo matrice  $\mathcal{A}$  i  $\mathcal{C}$  u proizvoljnom  $i_b$  bloku.

#### Dodatak D:

##### Prebrojavanje stanja u razvoju

Pretpostavimo da želimo odrediti koliko ukupno imamo stanja u razvoju (34) male  $g$  komponente. Gledamo za zadani  $N = 2n_r + n_z + \Lambda$  na koliko načina možemo pomoću  $n_r, n_z, \Lambda$ , dobiti  $N$ . Promotrimo formalan red potencija:

$$P(x) = (1 + x^2 + x^4 + \dots)(1 + x + x^2 + \dots)(1 + x + x^2 + \dots).$$

Jasno je da koeficijent uz  $x^N$  u  $P(x)$  upravo odgovara prethodnom broju načina (funkcija izvodnica). Ako se izračuna taj koeficijent uz  $x^N$ , dobije se:  $\binom{N}{2} + 1$ , za  $N$  paran i  $\frac{N+1}{2} \binom{N+1}{2} + 1$  za  $N$  neparan. Dakle, ukupan broj načina se dobije sumiranjem po svim  $N = 0, 1, \dots, \text{NOFX} + 1$ :

$$2 \times \left[ \sum_{N=0, \text{paran}}^{\text{NOFX}+1} \binom{N}{2} + \sum_{N=0, \text{neparan}}^{\text{NOFX}+1} \frac{N+1}{2} \left( \frac{N+1}{2} + 1 \right) \right],$$

s time da treba pomnožiti sa faktorom 2 jer imamo slobodu u  $m_s = \pm 1/2$ . No time smo prebrojali i slučajeve u kojima je  $\Lambda = 0$ , ali i  $m_s = -1/2$ , što daje  $\Omega < 0$ , pa treba izbaciti sve

takve, odnosno prebrojati sličnim postupkom, samo uz ograničenje  $\Lambda = 0, m_s = -1/2$ . Konačno se dobije broj stanja:

$$\frac{2}{3}(n+1)(n+2)(2n+3), \quad n = \text{NOFX}/2.$$

Na sličan se način izračuna broj stanja u razvoju mezonskih polja, broj stanja za veliku  $f$  komponentu i broj svih parova stanja  $\{\alpha_{i_b}, \alpha'_{i_b}\}$  po blokovima u razvoju od  $f$  koji nam treba za računanje matrice  $\Delta$ .

#### Dodatak E:

##### Implementacija baznih funkcija $\Phi_\alpha(\mathbf{r})$

Neka je  $i = 0, 1, \dots, \text{NGH}$  fiksna. Iz rekurzija  $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$  i  $H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$ , lako slijede rekurzije:

$$q_h(n_z, i) = \sqrt{\frac{2}{n_z}} x_h(i) q_h(n_z - 1, i) - \sqrt{\frac{n_z - 1}{n_z}} q_h(n_z - 2, i),$$

$$q_h(1(n_z, i) = \sqrt{2n_z} q_h(n_z - 1, i) - x_h(i) q_h(n_z, i).$$

Jer su  $H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x$ , lako se odredi inicijalizacija:  $q_h(0, i), q_h(1, i), q_h(1(0, i)$  i  $q_h(1(1, i)$  pa se rekurzivno izvrijedne  $q_h(n_z, i)$  i  $q_h(1(n_z, i)$  za proizvoljan  $n_z$ .

