

Opis oktopolnih pobuđenja atomske jezgre pomoću relativističkih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće

Petar Marević*

Fizički odsjek, PMF, Sveučilište u Zagrebu, 10 000 Zagreb, Hrvatska

Sažetak

Oktopolno deformirane atomske jezgre asimetrične su na refleksiju i predstavljaju zanimljiv fenomen u teoriji nuklearne strukture. Pojava oktopolnih deformacija povezana je s postojanjem niskoležećih vrpce negativnog pariteta, a u posljednje je vrijeme obnovljen teorijski i eksperimentalni interes za njihovim proučavanjem. U ovom će radu formalizam relativističkih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće biti primijenjen pri opisu oktopolnih pobuđenja u jezgrama ^{20}Ne , ^{208}Pb i ^{158}Gd . Relativistički Hartree-Bogoliubovljevi model omogućuje jedinstven opis čestica-šupljina i čestica-čestica korelacija, kao i izračun jednočestičnih stanja i energijskog spektra na razini srednjeg polja. Kako bi se ponovno uspostavila paritetna simetrija koja je slomljena aproksimacijom srednjeg polja, iskorištena je metoda generirajućih koordinata s oktopolnom deformacijom kao generirajućom koordinatom. Na taj je način bilo moguće izračunati kolektivne valne funkcije i kolektivni energijski spektar, kao i snage oktopolnih prijelaza. Položaji prvih 3^- stanja u promatranim jezgrama određeni su sa zadovoljavajućom preciznošću, dok je kôd za račun snaga oktopolnih prijelaza potrebno dodatno optimizirati kako bi bio primjenjiv i na teškim jezgrama. Potpuna usporedba sa spektroskopskim podacima nije moguća bez ponovnog uspostavljanja dobrog ukupnog angularnog momenta, a pokazuje se da je u nekim jezgrama, poput ^{64}Zn , nužno uzeti u obzir i vezanje kvadrupolnog i oktopolnog stupnja slobode.

1 Uvod

Atomska jezgra kvantni je sustav mnoštva čestica čiji je oblik određen brojem nukleona koji je sačinjavaju i njihovim međudjelovanjem [1]. Jezgre u kojima se protonske i neutronske ljuske u potpunosti popunjene (dvostruko magične jezgre) 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 i refleksijski simetričnim kvadrupolnim deformacijama - izduženim elipsoidima¹ oblika cigare i spljoštenim elipsoidima² oblika palačinke. Prvo opažanje niskoležećih stanja negativnog pariteta sredinom prošloga stoljeća [2] ukazalo je na mogućnost postojanja oktopolno deformiranih jezgara čiji je oblik asimetričan na refleksiju. 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 refleksijsku simetriju, dok je u drugome slučaju valna funkcija simetrična na refleksiju, no postoje značajne kvantne fluktuacije oktopolnog stupnja slobode. Mikroskopsko porijeklo oktopolnih deformacija povezuje se sa zaposjednućem orbitala suprotnog pariteta s razlikom angularnih momenata $3\hbar$ u blizini Fermijeve površine [3]. 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 [3]. Premda dosad nije provedeno nijedno globalno istraživanje koje bi uključivalo jedinstven Hamiltonijan i dobro definiranu računsku metodu, u posljednje je vrijeme obnovljen interes za teorijskim proučavanjem oktopolnog stupnja

slobode [4–7]. S druge strane, u nedavnom su eksperimentalnom istraživanju otkrivene niskoležeće vrpce negativnog pariteta u jezgri ^{152}Sm [8]. Također, novi eksperimenti s kulonskim pobuđenjem pomoću radioaktivnih ionskih zraka ukazuju na postojanje izražene oktopolne deformacije u jezgrama ^{220}Rn i ^{224}Ra [9]. Jezgre s oktopolnim deformacijama nisu važne samo za teorijsko razumijevanje nuklearne strukture, nego bi mogle igrati bitnu ulogu i u potrazi za fizikom izvan standardnog modela. Naime, očekuje se da bi mjerljivi električni dipolni moment atoma s oktopolno deformiranim jezgrama mogao biti značajno pojačan, što bi ukazivalo na novi izvor narušenja CP-simetrije koji nije predviđen standardnim modelom [10].

Formalizam relativističkih energijskih funkcionala gustoće (REDF) trenutno predstavlja najpotpuniji i najtočniji teorijski okvir za opis svojstava osnovnog stanja i kolektivnih pobuđenja jezgre duž cijele karte nuklida [11]. Budući da omogućuje izvrsnu globalnu preciznost uz korištenje umjerenih računskih resursa, REDF formalizam zasad je jedini mikroskopski pristup nuklearnom problemu mnoštva čestica koji je uspješno primijenjen pri opisu evolucije oblika od relativno lakih do super-teških jezgara, od doline β -stabilnosti sve do jezgara na granici stabilnosti [12, 13]. 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 samosuglasnim potencijalima. Na taj je način problem mnoštva čestica preslikan u problem jedne čestice, a egzaktan funkcional aproksimiran je jednostavnim, uglavnom analitičkim, funkcionalima. Velik broj funkcionala koji su trenutno u upotrebi jesu fenomenološki, odnosno njihovi se parametri prilagođavaju skupu dostupnih eksperimentalnih podataka o svojstvima beskonačne nuklearne

*pmarevic@dominis.phy.hr

¹engl. *prolate*

²engl. *oblate*

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. [14], dok drugi efektivno nuklearno međudjelovanje opisuju odgovarajućim lokalnim kontaktnim međudjelovanjem nukleona, npr. [15]. Odabirom kontaktnih funkcionala moguće je izbjeći neke od nedostataka funkcionala s izmjenom mezona, poput korištenja fiktivnog σ -mezona u izoskalarnom-skalarnom kanalu. Međutim, modeli srednjeg polja ne uključuju korelacije sparivanja koje igraju važnu ulogu pri kvantitativnom opisu jezgara s otvorenim ljuskama. Te je korelacije moguće uzeti u obzir u okviru relativističkog Hartree-Bogoliubov (RHB) modela [16], koji predstavlja relativističko proširenje konvencionalnog Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) formalizma [17].

RHB model omogućuje jedinstven opis čestica-šupljina (ph) i čestica-čestica (pp) korelacija na razini srednjeg polja. Uvođenjem koncepta Bogoliubovljevih kvazičestica moguće je osnovno stanje jezgre opisati generaliziranom 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 obzir i kolektivne korelacije koje potječu od ponovnog uspostavljanja simetrija i fluktuacija oko minimuma srednjeg polja. Zadržimo li se pri proučavanju oktopolnih pobuđenja na jezgrama koje imaju dobro definiran minimum u kvadrupolnoj koordinati, najveći doprinos korelacijskoj energiji dolaziti će od fluktuacija u oktopolnoj koordinati i ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta. Te je dvije korekcije moguće istovremeno uzeti u obzir u okviru metode generirajućih koordinata³ (GCM) [17, 18]. 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 u produktu s odgovarajućom težinskom funkcijom. Pokazuje se da određivanje težinskih funkcija omogućuje izravan račun svih fizikalnih opservabli, poput spektroskopskih oktopolnih momenata i snaga oktopolnih prijelaza, koje je onda moguće usporediti s eksperimentalnim vrijednostima.

