

EKSTRAPOLACIJSKE METODE OSCILATORSKE BAZE U MODELIMA SREDNJEG POLJA

Igor Novak, F-3835

Fizički odsjek, PMF,

Bijenička c. 32, 10 000 Zagreb

30. siječnja 2015.

U ovom radu razmatran je utjecaj konačne dimenzije oscilatorske baze na opservable u samosuglasnim relativističkim modelima srednjeg polja (RMF). Razvoj u bazi harmoničkog oscilatora često je korištena metoda u kvantnomehaničkim računima. Nedostatak ove metode je ovisnost rezultata o korištenoj dimenziji oscilatorske baze. S ciljem rješavanja problema konačne dimenzije baze, analizirali smo i testirali model ekstrapolacije predložen u nedavnim znanstvenim radovima [1] i [2]. Model je testiran na jednostavnim, poznatim potencijalima, a potom i u samosuglasnim računima energija osnovnog stanja i radijusa jezgara ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{22}\text{O}$, ${}^{40}\text{Ca}$, ${}^{48}\text{Ca}$, ${}^{100}\text{Sn}$ i ${}^{132}\text{Sn}$.

I. UVOD

Razvoj u bazi harmoničkog oscilatora se često koristi u računima nuklearne strukture jer dozvoljava iskorištavanje svih simetrija nuklearnog problema mnoštva čestica i njena lokalizirana priroda odgovara strukturi atomske jezgre. Stoga se veći broj računalnih implementacija raznih teorijskih modela koji opisuju atomsku jezgru temelji na razvoju jednočestičnih valnih funkcija u bazi harmoničkog oscilatora. Međutim, kako je u praksi moguće koristiti samo konačnu bazu, dobijeni rezultati uvijek donekle ovise o dimenziji baze. Stoga je poželjno razviti metodu koja bi nam omogućila ekstrapolaciju rezultata prema potpunoj bazi i procjenu teorijske greške uzrokovane konačnom dimenzijom baze.

U seriji nedavnih radova [1–4] izvedeni su jednostavni analitički izrazi za korekcije očekivanih vrijednosti energija i radijusa sustava. Ukoliko bi se izvedeni rezultati doista pokazali primjenjivima u samosuglasnim računima, to bi znatno unaprijedilo cijelo područje teorijske nuklearne fizike vezano uz nuklearne energijske funkcionalne gustoće. Stoga smo u ovom radu analizirali i testirali predloženi model, prvo na jednostavnom primjeru Schrödingerove jednadžbe s jednim stupnjem slobode, zatim na Diracovoj jednadžbi i konačno u realističnima proračunima svojstava osnovnog stanja većeg broja sfernih atomskih jezgara od lakih kao što su ${}^4\text{He}$ i ${}^{16}\text{O}$, srednje teških ${}^{40}\text{Ca}$, ${}^{48}\text{Ca}$, do težih ${}^{100}\text{Sn}$ i ${}^{132}\text{Sn}$.

Rad je organiziran na sljedeći način. U drugom poglavlju predstavljena je teorijska pozadina rješavanja Schrödingerove jednadžbe razvojem u bazi harmoničkog oscilatora i model ekstrapolacije prema potpunoj, beskonačnoj bazi. U trećem poglavlju dani su rezultati test računa, kao i realističnog samosuglasnog računa te je analizirana primjenjivost metode ekstrapolacije u raznim slučajevima. Četvrto poglavlje sadrži zaključke rada, dok se tehnički detalji izvoda modela nalaze u dodacima A i B.