Neka je  $j = 0, 1, \dots, \text{NGL}$  fiksna. Iz rekurzija  $L_n^\alpha(\eta) = \frac{2n-1+\alpha-\eta}{n} L_{n-1}^\alpha(\eta) - \frac{n-1}{n} L_{n-2}^\alpha(\eta)$  i  $\eta L_n^\alpha(\eta) = n L_n^\alpha(\eta) - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(\eta)$  lako slijede rekurzije:

$$q_l(n_r, \Lambda, j) = \frac{2n_r-1+\Lambda-x_l(j)}{\sqrt{n_r(n_r+\Lambda)}} q_l(n_r-1, \Lambda, j) - \frac{\sqrt{(n_r-1)(n_r-1+\Lambda)}}{\sqrt{n_r(n_r+\Lambda)}} q_l(n_r-2, \Lambda, j),$$

$$q_l(1(n_r, \Lambda, j) = \frac{2n_r+\Lambda-x_l(j)}{\sqrt{x_l(j)}} q_l(n_r, \Lambda, j) - \frac{2\sqrt{n_r(n_r+\Lambda)}}{\sqrt{x_l(j)}} q_l(n_r-1, \Lambda, j).$$

Jer su  $L_0^\alpha(\eta) = 1, L_1^\alpha(\eta) = -\eta + \alpha + 1$ , lako se odredi inicijalizacija:  $q_l(0, \Lambda, j), q_l(1, \Lambda, j), q_l(1(0, \Lambda, j)$  i  $q_l(1(1, \Lambda, j)$ , pa se rekurzivno izvrijedne  $q_l(n_r, \Lambda, j)$  i  $q_l(1(n_r, \Lambda, j)$  za proizvoljne  $n_r$  i  $\Lambda$ . Na taj način efikasno u memoriju spremimo bazne funkcije  $\Phi_\alpha(\mathbf{r})$  po kojima razvijamo.

#### Dodatak F:

##### Laplacijan produkta funkcija $\nabla^2(\Phi_\alpha(\mathbf{r})\Phi_{\alpha'}(\mathbf{r}))$

Korištenjem identiteta:  $\nabla^2(fg) = g\nabla^2 f + f\nabla^2 g + 2\nabla f \cdot \nabla g$ , i činjenice da su funkcije baze rješenja QHO potencijala:

$$\nabla^2 \Phi_\alpha(\mathbf{r}) = 2 \left[ \frac{z^2}{2b_0^4 b_z^4} + \frac{r^2}{2b_0^4 b_r^4} - \frac{n_z + \frac{1}{2}}{b_0^2 b_z^2} - \frac{2n_r' + \Lambda + 1}{b_0^2 b_r^2} \right] \Phi_\alpha(\mathbf{r}),$$

direktno se izvede:

$$\begin{aligned} \nabla^2(\Phi_\alpha \Phi_{\alpha'})(b_0 b_z x_h(i), b_0 b_r \sqrt{x_l(j)}) = \\ \frac{2}{\pi b_0^3 b_z^2 b_r^2 w_h(i) w_l(j)} \left\{ \frac{q_{11} q_{11}' q_h q_h'}{b_0^2 b_z^2} + \frac{\Lambda^2 q_{11} q_{11}' q_h q_h'}{x_l(j) b_0^2 b_r^2} + \frac{q_{11} q_{11}' q_h q_h' + q_{11} q_{11}' q_h q_h' + q_{11} q_{11}' q_h q_h'}{b_0^2 b_z^2} \right. \\ \left. + q_{11} q_{11}' q_h q_h' \left[ \frac{x_l(j)}{b_0^2 b_r^2} + \frac{x_h(i)^2}{b_0^2 b_z^2} - \frac{2n_r + 2n_r' + 2\Lambda + 2}{b_0^2 b_r^2} - \frac{n_z + n_z' + 1}{b_0^2 b_z^2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (77)$$

gdje smo koristili  $\Lambda = \Lambda'$  jer u gustoći (43) imamo  $\delta_{\Lambda, \Lambda'}$ , te su korištene pokrate npr. :  $q_{11} = q_{11}(n_r, \Lambda, j), q_{11}' = q_{11}(n_r', \Lambda', j)$ , slično i za ostale. Točno prema prethodnoj formuli je implementiran Laplacijan produkta funkcija baze na mreži čvorova iz čega je dobivena gustoća  $\nabla^2 \rho_V^p(\mathbf{r})$  na mreži čvorova.