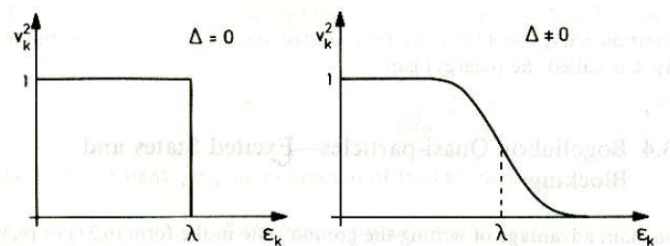
Rad je organiziran na sljedeći način. U drugom poglavlju daje se teorijska podloga relativističkog Hartree-Bogoliubovljevog modela i metode generirajućih koordinata. U trećem poglavlju provjerena je numerička stabilnost kôda i valjanost računa na primjeru relativno lake atomske jezgre ²⁰Ne. U četvrtom su poglavlju proučene oktopolne deformacije

u dvostruko magičnoj jezgri ²⁰⁸Pb i u jako deformiranoj jezgri ¹⁵⁸Gd, ukazana su ograničenja i sugerirana proširenja korištenog modela na primjeru jezgre ⁶⁴Zn, a dobivene su vrijednosti uspoređene s dostupnim eksperimentalnim i teorijskim vrijednostima. Posljednje poglavlje donosi zaključak i plan daljnjeg istraživanja.

2 Teorijska podloga

2.1 Relativistički Hartree-Bogoliubovljev model

Međudjelovanje sparivanja uvedeno je kao pokušaj objašnjenja razlike u energijama vezanja između parnih i neparnih jezgara. Obično se sparivanje odvija između identičnih nukleona koji tvore spinski singlet. Međutim, novija istraživanja pokazuju kako bi sparivanje moglo igrati bitnu ulogu i u tripletnom kanalu, posebno u težim jezgrama [19, 20]. U modelima koji ne uključuju sparivanje, jednočestična su stanja ili popunjena (vjerojatnost zaposjednuća je 1) ili prazna (vjerojatnost zaposjednuća je 0). Takva je raspodjela opisana stepenastom funkcijom⁴. Uključivanjem sparivanja, dio čestica biva raspršen iznad Fermijeve površine i skokovita funkcija zaposjednuća postaje razmazana, kao što je prikazano na slici 1. Na taj način dio stanja ispod Fermijeve površine postaje djelomično prazan, a dio stanja iznad Fermijeve površine djelomično popunjen.



Slika 1: Vjerojatnosti zaposjednuća v_k^2 jednočestičnih stanja energija ϵ_k bez sparivanja ($\Delta = 0$) i s uključenim sparivanjem ($\Delta \neq 0$). Preuzeto iz [17].

Poznato je da sparivanje igra važnu ulogu pri kvantitativnom opisu sferičnih jezgara s otvorenim ljuskama te deformiranih jezgara i potrebno ga je na neki način uzeti u obzir. Iako je korelacije sparivanja moguće uzeti u obzir fenomenološki, u jednostavnoj Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) aproksimaciji [21], bolje je to napraviti u okviru HFB modela. Hartree-Fock-Bogoliubovljev model predstavlja generalizaciju BCS metode te istovremeno uključuje opis dugodosežnih ph -korelacija na razini srednjeg polja i kratkodosežnih pp -korelacija sparivanja, kao i njihovu međuovisnost [17]. Polazišna točka HFB teorije jest uvođenje koncepta Bogoliubovljevih kvazičestica, koje dijelom nalikuju na čestice (posebno iznad Fermijeve površine), a dijelom na šupljine (posebno ispod Fermijeve površine). Na taj način, moguće je osnovno stanje jezgre opisati generaliziranom Slaterovom determinantom koja predstavlja vakuum s obzirom na neovisne kvazičestice. Veza između Bogoliubovljevih kvazičestica i fizikalnih čestica dana je linearnom transformacijom iz čestičnih operatora c_l^\dagger, c_l u kvazičestične operatore β_k^\dagger, β_k :

³engl. *generate coordinate method*

⁴engl. *step function*

$$\beta_k^\dagger = \sum_l \left(U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l \right), \quad (1)$$

gdje sumacija po l ide po cijelom konfiguracijskom prostoru, a U_{lk} i V_{lk} predstavljaju vektore kvazičestičnih stanja. Operator β_k dobije se hermitskom konjugacijom jednadžbe (1) te se generalizirana Bogoliubovljeva transformacija u matičnom obliku može napisati kao:

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Matrica \mathcal{W} :

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \quad (3)$$

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

$$\beta_k |\Phi\rangle = 0, \quad (4)$$

za svaki k u konfiguracijskom prostoru. Valne funkcije koje zadovoljavaju ovaj uvjet za odgovarajući set kvazičestičnih operatora (1) 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 :

$$\rho_{ll'} = \langle \Phi | c_l^\dagger c_{l'} | \Phi \rangle, \quad \kappa_{ll'} = \langle \Phi | c_{l'} c_l | \Phi \rangle, \quad (5)$$

koji u matičnom zapisu imaju oblik:

$$\rho = V^* V^T, \quad \kappa = V^* U^T = -U V^\dagger. \quad (6)$$

HFB model uključuje pretpostavku da valna funkcija $|\Phi\rangle$ približno opisuje osnovno stanje jezgre. Hamiltonijan jezgre dan je kao:

$$H = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3}, \quad (7)$$

gdje članovi $t_{l_1 l_2}$ i $\bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ opisuju kinetičku energiju odnosno dvočestično međudjelovanje, a sume idu po cijelom konfiguracijskom prostoru. Očekivana vrijednost Hamiltonijana u osnovnom stanju jezgre $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$ 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-Bogoliubov jednadžbe:

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}, \quad (8)$$

gdje su Hartree-Fock Hamiltonijan h i polje sparivanja Δ određeni derivacijama energijskog funkcionala:

$$h_{ij}[\rho, \kappa, \kappa^*] = \frac{\partial \mathcal{E}[\rho, \kappa, \kappa^*]}{\partial \rho_{ji}}, \quad \Delta_{ij}[\rho, \kappa] = \frac{\partial \mathcal{E}[\rho, \kappa, \kappa^*]}{\partial \kappa_{ij}^*}. \quad (9)$$

Polazišna točka REDF računa nije Hamiltonijan (7), već sam energijski funkcional gustoće $\mathcal{E}[\rho, \kappa, \kappa^*]$. Korisnost ovakvog

pristupa ovisi o mogućnosti da se konstruira dovoljno točna aproksimacija člana funkcionala koji opisuje izmjene i korelacije. U praksi se pretpostavi ovisnost o gustoći pojedinih konstanti vezanja, a vrijednosti slobodnih parametara dobivaju se prilagođavanjem skupu dostupnih eksperimentalnih podataka.

Kvazičestični vakuum (4) nije svojstveno stanje operatora broja čestica pa je ovakav pristup karakteriziran nesačuvanjem broja čestica. Kako bi očekivana vrijednost broja čestica u osnovnome stanju ipak odgovarala stvarnom broju nukleona u jezgri, jednadžba (8) sadrži kemijski potencijal λ koji se određuje nametanjem dodatnog uvjeta na nuklearni Hamiltonijan. Svojevrsna rješenja jednadžbe (8) 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-Bogoliubovljevi model (RHB), uveden je u [22]. RHB jednadžbe glase:

$$\begin{pmatrix} \hat{h}_D - m - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D + m + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k(\mathbf{r}) \\ V_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (10)$$

gdje je \hat{h}_D jednočestični Diracov Hamiltonijan, a m je masa nukleona. Diracov Hamiltonijan potječe iz jednočestične Diracove jednadžbe, koja je dobivena varijacijom efektivnog Lagrangiana srednjeg polja po adjungiranom spinoru. Polje sparivanja $\hat{\Delta}$ jest integralni operator čija se jezgra može zapisati kao:

$$\Delta_{ab}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2} \sum_{c,d} V_{abcd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \kappa_{cd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (11)$$

gdje a, b, c, d označavaju kvantne brojeve koje određuju Diracov spinor, a $V_{abcd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ su matični elementi općenitog dvočestičnog međudjelovanja. Iako RHB formalizam omogućuje ujedinjen opis ph - i pp -korelacija, u principu ne postoji razlog da se isto efektivno međudjelovanje koristi u oba kanala [11]. U ovom radu, u ph -kanalu korišten je relativistički kontaktni funkcional gustoće DD-PC1 [15], dok je pp -kanalu odabrana sila konačnog doseg koji je separabilna u impulsnom prostoru.