II. TEORIJSKA POZADINA

A. Teorijski model ekstrapolacija

Polazna točka razmatranja predstavljenih u ovom radu je Schrödingerova jednadžba, koja u najjednostavnijem slučaju stacionarnog stanja sustava s jednim stupnjem slobode glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1)$$

Radi se o običnoj diferencijalnoj jednadžbi drugog reda koju najčešće moramo rješavati numerički. Jedna od standardnih numeričkih metoda je *shooting* metoda koja se koristi za rješavanje problema rubnih uvjeta. Rubnim uvjetima zadajemo vrijednosti valne funkcije ili njenih derivacija na rubovima područja na kojem tražimo rješenje. Kod Dirichletovog rubnog uvjeta zadajemo vrijednost valne funkcije na rubu promatranog područja. *Shooting* metodom rješavamo vremenski neovisnu Schrödingerovu jednadžbu (1) i tražimo vlastite energije vezanih stanja u potencijalu. Ako se ograničimo na vezana stanja valna funkcija mora trnuti na velikim udaljenostima, tj. $\psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0$. U praksi je interval na osi x uvijek konačan, ali rubovi x_{min} i x_{max} moraju biti dovoljno daleko da bi vrijedilo $\psi(x_{min}) \approx 0$ i $\psi(x_{max}) \approx 0$. Numerički integriramo jednadžbu od x_{min} do x_{max} i tamo provjeravamo jesu li zadovoljeni rubni uvjeti. Ako nisu, postupak ponavljamo s promijenjenom energijom. Energije za koje su zadovoljeni rubni uvjeti su tražene vlastite energije.

Alternativna metoda je razvoj valne funkcije po potpunom skupu stanja $\{\varphi_k(\vec{r})\}$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(t)\varphi_k(\vec{r}), \quad (2)$$

čime Schrödingerova jednadžba prelazi u matričnu jednadžbu svojstvenih vrijednosti. Radi jednostavnosti kao potpun skup stanja vrlo često se koriste svojstvene funkcije harmoničkog oscilatora. U 1D slučaju svojstvene funkcije harmoničkog oscilatora glase:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

gdje su H_n Hermiteovi polinomi i m masa čestice. Kako Planckova konstanta \hbar ima dimenziju $kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}$, masa dimenziju kg , a frekvencija ω dimenziju s^{-1} , veličina $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ zapravo ima dimenziju duljine i predstavlja karakterističnu prostornu skalu harmoničkog oscilatora, te je stoga uobičajeno zovemo oscilatorska duljina. U trodimenzionalnom sfernosimetričnom slučaju, kakvim ćemo se baviti u kasnijim dijelovima rada, oscilatorske valne funkcije su:

$$\varphi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{N_{nl}}{\sqrt{b_0}} \xi^l L_n^{l+1/2}(\xi^2) e^{-\xi^2/2} \cdot Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (4)$$

gdje je $\xi = r/b_0$ radijalna koordinata u jedinicama oscilatorske duljine $b_0 = \sqrt{\hbar/M\omega_0}$, $Y_{lm}(\theta, \phi)$ kugline funkcije, a $L_n^m(\xi^2)$ pridruženi Laguerrovi polinomi. Normalizacijski faktor iznosi

$$N_{nl} = \sqrt{2n!/(l+n+1/2)!}. \quad (5)$$

U principu bi trebalo uzeti u obzir sva stanja baze, no u praktičnim računima je to nemoguće pa se baza reže nakon nekog konačnog broja oscilatorskih ljusaka N_{max} . Nepoželjna posljedica ovog pristupa je ovisnost rješenja Schrödingerove jednadžbe o korištenoj dimenziji baze.

Moguće rješenje ovog problema predloženo je u [1] i [2], u smislu da se rezultati dobiveni upotrebom konačne baze ekstrapoliraju, odnosno izvedu se korekcije pojedinih observabli. Predloženi model ćemo testirati u ovom radu na primjeru obične Schrödingerove jednadžbe i samosuglasnog računa. U izvodu promatramo česticu zarobljenu unutar konačne prostorne dimenzije tj. "kutije". Prostorna dimenzija te "kutije" odgovara prostornom rasponu oscilatorske baze te imamo Dirichletove rubne uvjete. Promotrimo prostor oscilatorskih valnih funkcija maksimalne oscilatorske energije $E = \hbar\omega(N + 1/2)$. U praksi se trebaju izabrati $\hbar\omega$ i N takvi da odsječak impulsa λ korištene interakcije bude manji od ultraljubičastog (UV) impulsa,

$$\Lambda_{UV} \equiv \sqrt{2(N + 1/2)\hbar}/b, \quad (6)$$

te da radijus r promatranog sustava bude manji od radijalne granice,

$$L_0 \equiv \sqrt{2(N + 1/2)}b \quad (7)$$

korištenog oscilatorskog prostora. Ovdje je $b \equiv \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ oscilatorska duljina baze, m označava masu čestice, dok je L_0 klasična točka obrata.