#### Dodatak G:

##### Izračun matrice $\mathcal{H}$

Ubacivanjem razvoja mezonskih polja (35) u Klein-Gordonove jednadžbe (47), te skalarnim množenjem s

$\Phi_{(n_r, n_z, \Lambda=0)}(\mathbf{r})$  za neki par  $(n_r, n_z)$  u razvoju, dobije se:

$$\sum_{(n'_r, n'_z)} \mathcal{H}_{(n_r, n_z)(n'_r, n'_z)} \Phi_{(n'_r, n'_z)} = \int_{\mathbf{R}^3} s_i(\mathbf{r}') \Phi_{(n_r, n_z, 0)}^*(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' ,$$

gdje je matrica  $\mathcal{H}$  definirana:

$$\mathcal{H}_{(n_r, n_z)(n'_r, n'_z)} = \int_{\mathbf{R}^3} \Phi_{(n_r, n_z, 0)}^*(\mathbf{r}') \left( -\nabla'^2 + \frac{m_i^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Phi_{(n'_r, n'_z, 0)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' .$$

Laplaceov operator je:  $\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ , jer nemamo ovisnosti o kutu  $\phi$  (naime,  $\Lambda = 0$ ). Najprije računamo:

$$\int_{\mathbf{R}^3} \Phi_{(n_r, n_z, 0)}^* \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \Phi_{(n'_r, n'_z, 0)} = -2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_0^{\infty} r' dr' \frac{\partial}{\partial z'} \Phi_{(n_r, n_z, 0)}^* \frac{\partial}{\partial z'} \Phi_{(n'_r, n'_z, 0)} ,$$

gdje je primijenjen Greenov identitet. Direktnim uvrštavanjem i korištenjem:  $\frac{d}{dx} (H_n(x) e^{-x^2/2}) = e^{-x^2/2} (nH_{n-1}(x) - \frac{1}{2}H_{n+1}(x))$ , lako slijedi prethodni integral i on iznosi:

$$= -\frac{\delta_{n_r, n'_r}}{b_0^2 b_z^2} \left[ \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \delta_{n_z, n'_z} - \frac{\sqrt{n'_z(n_z+1)}}{2} \delta_{n_z, n'_z-2} - \frac{\sqrt{n_z(n'_z+1)}}{2} \delta_{n_z, n'_z+2} \right] .$$

Nakon toga, računamo radijalan dio Laplacijana:

$$\int_{\mathbf{R}^3} \Phi_{(n_r, n_z, 0)}^* \frac{1}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} \left( r' \frac{\partial}{\partial r'} \right) \Phi_{(n'_r, n'_z, 0)} = -2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_0^{\infty} r' dr' \frac{\partial}{\partial r'} \Phi_{(n_r, n_z, 0)}^* \frac{\partial}{\partial r'} \Phi_{(n'_r, n'_z, 0)} ,$$

gdje je ponovno korišten Greenov identitet. Prelaskom na integraciju po  $\eta = \left( \frac{r'}{b_0 b_r} \right)^2$ , prethodni integral je:

$$= \frac{-4\delta_{n_z, n'_z}}{b_0^2 b_r^2} \int_0^{\infty} \eta \frac{d}{d\eta} \left( L_{n_r}(\eta) e^{-\eta/2} \right) \frac{d}{d\eta} \left( L_{n'_r}(\eta) e^{-\eta/2} \right) d\eta .$$