Jednadžbe (10) 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 [23]. U tom je slučaju rotacijska simetrija slomljena i ukupan angularni moment j više nije dobar kvantni broj. Jednočestični Diracovi spinori $U(\mathbf{r})$ i $V(\mathbf{r})$ određeni su s tri dobra kvantna broja: projekcijom ukupnog angularnog momenta na os simetrije (Ω), paritetom (π) i z -komponentom izospina (t_3), a definirani su kao:

$$U(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_U^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ f_U^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \\ i g_U^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ i g_U^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \end{pmatrix} \chi_{t_3}(t), \quad (12)$$

$$V(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_V^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ f_V^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \\ ig_V^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega-1/2)\varphi} \\ ig_V^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega+1/2)\varphi} \end{pmatrix} \chi_{t_3}(t). \quad (13)$$

Potencijal aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora dan je kao:

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

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 $\hbar\omega_0$:

$$\hbar\omega_z = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{5/4\pi}\beta_0}, \quad \hbar\omega_\perp = \hbar\omega_0 e^{\frac{1}{2}\sqrt{5/4\pi}\beta_0}. \quad (15)$$

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:

$$|\alpha\rangle = |n_z, n_\perp, m_l, m_s\rangle, \quad (16)$$

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 odnosno spina na os simetrije. Svojstvena vrijednost operatora j_z , koja je sačuvana veličina u ovom računu, dana je sa:

$$\Omega = m_l + m_s, \quad (17)$$

dok se paritet određuje prema:

$$\pi = (-1)^{n_z + m_l}. \quad (18)$$

Svojstvene funkcije potencijala aksijalno simetričnog harmoničkog oscilatora (14) glase:

$$\Phi_\alpha(\mathbf{r}, s) = \frac{N_{n_z}}{\sqrt{b_z}} H_{n_z}(\xi) e^{-\xi^2/2} \frac{N_{n_z}^{m_l}}{b_\perp} \sqrt{2\eta} \eta^{m_l/2} \cdot L_{n_\perp}^{m_l}(\eta) e^{-\eta/2} \frac{1}{2\pi} e^{im_l\phi} \chi_{m_s}(s), \quad (19)$$

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 [24]. Normalizacijske konstante iznose:

$$N_{n_z} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!}} \quad \text{i} \quad N_{n_\perp}^{m_l} = \sqrt{\frac{1}{(n_\perp + |m_l|)!}}. \quad (20)$$

Razvoj komponenata spinora (12) i (13) u bazi harmoničkog oscilatora glasi:

$$f_{U(V)}(\mathbf{r}, s, t) = \sum_{\alpha}^{\alpha_{max}} f_{U(V)\alpha} \Phi_\alpha(\mathbf{r}, s) \chi_{t_3}(t), \quad (21)$$

$$g_{U(V)}(\mathbf{r}, s, t) = \sum_{\alpha}^{\alpha_{max}} g_{U(V)\alpha} \Phi_\alpha(\mathbf{r}, s) \chi_{t_3}(t). \quad (22)$$

Kako bi se izbjegla pojava spurioznih stanja, kvantni brojevi α_{max} i $\tilde{\alpha}_{max}$ odaberu se tako da odgovarajući glavni oscilatorski kvantni broj $N = n_z + 2n_\perp + m_l$ nije veći od $N_{sh} + 1$ pri razvoju malih komponenti spinora i da nije veći od N_{sh} pri razvoju velikih komponenti spinora [23].

Opisanim postupkom rješavanja RHB jednadžbi dobije se samo jedna točka na energijskoj površini, koja odgovara lokalnom minimumu [17]. 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. Metoda kvadratičnog ograničenja⁵ koristi neograničenu varijaciju funkcije:

$$\langle H \rangle + \frac{C}{2} (\langle \hat{Q} \rangle - q)^2, \quad (23)$$

gdje je $\langle H \rangle$ ukupna energija, $\langle \hat{Q} \rangle$ očekivana vrijednost oktrupolnog operatora, q odabrani parametar oktrupolne deformacije, a C konstanta tromosti⁶. Ovakav pristup omogućuje efikasno određivanje energije vezanja za svaku pojedinu deformaciju u q_2 - q_3 ravnini. Pored q_3 , često se radi jednostavnosti uvodi parametar β_3 , koji je s q_3 povezan preko relacije $q_3 = \sqrt{9/28\pi} (1.2)^3 A^2 \beta_3$.

2.2 Metoda generirajućih koordinata

Metoda generirajućih koordinata kvantnomehnička je varijacijska metoda koja predstavlja jedan od prvih pokušaja da se jednočestična i kolektivna nuklearna dinamika uključe u jedinstven formalizam [25]. Detaljan pregled metode dan je u [17] i [18]. 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 Slaterovih determinanti jednočestičnih stanja $|\phi(q_j)\rangle$, dobivenih rješavanjem RHB jednadžbi. Iako u općenitom slučaju kolektivna varijabla q može biti kontinuirana, u praktičnim je primjenama najčešće potrebno raditi u diskretnoj aproksimaciji. U tom je slučaju varijacijski prostor razapet GCM stanjima:

$$|\psi_\alpha\rangle = \sum_j f_\alpha(q_j) |\phi(q_j)\rangle, \quad (24)$$

gdje $f_\alpha(q_j)$ predstavljaju težinske funkcije, a suma ide po cijeloj diskretiziranoj mreži. Na ovaj je način moguće ponovno uspostaviti slomljenu paritetnu simetriju, 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 određuju se iz zahtjeva da očekivana vrijednost energije E_α :

$$E_\alpha = \frac{\langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} \quad (25)$$

bude nepromijenjena s obzirom na proizvoljnu varijaciju δf_α . Ovaj zahtjev vodi na Hill-Wheelerovu (HW) jednadžbu:

⁵engl. *method of quadratic constraint*

⁶engl. *stiffness constant*

$$\sum_j f_\alpha(q_j) \left(\langle \phi(q_i) | \hat{H} | \phi(q_j) \rangle - E_\alpha \langle \phi(q_i) | \phi(q_j) \rangle \right) = 0. \quad (26)$$

Definiramo li kernel preklopa norme⁷ $\mathcal{N}(q_i, q_j)$ i kernel Hamiltonijana⁸ $\mathcal{H}(q_i, q_j)$, možemo zapisati HW jednadžbu kao:

$$\sum_j \mathcal{H}(q_i, q_j) f_\alpha(q_j) = E_\alpha \sum_j \mathcal{N}(q_i, q_j) f_\alpha(q_j) \quad (27)$$

Jednadžba (27) predstavlja generalizirani problem svojstvenih vrijednosti. Prema tome, težinske funkcije $f_\alpha(q_i)$ nisu ortogonalne i ne mogu se interpretirati kao kolektivne valne funkcije za varijablu q . Zbog toga je korisno zapisati HW jednadžbu koristeći drugi set funkcija, $g_\alpha(q_i)$, koje su definirane kao:

$$g_\alpha(q_i) = \sum_j (\mathcal{N})^{1/2}(q_i, q_j) f_\alpha(q_j). \quad (28)$$

Uz ovu transformaciju, HW jednadžba predstavlja običan problem svojstvenih vrijednosti:

$$\sum_j \tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) g_\alpha(q_j) = E_\alpha g_\alpha(q_i), \quad (29)$$

gdje je

$$\tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) = \sum_{k,l} (\mathcal{N})^{-1/2}(q_i, q_k) \mathcal{H}(q_k, q_l) (\mathcal{N})^{-1/2}(q_l, q_j). \quad (30)$$

Funkcije $g_\alpha(q_i)$ su ortonormirane i predstavljaju kolektivne valne funkcije za varijablu q .