Konačni raspon oscilatorske baze do radijusa L u koordinatnom prostoru zahtijeva iščezavanje valne funkcije na $r \approx L$. Postavlja se pitanje kako najbolje kvantitativno odrediti L za dani N i $\hbar\omega$. Maksimalni radijus L_0 iz (7) je samo asimptotska procjena jer oscilatorska valna funkcija brzo trne iza klasične točke obrata. Stoga promotrimo izraz

$$L_i \equiv \sqrt{2(N + 3/2 + i)}b, \quad (8)$$

gdje je i cijeli broj, koji uključuje L_0 kao poseban slučaj. U dodatku A pokazano je da je najbolji izbor $i = 2$, tj. da je

$$L = L_2 = \sqrt{2(N + 3/2 + 2)}b \quad (9)$$

najbolja procjena konačne dimenzije oscilatorske baze.

Uz Dirichletov rubni uvjet na radijusu $r = L$ energiju možemo izraziti kao

$$E_L = E_\infty + \Delta E_L, \quad (10)$$

pri čemo je E_∞ energija sustava za $L \rightarrow \infty$, dok je ΔE_L tražena korekcija energije radi konačne dimenzije konfiguracijskog prostora.

Neka je $u_E(r)$ radijalno rješenje s regularnim rubnim uvjetom u ishodištu i energijom E . Označavamo partikularna rješenja kao $u_{E_L}(r) \equiv u_L(r)$ i $u_{E_\infty}(r) \equiv u_\infty(r)$. Linearna aproksimacija energije (za $r \leq L$) [5] je tada:

$$u_L(r) \approx u_\infty(r) + \Delta E_L \frac{du_E(r)}{dE} \Big|_{E_\infty}, \quad (11)$$

uz pretpostavku glatkog razvoja u_E oko $E = E_\infty$ pri fiksiranom r . Izvrijednimo jednadžbu (11) u $r = L$ uz rubni uvjet $u_L(L) = 0$, imamo

$$\Delta E_L \approx -u_\infty(L) \left(\frac{du_E(L)}{dE} \Big|_{E_\infty} \right)^{-1}, \quad (12)$$

što je tražena procjena. Za općenitu energiju E , asimptotski oblik radijalne valne funkcije za r veći od raspona R potencijala je

$$u_E(r) \xrightarrow{r \gg R} A_E (e^{-k_E r} + \alpha_E e^{+k_E r}). \quad (13)$$

Također znamo da vrijedi $u_\infty \xrightarrow{r \gg R} A_\infty e^{-k_\infty r}$ za $E = E_\infty$. Ovdje je k_∞ određen energijom separacije čestice:

$$S = \frac{\hbar^2 k_\infty^2}{2m} \quad (14)$$

Uzimamo derivaciju jednadžbe (13) po energiji i izvrijednimo u $E = E_\infty$, uz $\alpha_{E_\infty} = 0$ i $dk_E/dE = -m/(\hbar^2 k_E)$, kako bismo dobili

$$\frac{du_E(r)}{dE} \Big|_{E_\infty} = +A_\infty \frac{d\alpha_E}{dE} \Big|_{E_\infty} e^{+k_\infty r} + O(e^{-k_\infty r}) \quad (15)$$

Uvrštavanjem (15) za $r = L$ u jednadžbu (12), dobivamo

$$\Delta E_L \approx - \left[\frac{d\alpha_E}{dE} \Big|_{E_\infty} \right]^{-1} e^{-2k_\infty L} + O(e^{-4k_\infty L}). \quad (16)$$

Predfaktor u zagradama ovisi o detaljima interakcije, ali ne i o L , i mora se prilagoditi numeričkim podacima kada se jednažba (16) iskoristi zajedno s (10) [1]. Stoga je glavni rezultat:

$$E_L = E_\infty + a_0 e^{-2k_\infty L}. \quad (17)$$

U praktičnim primjenama, kada je energija separacije E_∞ nepoznata, koeficijenti a_0 i E_∞ , a u složenijim sustavima i k_∞ , mogu se tretirati kao parametri prilagodbe.