Koristeći:  $\frac{d}{d\eta} L_n(\eta) = -L_{n-1}^{(1)}(\eta)$ ,  $\eta \frac{d}{d\eta} L_n(\eta) = n(L_n(\eta) - L_{n-1}(\eta))$ ,  $\int_0^{\infty} \eta e^{-\eta} L_n^{(1)}(\eta) L_m^{(1)}(\eta) d\eta = (n+1)\delta_{n,m}$  i  $\eta L_n(\eta) = (2n+1)L_n(\eta) - (n+1)L_{n+1}(\eta) - nL_{n-1}(\eta)$ , prethodni se integral može napisati:

$$= \frac{-\delta_{n_z, n'_z}}{b_0^2 b_r^2} \left[ (2n_r+1)\delta_{n_r, n'_r} + n_r \delta_{n_r, n'_r+1} + n'_r \delta_{n_r, n'_r-1} \right] .$$

Imamo sve dijelove potrebne za napisati konačan izraz za matricu  $\mathcal{H}$ , koja se prolaskom po indeksu  $(n_r, n_z)$  implementira prema formuli:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{(n_r, n_z)(n'_r, n'_z)} &= \left( \frac{m_i c^2}{\hbar c} \right)^2 \delta_{n_z, n'_z} \delta_{n_r, n'_r} + \delta_{n_z, n'_z} \delta_{n_r, n'_r} \left( \frac{n_z + \frac{1}{2}}{b_0^2 b_z^2} + \frac{2n_r + 1}{b_0^2 b_r^2} \right) - \\ &- \frac{\delta_{n_r, n'_r}}{2b_0^2 b_z^2} \left( \sqrt{n'_z(n_z+1)} \delta_{n_z, n'_z-2} + \sqrt{n_z(n'_z+1)} \delta_{n_z, n'_z+2} \right) + \\ &+ \frac{\delta_{n_z, n'_z}}{b_0^2 b_r^2} \left( n_r \delta_{n_r, n'_r+1} + n'_r \delta_{n_r, n'_r-1} \right) . \end{aligned} \quad (78)$$

### Dodatak H:

**Izračun matrice elementa**  $\langle \alpha_1, \alpha_2 | V^{PP} | \alpha'_1 \alpha'_2 \rangle$

Najprije nam trebaju pomoćni integrali:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n_z}(x) e^{-\frac{x^2}{2} \left( 1 + \frac{b_z^2}{a^2} \right)} dx &= \delta_{n_z, \text{paran}} \sqrt{2\pi} \frac{a}{\sqrt{a^2 + b_z^2}} \frac{n_z!}{\left( \frac{n_z}{2} \right)!} \left( \frac{a^2 - b_z^2}{a^2 + b_z^2} \right)^{\frac{n_z}{2}} , \\ \int_{-\infty}^{+\infty} L_{n_r}(\eta) e^{-\frac{\eta}{2} \left( 1 + \frac{b_r^2}{a^2} \right)} d\eta &= \frac{2a^2}{a^2 + b_r^2} \left( \frac{b_r^2 - a^2}{b_r^2 + a^2} \right)^{n_r} , \end{aligned} \quad (79)$$

koji se lako dobiju korištenjem funkcija izvodnica za Hermiteove i Laguerrove polinome [13]. Računamo matricni element:  $\langle \alpha_1, \alpha_2 | V^{PP} | \alpha'_1 \alpha'_2 \rangle$ . Produktni vektor  $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$  je:

$$|\alpha_1, \alpha_2\rangle = \Phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}) \Phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}) \chi_{m_{s1}} \chi_{m_{s2}} .$$

Lako se vidi da spinski dio u (28):  $\frac{1}{4}(\mathbf{1} + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$ , selektira samo stanja produkta  $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$  vezana u ukupni spin  $S = 0$ , što u matricni element samo daje faktor  $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}}$  (Clebsch-