Važno je uočiti da je ovakav pristup karakteriziran nesadržavanjem broja nukleona. Naime, RHB jednadžbe 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 jednadžbe (26) $|\psi_\alpha\rangle$ općenito nisu svojstvena stanja operatora \hat{N} i \hat{Z} te očekivane vrijednosti operatora \hat{N} i \hat{Z} nisu nužno jednake stvarnom broju nukleona u jezgri. 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 modifikirati HW jednadžbu (29) zamjenom:

$$\tilde{\mathcal{H}}'(q_i, q_j) = \tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) - \lambda_P [\hat{Z}(q_i, q_j) - Z_0] - \lambda_N [\hat{N}(q_i, q_j) - N_0], \quad (31)$$

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

$$\langle \psi_\alpha | (\hat{N} - N_0) | \psi_\alpha \rangle = \langle \psi_\alpha | (\hat{Z} - Z_0) | \psi_\alpha \rangle = 0. \quad (32)$$

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

spektra atomske jezgre [18].

Prvi korak pri rješavanju HW jednadžbe najčešće je dijagonalizacija kernela preklopa norme $\mathcal{N}(q_i, q_j)$:

$$\sum_j \mathcal{N}(q_i, q_j) u_k(q_j) = n_k u_k(q_i). \quad (33)$$

Budući da $|\phi(q_i)\rangle$ nisu linearno nezavisne funkcije, mnoge svojstvene vrijednosti n_k bit će vrlo blizu nuli. Odgovarajuće svojstvene funkcije $u_k(q_i)$ oscilirat će vrlo brzo i nosit će vrlo malo fizikalnog sadržaja. Međutim, zbog numeričke nepouzdanosti, njihov doprinos Hamiltonijanu $\mathcal{H}(q_i, q_j)$ može biti velik. U praksi se problem riješi tako da se sve valne funkcije sa svojstvenim vrijednostima manjim od proizvoljnog ϵ jednostavno uklone iz baze. Od preostalih je valnih funkcija moguće izgraditi kolektivni Hamiltonijan:

$$\mathcal{H}_{kl}^{coll} = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \frac{1}{\sqrt{n_l}} \sum_{i,j} u_k(q_i) \tilde{\mathcal{H}}(q_i, q_j) u_l(q_j), \quad (34)$$

koji se potom dijagonalizira:

$$\sum_l \mathcal{H}_{kl}^{coll} g_l^\alpha = E_\alpha g_k^\alpha. \quad (35)$$

Rješenja jednadžbe (35) 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:

$$g_\alpha(q_i) = \sum_l g_l^\alpha u_l(q_i), \quad (36)$$

i

$$f_\alpha(q_i) = \sum_l \frac{g_l^\alpha}{\sqrt{n_l}} u_l(q_i). \quad (37)$$

Poznavajući težinske funkcije $f_\alpha(q)$, moguće je izravno izračunati sve fizikalne opservable, poput snage prijelaza i spektroskopskih oktupolnih momenata. U slučaju jako deformirane jezgre, pobuđeno stanje negativnog pariteta nalazi se u $K = 0$ vrpici i reducirana vjerojatnost (snaga) oktupolnog prijelaza može se izračunati iz formule [4]:

$$B(E3, 3^- \rightarrow 0^+) = \frac{e^2}{4\pi} \langle o | \hat{Q}_3 \frac{1+t_z}{2} | e \rangle^2, \quad (38)$$

gdje $|e\rangle$ predstavlja (osnovno) stanje pozitivnog pariteta, a $|o\rangle$ prvo (pobuđeno) stanje negativnog pariteta. S druge strane, kad je stanje jezgre $|e\rangle$ sferno simetrično, oktupolnim pobuđivanjem dobije se stanje $|o\rangle$ s dobrim angularnim momentom. Reducirana vjerojatnost (snaga) prijelaza u osnovno stanje može se izračunati iz formule [26]:

$$B(E3, 3^- \rightarrow 0^+) = \frac{7e^2}{4\pi} \langle o | \hat{Q}_3 \frac{1+t_z}{2} | e \rangle^2. \quad (39)$$

Gornji se izrazi razlikuju za faktor 7, jer jednadžba (39) daje ukupnu snagu oktupolnog prijelaza, dok jednadžba (38) daje snagu prijelaza samo za $K = 0$ komponente. Dobrom mjerom deformiranosti jezgre smatra se vrijednost R_{42} , omjer energija

⁷engl. norm overlap kernel

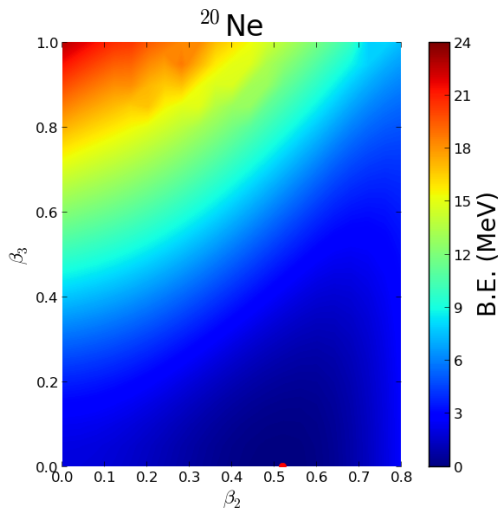
⁸engl. Hamiltonian kernel

pobuđenja najnižih 4^+ i 2^+ stanja. Vrijednosti $R_{42} \approx 2$ karakteristične su za sferične jezgre, dok u jako deformiranim jezgrama vrijedi $R_{42} \geq 3$. U sljedećem ćemo odjeljku opisani formalizam primijeniti na primjeru relativno lake atomske jezgre ^{20}Ne .

3 Numerički test: 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, jezgra ^{20}Ne predstavlja optimalan izbor za numerički test konzistentosti kôda prije nego se prijeđe na vremenski značajno zahtjevnije račune s mnogo težim jezgrama. U slučaju jezgre ^{20}Ne dovoljno je zadržati se na $N_{\text{sh}} = 10$ ljusaka pri razvoju u bazi harmoničkog oscilatora, dok ćemo pri računu s težim jezgrama u sljedećem odjeljku standardno uzimati $N_{\text{sh}} = 14$ ljusaka. Za vrijednost ϵ definiranu u prethodnom poglavlju u svim je računima uzeto $\epsilon = 10^{-4}$.