Sljedeća karakteristična observabla je radijus sustava. Očekivanu vrijednost kvadrata radijusa također možemo izraziti pomoću egzaktno vrijednosti $\langle r^2 \rangle_\infty$ i korekcije

$$\langle r^2 \rangle = \langle r^2 \rangle_\infty + \Delta \langle r^2 \rangle_L. \quad (18)$$

Pritom vrijedi

$$\Delta \langle r^2 \rangle_L = \frac{\int_0^L |u_L(r)|^2 r^2 dr}{\int_0^L |u_L(r)|^2 dr} - \frac{\int_0^\infty |u_\infty(r)|^2 r^2 dr}{\int_0^\infty |u_\infty(r)|^2 dr}. \quad (19)$$

Pošto je ovisnost o L funkcije $u_L(r)$ u jednažbi (11) ograničena na ΔE_L , kada se u_L uvrsti u (19) ovisnost o L svakog integranda dolazi u potpunosti iz gornje integracijske granice. Zato možemo iskoristiti asimptotske izraze $u_\infty(r) \rightarrow A_\infty e^{-k_\infty r}$ i

$$\left. \frac{du_E(r)}{dE} \right|_{E_\infty} \approx -\frac{A_\infty}{\Delta E_L} e^{-2k_\infty L} e^{+k_\infty r} \quad (20)$$

kako bismo identificirali izraz vodećeg reda $\Delta \langle r^2 \rangle_L \propto \langle r^2 \rangle_\infty (2k_\infty L)^3 e^{-2k_\infty L}$. Izraz sljedećeg reda je skaliran faktorom $(2k_\infty L) e^{-2k_\infty L}$ jer uvjet $u_L(L) = 0$ osigurava da ne postoji član koji je kvadratičan u $2k_\infty L$. Stoga je ovisnost kvadrata radijusa o L dana s

$$\langle r^2 \rangle_L \approx \langle r^2 \rangle_\infty [1 - (c_0 \beta^3 + c_1 \beta) e^{-\beta}] \quad (21)$$

gdje je $\beta \equiv 2k_\infty L$. Ovdje su $\langle r^2 \rangle_\infty, c_0$ i c_1 parametri prilagodbe, a k_∞ se određuje prilagodbom energije u jednažbi (17). Aproksimacija (21) vrijedi u asimptotskom režimu $\beta \gg 1$. Jednažbe (17) i (21) su glavni rezultati modela koji ćemo testirati u ovom radu.

B. Samosuglasni model srednjeg polja

Teorije srednjeg polja imaju široku primjenu u fizici u opisu interakcije sustava mnoštva čestica. Osnovna ideja jest ta da se mnogočestični sustav ne tretira sumacijom svih dvočestičnih interakcija, već da se interakcija jedne čestice sa svim ostalim opiše preko srednjeg potencijala kojeg stvaraju

sve ostale čestice. Razmotrimo česticu i na položaju \vec{r}_i koja osjeća potencijal U koji stvaraju čestice j :

$$U(\vec{r}_i) = \sum_j V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \mapsto U[\rho(\vec{r}_i)]. \quad (22)$$

Tada čestica i osjeća srednji potencijal koji ovisi o gustoći čestica

$$\rho(\vec{r}) = \sum_j \Psi_j^*(\vec{r}) \Psi_j(\vec{r}) \quad (23)$$

na njenom položaju. Problem se sada razmatra u potencijalu srednjeg polja $U[\rho]$ koji je funkcional gustoće ρ . Sada je zadatak naći točan funkcional gustoće $U[\rho]$ koji minimizira mnogočestični hamiltonijan.