Gordan koeficijenti) i  $\delta_{m'_{s1}, m'_{s2}} \delta_{m_{s1}, m_{s2}}$ . Obzirom da u kanalu sparivanja [7] imamo  $\Omega_1 + \Omega_2 = 0$ , to daje dodatan uvjet:  $\delta_{\Lambda'_1, -\Lambda'_2} \delta_{\Lambda_1, -\Lambda_2}$ . Koristimo notaciju (vidi definiciju (33)):

$$|n_{z1} n_{z2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{b_0 b_z}} \Psi_{n_{z1}}(z_1) \times \frac{1}{\sqrt{b_0 b_z}} \Psi_{n_{z2}}(z_2) ,$$

$$|n_{r1} \Lambda_1 n_{r2} \Lambda_2\rangle = \frac{1}{b_0 b_r} \Psi_{n_{r1}}^{|\Lambda_1|}(r_1) \frac{e^{i\Lambda_1 \Phi_1}}{\sqrt{2\pi}} \times \frac{1}{b_0 b_r} \Psi_{n_{r2}}^{|\Lambda_2|}(r_2) \frac{e^{i\Lambda_2 \Phi_2}}{\sqrt{2\pi}} . \quad (80)$$

Matrični element sparivanja je sada:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1, \alpha_2 | V^{PP} | \alpha'_1 \alpha'_2 \rangle &= -\frac{G}{2} \delta_{m'_{s1}, m'_{s2}} \delta_{m_{s1}, m_{s2}} \delta_{\Lambda'_1, -\Lambda'_2} \delta_{\Lambda_1, -\Lambda_2} \times \\ &\times 2 \times \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') P(\mathbf{r}') \langle n_{z1} n_{z2} | n'_{z1} n'_{z2} \rangle \langle n_{r1} \Lambda_1 n_{r2} \Lambda_2 | n'_{r1} \Lambda'_1 n'_{r2} \Lambda'_2 \rangle . \end{aligned}$$

Dodatan faktor 2 je ponovo zbog toga što, radi simetrije, razvijamo samo po  $\Omega > 0$ . Zamijenimo integracijske varijable u  $\{\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{R}', \mathbf{r}'\}$  (Jacobijan transformacije je jednak 1) i delta funkciju u cilindrične koordinate  $\mathbf{R} = (R \cos \Phi, R \sin \Phi, Z)$ :

$$\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \frac{1}{R} \delta(R - R') \delta(Z - Z') \delta(\Phi - \Phi') .$$

Prebacimo QHO funkcije (80) u koordinate sustava centra mase  $\mathbf{R}$  i relativne koordinate  $\mathbf{r}$  pomoću Talmi-Moshinsky zagrada za koje postoje eksplicitne formule [7]:

$$|n_{z1} n_{z2}\rangle = \sum_{N_r, n_r} M_{N_r, n_r}^{n_{z1} n_{z2}} |N_z n_z\rangle ,$$

$$|n_{r1} \Lambda_1 n_{r2} \Lambda_2\rangle = \sum_{N_r, \Lambda_r, n_r, \lambda} M_{N_r, \Lambda_r, n_r, \lambda}^{n_{r1} \Lambda_1 n_{r2} \Lambda_2} |N_z \Lambda_r n_r \lambda\rangle .$$

Pritom treba paziti da valne funkcije s desne strane zadnjih jednakosti imaju u dijelu valne funkcije s  $\mathbf{R}$  ovisnosti  $b_0 \rightarrow \frac{b_0}{\sqrt{2}}$  (jer je efektivna masa  $2m$ ), a u dijelu s  $\mathbf{r}$  ovisnosti, imaju  $b_0 \rightarrow \sqrt{2}b_0$  (jer je efektivna masa  $\frac{m \times m}{m+m}$ ). Kada se dobiveni komplicirani izraz pojednostavi, može se zapisati kao:

$$\langle \alpha_1, \alpha_2 | V^{PP} | \alpha'_1 \alpha'_2 \rangle = -G \sum_{N_r, N_z} W_{1,2}^{N_z N_r} W_{1',2'}^{N_z N_r} , \quad (81)$$