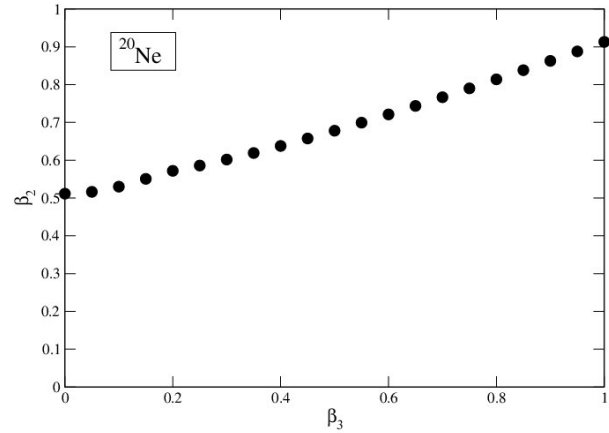
Na slici 2 prikazane se u RHB energije vezanja atomske jezgre ^{20}Ne u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini. Apsolutni minimum na deformaciji ($\beta_2 = 0.52, \beta_3 = 0$) ukazuje na kvadrupolnu deformaciju jezgre ^{20}Ne u osnovnom stanju. Međutim, iznos ravnotežne kvadrupolne deformacije nešto je veći od iznosa dobivenog u prethodnom teorijskom računu, gdje je korišten sličan formalizam, ali drugo efektivno međudjelovanje [4].



Slika 2: Energije vezanja atomske jezgre ^{20}Ne u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjeg polja. Sve su energije normirane s obzirom na energiju apsolutnog minimuma. Boja označava energiju svake točke na površini u odnosu na minimum (crvena točka).

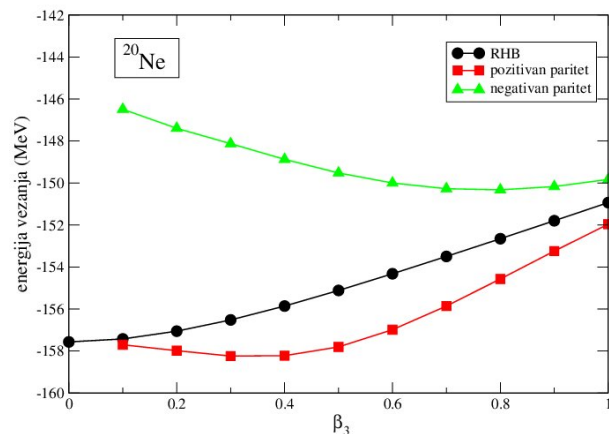
Ovisnost ravnotežne kvadrupolne deformacije o nametnutoj oktopolnoj deformaciji prikazana je na slici 3. Ravnotežna β_2 deformacija porasla je gotovo dvostruko u promatranom rasponu β_3 deformacije što ukazuje na činjenicu da u slučaju jezgre ^{20}Ne oktopolni stupanj slobode nije u potpunosti neovisan 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 modova ukupnoj korelacijskoj energiji više ne mora biti zanemariv.

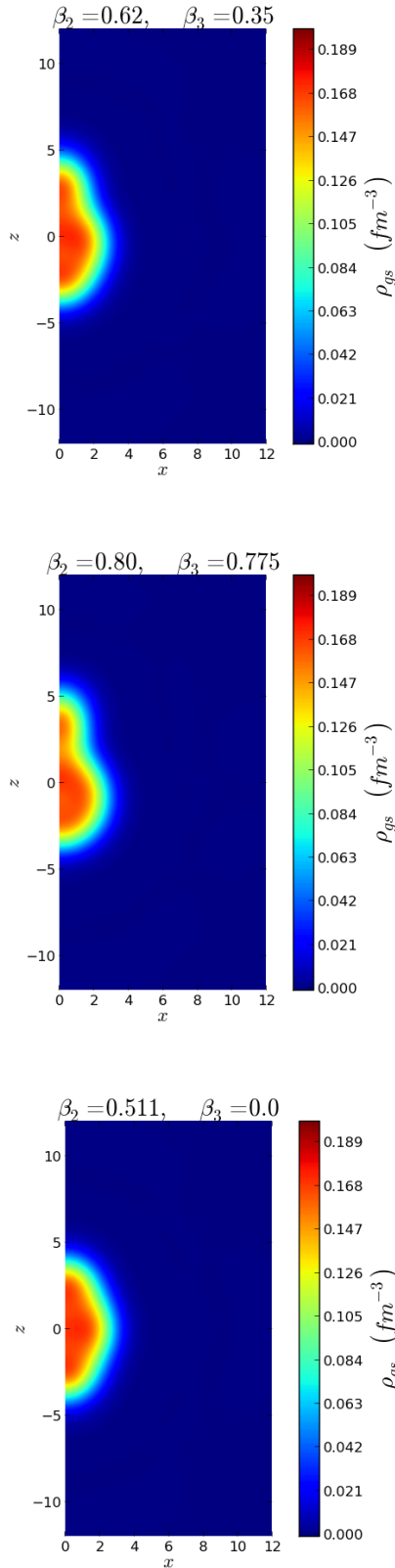


Slika 3: Ovisnost ravnotežne kvadrupolne deformacije atomske jezgre ^{20}Ne o nametnutoj oktopolnoj deformaciji na razini srednjeg polja.

Osim toga, aproksimacija srednjeg polja karakterizirana je lomljenjem različitih simetrija. Između ostalih, slomljena je i paritetna simetrija pa RHB stanja nemaju dobro definiran paritet. Dobar paritet moguće je ponovno uspostaviti u okviru GCM-a i bez eksplicitnog uvođenja odgovarajućeg operatora projekcije, računajući na mreži deformacija koja je simetrična s obzirom na ishodište. Na slici 4 prikazana je ovisnost energije vezanja jezgre ^{20}Ne o oktopolnoj deformaciji. 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.



Slika 4: Energija vezanja jezgre ^{20}Ne u ovisnosti o oktopolnoj deformaciji. Energije koje odgovaraju RHB valnoj funkciji prikazane su crnim krugovima, dok su projekcije na pozitivan i negativan paritet prikazane crvenim kvadratima i zelenim trokutima.



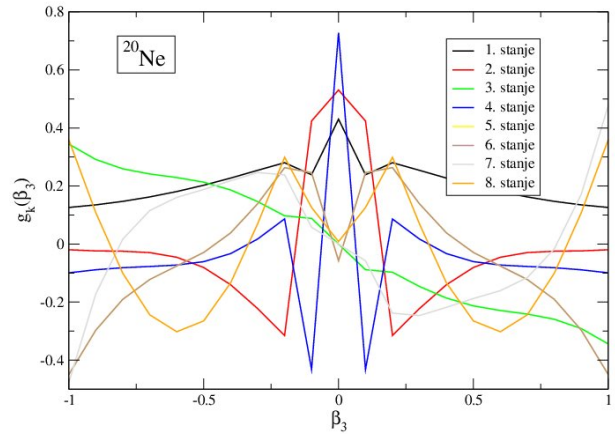
Slika 5: Raspodjela gustoće nukleona jezgre ^{20}Ne u projiciranim minimumima β_3^+ (gore) i β_3^- (u sredini), kao i u $\beta_3 = 0$ (dolje).

Energija osnovnog stanja jest niža pri projekciji sa $\beta_3 \neq 0$, a pridružena korelacijska energija, koja potječe od ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta, reda je veličine 2 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 [4]. Ravnotežne oktrupolne deformacije projiciranih konfiguracija općenito su vrlo velike zbog postojanja α -grozdova u jezgri ^{20}Ne .

Na slici 5 prikazane su raspodjele gustoće nukleona jezgre ^{20}Ne u dva projicirana minimuma, kao i u $\beta_3 = 0$. U oba je projicirana minimuma uočljiva centrirana i gotovo sferična raspodjela gustoće na koju se nadovezuju kompaktne lokalizirane gustoće, koje odgovaraju α -česticama. Raspodjele gustoće u $-\beta_3^+$ i $-\beta_3^-$ mogu se dobiti zrcaljenjem ovih gustoća s obzirom na x -os. S druge strane, raspodjela gustoće nukleona bez oktrupolne deformacije simetrična je s obzirom na ovo zrcaljenje.

Na slici 6 prikazano je prvih 8 GCM kolektivnih valnih funkcija jezgre ^{20}Ne . Prva dva stanja imaju pozitivan paritet i smještena su na malim oktrupolnim deformacijama, dok je prvo neparno stanje značajnim dijelom oktrupolno deformirano. Budući da kolektivna stanja nemaju dobro definiran ukupan angularni moment, potpuna usporedba sa spektroskopskim podacima nije moguća bez ponovnog uspostavljanja dobrog angularnog momenta, što nadilazi opseg ovog rada. Međutim, energiju pobuđenja E_3 , koja odgovara razlici energija prvog neparnog i prvog parnog stanja, moguće je usporediti s eksperimentom. U slučaju jezgre ^{20}Ne dobije se $E_3 = 8.1$ MeV, što je znatno veće od eksperimentalnih 5.6 MeV, ali i od teorijskih 6.7 MeV iz [4]. Ovakav je rezultat očekivan s obzirom da teorija funkcionala gustoće i inače daje bolje rezultate u sustavima s više čestica, a i parametri korištenog funkcionala podešavani su na podatke o jezgrama sa $A \geq 150$ [15].



Slika 6: Prvih 8 GCM kolektivnih valnih funkcija jezgre ^{20}Ne . Šiljci na slici potječu od kolapsa sparivanja u određenim točkama i nemaju utjecaj na račun fizikalnih opservabli. Oni bi se mogli ukloniti projiciranjem na točan broj čestica u svakoj točki, no takav je postupak izvan opsega ovog rada.

S vrijednošću omjera $R_{42} \approx 2.6$ jezgra ^{20}Ne spada u deformirane jezgre i snage oktrupolnih prijelaza trebale bi se računati iz jednadžbe (38). Vrijednost snage oktrupolnog prijelaza $B(E3)$ povezana je s vrijednošću u Weisskopfovim jedinicama (W.u.) preko relacije $W(E3) = 2.404 \cdot 10^6 B(E3)/A^2$. U slučaju jezgre ^{20}Ne ona iznosi $W(E3) = 9.2$ W.u., što je za faktor 1.4 manje od odgovarajuće eksperimentalne vrijednosti.

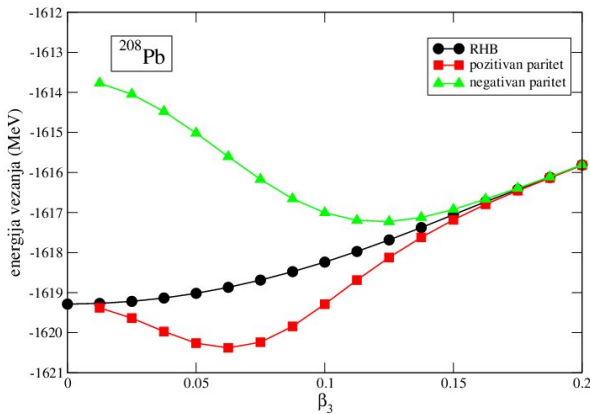
4 Oktupolne deformacije u atomskim jezgrama ^{208}Pb i ^{158}Gd

U ovom odjeljku odjeljku proučit ćemo pojavu oktopolnih deformacija u jezgrama ^{208}Pb i ^{158}Gd . Potom ćemo na primjeru jezgre ^{64}Zn ukazati na ograničenja ovakvog modela i diskutirati moguća proširenja.

4.1 Atomska jezgra ^{208}Pb

Dvostruko magična jezgra ^{208}Pb jedna je od rijetkih jezgara čije prvo pobuđeno stanje ima kvantne brojeve $J^\pi = 3^-$. Ovo se stanje nalazi na energiji pobuđenja 2.62 MeV, a snaga prijelaza $W(E3)$ u osnovno stanje $J^\pi = 0^+$ izrazito je kolektivna i iznosi oko 34 W.u. Prethodno je istraživanje pokazalo da u slučaju izotopnog lanca jezgara olova upravo oktopolni mod pobuđenja najviše doprinosi kolektivnim korekcijama rezultata koji su dobiveni na razini srednjeg polja [27]. Zbog toga je od interesa detaljnije proučiti predviđanja koja naš model daje za oktopolnu deformaciju jezgre ^{208}Pb .

Na slici 7 prikazana je ovisnost energije vezanja jezgre ^{208}Pb o oktopolnoj deformaciji. Uz energiju vezanja koja odgovara RHB valnoj funkciji, prikazane su energije vezanja koje odgovaraju projekcijama valne funkcije na pozitivan i negativan paritet.

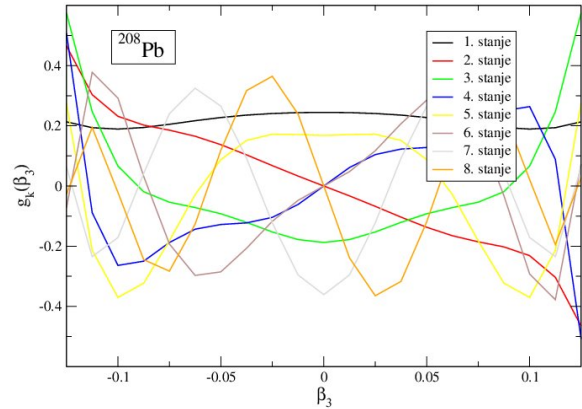


Slika 7: Energija vezanja jezgre ^{208}Pb u ovisnosti o oktopolnoj deformaciji. Energije koje odgovaraju RHB valnoj funkciji prikazane su crnim krugovima, dok su projekcije na pozitivan i negativan paritet prikazane crvenim kvadratima i zelenim trokutima.

Projicirani minimumi nalaze se na $\beta_3^+ \approx 0.0625$ i $\beta_3^- \approx 0.125$, na nešto većim deformacijama od $\beta_3^+ \approx 0.0375$ i $\beta_3^- \approx 0.075$ iz [4], odnosno $\beta_3^+ \approx 0.03$ i $\beta_3^- \approx 0.06$ iz [27]. Konkretni iznosi deformacija ovise o odabiru efektivnog međudjelovanja, no omjer $\beta_3^-/\beta_3^+ \approx 2$ ostaje isti u sva tri slučaja. Također, korelacijska energija koja potječe od ponovnog uspostavljanja dobrog pariteta nešto je manja nego u slučaju ^{20}Ne i iznosi oko 1 MeV. Valja uočiti i kako je energija valne funkcije negativnog pariteta dobro definirana za $\beta_3 \rightarrow 0$, u skladu s rezultatom iz [4], a u suprotnosti s rezultatom iz [27] u kojemu ekvivalentna krivulja divergira.