$$\begin{aligned} W_{1,2}^{N_z, N_r} &= \sqrt{2\pi} \delta_{m_{s1}, -m_{s2}} \delta_{\Lambda_1, -\Lambda_2} \delta_{n_{z1} + n_{z2}, \text{paran}} M_{N_z, n_z}^{n_{z1} n_{z2}} M_{N_r, 0, n_r, 0}^{n_{r1} \Lambda_1 n_{r2} \Lambda_2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\Psi_{n_z}(z)}{\sqrt{\sqrt{2} b_0 b_z}} \int_0^{\infty} r dr \frac{\Psi_{n_r}^{|\Lambda_1|}(r)}{\sqrt{2 b_0 b_r}} \frac{1}{(4\pi a^2)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{z^2 + r^2}{4a^2}} , \end{aligned}$$

gdje su zbog očuvanja kvantnih brojeva:  $n_z = n_{z1} + n_{z2} - N_z$ ,  $n_r = n_{r1} + n_{r2} + |\Lambda_1| - N_r$ . Uvjet na parnost  $n_{z1} + n_{z2}$ , dolazi zbog toga što parove  $|\alpha_1 \alpha_2\rangle$  gradimo s pozitivnim ukupnim paritetom  $\Pi_{|\alpha_1, \alpha_2\rangle} = (-1)^{n_{z1} + n_{z2} + \Lambda_1 + \Lambda_2}$ . Suma po  $N_z, N_r$  ide po svim mogućim indeksima, takvima da u razvoju vrijedi:  $n_z, n_r \geq 0$ . Kako, zbog simetrije, razvijamo samo po  $\Omega > 0$ , i radimo po  $\Omega^{\text{II}}$  blokovima, to se prethodna ograničenja:  $\delta_{m_{s1}, -m_{s2}} \delta_{\Lambda_1, -\Lambda_2}$ , u zadanom i b bloku, mogu jednostavno zapisati kao ograničenje:  $\delta_{\Lambda_1, \Lambda_2}$ , uz promjenu u T-M zagradi:  $M_{N_r, 0, n_r, 0}^{n_{r1} \Lambda_1 n_{r2} -\Lambda_1}$ . Korištenjem integrala (79), dobivamo konačan izraz za  $W_{1,2}^{N_z, N_r}$  (samim time i za matricni element (81)):

$$\begin{aligned} W_{1,2}^{N_z, N_r} &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{4}}} \delta_{\Lambda_1, \Lambda_2} \delta_{n_{z1} + n_{z2}, \text{paran}} M_{N_z, n_z}^{n_{z1} n_{z2}} M_{N_r, 0, n_r, 0}^{n_{r1} \Lambda_1 n_{r2} -\Lambda_1} \times \\ &\times \frac{\delta_{n_z, \text{paran}}}{2^{n_z/2}} \frac{\sqrt{b_0 b_z}}{\sqrt{a^2 + b_0^2 b_z^2}} \frac{\sqrt{n_z!}}{\left( \frac{n_z}{2} \right)!} \left( \frac{a^2 - b_0^2 b_z^2}{a^2 + b_0^2 b_z^2} \right)^{\frac{n_z}{2}} \times \frac{b_0 b_r}{a^2 + b_0^2 b_r^2} \left( \frac{b_0^2 b_r^2 - a^2}{b_0^2 b_r^2 + a^2} \right)^{n_r} . \end{aligned} \quad (82)$$

Primijetimo da se koeficijenti  $W_{1,2}^{N_r, N_r}$  mogu izračunati i spremiti u memoriju za proizvoljne indekse  $\alpha_1 = (n_{r1}, n_{z1}, \Lambda_1, m_{s1})$  i  $\alpha_2 = (n_{r2}, n_{z2}, \Lambda_2, m_{s2})$  u razvoju (34), prije ulaska u iterativan postupak.

Zbog separiranog oblika matrice elementa (81), ova interakcija sparivanja je pogodnija za numeričku implementaciju od često korištene Gognyjeve interakcije.