Na slici 8 prikazano je prvih 8 GCM kolektivnih valnih funkcija jezgre ^{208}Pb . Prvo pobuđeno GCM stanje negativnog

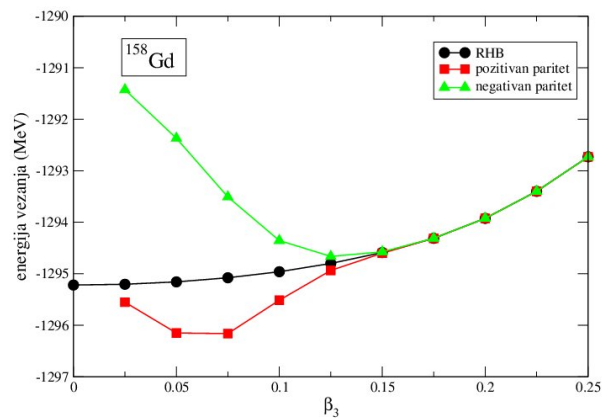
pariteta trebalo bi odgovarati 3^- stanju pa je moguće izračunati energiju pobuđenja ovog stanja. Naš rezultat $E_3 = 3.1$ MeV znatno je bliži eksperimentalnoj vrijednosti 2.6 MeV nego rezultat 4.0 MeV, dobiven prethodnim teorijskim računom [4]. Snaga oktopolnog prijelaza izračunata je iz jednadžbe (39) i iznosi 121 W.u., što za faktor 3 nadilazi odgovarajuću eksperimentalnu vrijednost. Međutim, treba napomenuti kako je korišteni kôd još uvijek u fazi testiranja i da ga je za stvarnu primjenu na težim jezgrama potrebno optimizirati i prilagoditi radu na distribuiranom računalu.



Slika 8: Prvih 8 GCM kolektivnih valnih funkcija jezgre ^{208}Pb .

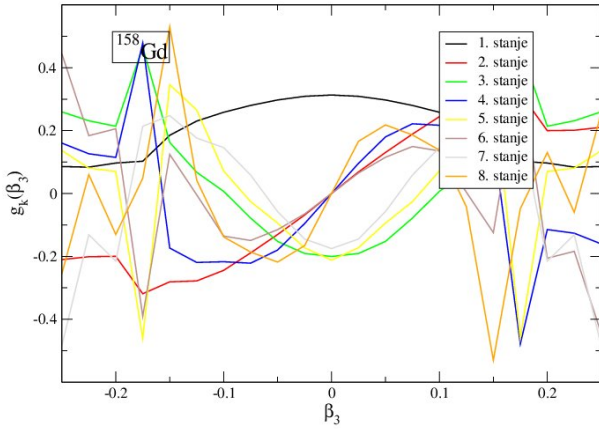
4.2 Atomska jezgra ^{158}Gd

Jezgra ^{158}Gd ima stanje $J^\pi = 3^-$ na energiji pobuđenja 1.04 MeV, sa snagom prijelaza u osnovno $J^\pi = 0^+$ stanje od 12 W.u. Na slici 9 prikazana je ovisnost energije vezanja jezgre ^{158}Gd o oktopolnoj deformaciji. Uz energiju vezanja koja odgovara RHB valnoj funkciji, prikazane su energije vezanja koje odgovaraju projekcijama valne funkcije na pozitivan i negativan paritet.



Slika 9: Energija vezanja jezgre ^{158}Gd u ovisnosti o oktopolnoj deformaciji. Energije koje odgovaraju RHB valnoj funkciji prikazane su crnim krugovima, dok su projekcije na pozitivan i negativan paritet prikazane crvenim kvadratima i zelenim trokutima.

RHB krivulja ima sličan oblik kao i kod jezgre ^{208}Pb , no znatno je manje zakrivljena. Projicirani minimumi nalaze se na $\beta_3^+ \approx 0.075$ i $\beta_3^- \approx 0.125$, što se izvrsno podudara s rezultatima iz [4], a omjer $\beta_3^-/\beta_3^+ \approx 2$ sličan je kao i kod ^{208}Pb . Prvih 8 GCM kolektivnih valnih funkcija jezgre ^{158}Gd prikazano je na slici 10. Parnim stanjima odgovaraju male oktopolne deformacije, dok su neparna stanja dobrim dijelom oktopolno deformirana. Energija pobuđenja $E_3 = 1.18$ MeV izvrsno se slaže s eksperimentalnih 1.04 MeV. Također, ova je vrijednost znatno manja od odgovarajuće vrijednosti za jezgru ^{208}Pb , u skladu s činjenicom da je i krivulja RHB energija vezanja manje zakrivljena.



Slika 10: Prvih 8 GCM kolektivnih valnih funkcija jezgre ^{158}Gd .

S omjerom $R_{42} \approx 3.3$ jezgra ^{158}Gd spada u skupinu jako deformiranih jezgara i snaga oktopolnog prijelaza trebala bi se računati iz jednadžbe (38). U usporedbi s vrijednošću $W(E3) = 11.6$ W.u. iz [4], dobivena vrijednost 15.9 W.u. znatno lošije reproducira eksperimentalnih 12 W.u. Pregled rezultata za jezgre ^{20}Ne , ^{158}Gd i ^{208}Pb , kao i usporedba s dostupnim teorijskim i eksperimentalnim vrijednostima, dani su u tablici 1.

Tablica 1: Usporedba E_3 i $W(E3)$ vrijednosti dobivenih RHB+GCM računom s dostupnim teorijskim i eksperimentalnim vrijednostima [4]. Referentne teorijske vrijednosti dobivene su HFB+GCM računom, za generirajuću koordinatu uzeta je oktopolna, a u kanalu čestica-šupljina korišteno je D1S Gogny međudjelovanje.

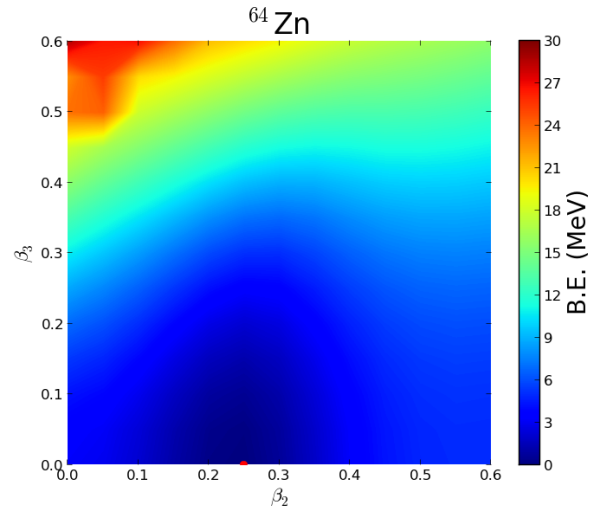
jezgra	E_3 (MeV)		
	RHB+GCM	eksperiment	teorija
^{20}Ne	8.1	5.6	6.7
^{158}Gd	1.18	1.04	1.7
^{208}Pb	3.1	2.6	4.0

jezgra	$W(E3)$ (W.u.)		
	RHB+GCM	eksperiment	teorija
^{20}Ne	9.2	13	12
^{158}Gd	15.9	12	11.6
^{208}Pb	121	34	53

Energije pobuđenja E_3 vrlo se dobro slažu s eksperimentalnim vrijednostima, posebno u slučaju jezgre ^{158}Gd gdje je dobivena vrijednost samo 1.13 puta veća od stvarne vrijednosti. Eksperimentalne snage oktopolnih prijelaza nisu reproducirane, a nerasazmjernost je najveći u slučaju najteže promatrane jezgre, ^{208}Pb . Kako bi naš kôd za račun snage oktopolnih prijelaza bio primjenjiv i na teškim jezgrama, bit će ga potrebno optimizirati i prilagoditi tako da radi na distribuiranom računaru. Osim toga, teorijske je rezultate moguće približiti eksperimentalnima uzimajući u obzir i kvadrupol-oktopol vezanje. Najbolji je dokaz toga jezgra ^{64}Zn . U jednom od novijih istraživanja, vrijednosti E_3 i $W(E3)$ jezgre ^{64}Zn gotovo su dvostruko poboljšane kad je u račun uključena i međuovisnost ova dva stupnja slobode [7].

4.3 Atomska jezgra ^{64}Zn

Atomska jezgra ^{64}Zn predstavlja standardan primjer jezgre za koju su teorijska predviđanja u velikom neslaganju s eksperimentom. Neslaganje se najviše očituje u teorijskim vrijednostima snage oktopolnog prijelaza, koje su i do nekoliko redova veličine manje od eksperimentalnih vrijednosti. Uvid u razloge ovog neslaganja može nam dati prikaz energije vezanja atomske jezgre ^{64}Zn u β_2 - β_3 ravnini sa slike 11.



Slika 11: Energije vezanja atomske jezgre ^{64}Zn u $\beta_2 - \beta_3$ ravnini na razini srednjeg polja. Sve su energije normirane s obzirom na energiju apsolutnog minimuma. Boja označava energiju svake točke na površini u odnosu na minimum (crvena točka).

Ploha srednjeg polja izrazito je mekana, što ukazuje na činjenicu da se u slučaju jezgre ^{64}Zn oktopolni i kvadrupolni stupanj slobode ne mogu promatrati neovisno. Kako bi se teorijske vrijednosti približile eksperimentalnima, potrebno je uzeti u obzir i kvadrupol-oktopol vezanje. Metoda generirajućih koordinata može, u principu, uključiti proizvoljno mnogo generirajućih koordinata i predstavlja prirodan okvir za ovo proširenje. U nedavnom je istraživanju napravljen GCM račun s kvadrupolnom i oktopolnom generirajućom koordinatom, i u njemu su energija pobuđenja E_3 i snaga oktopolnog prijelaza $W(E3)$ poboljšane gotovo dvostruko u odnosu na račun sa samo jednom generirajućom koordinatom. Osim toga, poznato je da projekcija na dobar angularan moment mijenja teorijsku snagu prijelaza 2-3 puta, pa bi potpun račun, naročito za sferične jezgre, trebao uzeti u obzir i ovu korekciju [7].

5 Zaključak

Oktupolno deformirane atomske jezgre asimetrične su na refleksiju, a njihova se pojava povezuje s postojanjem nisko-ležećih vrpca negativnog pariteta. U ovom je radu primijenjen formalizam relativističkih energijskih funkcionala gustoće pri opisu oktupolnih pobuđenja u atomskim jezgrama ^{20}Ne , ^{158}Gd i ^{208}Pb . Relativistički Hartree-Bogoliubovljev model omogućio je račun jednočestičnih stanja i energija na razini srednjeg polja, dok je metoda generirajućih koordinata iskorištena kako bi se izračunale energije pobuđenja, kolektivne valne funkcije, kao i snage oktupolnih prijelaza. Na ovaj je način ponovno uspostavljena paritetna simetrija kolektivnih stanja, a odgovarajuće korelacijske energije reda su veličine 1 – 2 MeV. Energije pobuđenja prvih 3^- stanja reproducirane su s vrlo dobrom preciznošću, naročito u slučaju težih jezgara. Međutim, potpuna usporedba sa spektroskopskim podacima nije moguća bez ponovnog uspostavljanja dobrog ukupnog angularnog momenta. Snage okupolnih prijelaza značajno odstupaju od eksperimentalnih, budući da je korišten kôd još uvijek u fazi testiranja i optimizacije. Također, na primjeru jezgre ^{64}Zn ukazano je na važnost vezanja kvadrupolnog i oktupolnog stupnja slobode. U nastavku istraživanja optimizirat ćemo kôd za račun snaga prijelaza i uzeti u obzir kvadrupol-oktupol vezanje. Očekujemo da ćemo na taj način teorijska predviđanja energija pobuđenja i snaga oktupolnih prijelaza u promatranim jezgrama dodatno približiti eksperimentalnima, a bit ćemo u mogućnosti i dati predviđanja za druge jezgre, posebno one u kojima su u nedavnim istraživanjima otkrivene oktupolne deformacije [8, 9].

Zahvale

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za teorijsku fiziku Fizičkog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu, pod vodstvom izv. prof. dr. sc. Tamare Nikšić. Zahvaljujem se profesorici Nikšić na vremenu uloženom u nastanak ovog rada i svom prenesenom znanju.

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] F. Asaro, F. Stephens, Jr., i I. Perlman, *Phys. Rev.* **92**, 1495 (1953).
- [3] P. A. Butler i W. Nazarewicz, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 349 (1996).
- [4] L. M. Robledo i G. F. Bertsch, *Phys. Rev. C* **84**, 054302 (2011).
- [5] L. M. Robledo i R. R. Rodriguez-Guzman, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **39**, 105103 (2012).
- [6] K. Nomura, D. Vretenar, T. Nikšić, i Bing-Nan Lu, *Phys. Rev. C* **89**, 024312 (2014).
- [7] L. M. Robledo, *EPJ Web of Conferences* **66**, 02091 (2014).
- [8] P. E. Garrett i dr., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 062501 (2009).
- [9] L. P. Gaffney i dr., *Nature (London)* **497**, 199 (2013). (2013).
- [10] M. Pospelov i A. Ritz, *Ann. Phys.* **318**, 119-169 (2005).
- [11] T. Nikšić, D. Vretenar, i P. Ring, *Prog. Part. Nucl. Phys.*, **66**, 519 (2011).
- [12] G. A. Lalazissis, P. Ring, i D. Vretenar, *Extended Density Functionals in Nuclear Structure Physics*, Lecture Notes in Physics 641 (Springer, Heidelberg 2004).
- [13] M. Bender, P.-H. Heenen, i P.-G. Reinhard, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 121 (2003).
- [14] G. A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar, i P. Ring, *Phys. Rev. C* **71**, 024312 (2005).
- [15] T. Nikšić, D. Vretenar, i P. Ring, *Phys. Rev. C* **78**, 034318 (2008).
- [16] P. Ring, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **37**, 193 (1996).
- [17] P. Ring i P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Heidelberg 1980).
- [18] P. Bonche, J. Dobaczewski, i H. Flocard, *Nucl. Phys. A*, **510**, 466-502 (1990).
- [19] G. F. Bertsch i Y. Luo, *Phys. Rev. C* **81**, 064320 (2010).
- [20] A. Gezerlis, G. F. Bertsch, i Y.L. Luo, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 252502 (2011).
- [21] B. D. Serot, *Rep. Prog. Phys.* **55**, 1855 (1992).
- [22] H. Kucharek i P. Ring, *Z. Phys. A* **339**, 23 (1991).
- [23] Y. K. Gambhir, P. Ring, i A. Thimet, *Ann. Phys. (N.Y.)* **198**, 132 (1990).
- [24] M. Abramowitz i I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
- [25] D. L. Hill i J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **89**, 1102 (1953).
- [26] L. M. Robledo i G. F. Bertsch, *Phys. Rev. C* **86**, 054306 (2012).
- [27] P.-H. Heenen i dr., *Eur. Phys. J. A* **11**, 393 (2001).