Modeli srednjeg polja imaju široku primjenu u teorijskoj fizici, međutim ovdje ćemo se koncentrirati na njihovu implementaciju u nuklearnoj fizici. Teorije srednjeg polja u ovom trenutku daju ponajbolji opis svojstava jezgara, ne samo duž doline β -stabilnosti, već i egzotičnih jezgara s ekstremnim omjerima broja neutrona i protona. Parametri se prilagođavaju empirijskim svojstvima beskonačne nuklearne tvari i nekolicine atomskih jezgara te uspješno reproduciraju druga svojstva preostalih jezgara. Neki od najuspješnijih funkcionala u upotrebi su djelomično fenomenološki. Kad bi se i pronašao funkcional koji bi imao sasvim mikroskopske temelje, njegovi parametri bi se i dalje morali u konačnici prilagođavati podacima o atomskim jezgrama, jer nukleon-nukleon raspršenja i svojstva nuklearne materije jednostavno ne mogu odrediti funkcional do preciznosti potrebne za opis srednje teških i teških nuklida [13]. S druge strane, prednost teorije srednjeg polja jest, osim univerzalnosti, to što se, uz dobro podešene parametre, opis osnovnog stanja može nadograditi vremenski ovisnom teorijom čime je osiguran jedinstveni alat za proučavanje pobuđenja jezgara.

Suvremeni relativistički modeli srednjeg polja (RMF) daju dobre rezultate, a posjeduju i određene prednosti nad nerelativističkim modelima kao što su prirodno uvođenje spinskih stupnjeva slobode nukleona i rezultirajućeg potencijala od međudjelovanja spina i staze. Relativistički modeli nukleone tretiraju kao točkaste Diracove čestice. Neki modeli se zasnivaju na međudjelovanju čestica izmjenom ω, σ i ρ mezona, ali u ovom radu će se koristiti model koji sadrži samo međudjelovanje multog dosega (“point coupling” funkcional).

Relativistički energijski funkcional gustoće općenito ovisi o gustoćama i strujama koje su bilinearne u Diracovom spinornom polju nukleona ψ , a koje se mogu zajednički izraziti kao $\bar{\psi} \mathcal{O}_\tau \psi$ uz $\mathcal{O}_\tau \in \{1, \tau_i\}$ i $\Gamma \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5 \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}$. Ovdje su τ_i Paulijeve matrice, a Γ označava Diracove matrice.

Za početak, potrebno je odrediti energiju i gustoću osnovnog stanja. One odgovaraju samosuglasnim rješenjima relativističkih Kohn-Sham jednadžbi za jedan nukleon [6, 7]. Jedan od načina za dobivanje tih jednadžbi je konstruiranjem lagranžijana interakcija s članovima koji odgovaraju 4-fermionskoj (kontaktnoj) interakciji u različitim izoprostor-prostor kanalima:

- izoskalar-skalar $(\bar{\psi}\psi)^2$
- izoskalar-vektor $(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)$
- izovektor-skalar $(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi)$
- izovektor-vektor $(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)$.

Općeniti lagranžijan se može zapisati kao red potencija u strujama $\bar{\psi}\mathcal{O}_\tau\psi$ i njihovim derivacijama, gdje viši članovi odgovaraju višečestičnim interakcijama [8–12]. U ovom radu je korišten lagranžijan formuliran u [13], koji uključuje samo članove interakcija drugog reda dok će višečestične korelacije (kratkodosežne, ali i one srednjeg i dugog doseg) biti sadržane u ovisnosti konstanti vezanja o gustoći. Gustoću lagranžijana možemo pisati kao

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{free} + \mathcal{L}_{pc} + \mathcal{L}_{der} + \mathcal{L}_{em}, \quad (24)$$

pri čemu je

$$\mathcal{L}_{free} = \bar{\psi}(i\gamma_\mu\partial^\mu - M)\psi \quad (25)$$

član koji opisuje slobodne nukleone,

$$\mathcal{L}_{pc} = -\frac{\alpha_S(\rho)}{2}(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{\alpha_V(\rho)}{2}(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) - \frac{\alpha_{TV}(\rho)}{2}(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi) \quad (26)$$

član koji odgovara kontaktnom nukleon-nukleon međudjelovanju,

$$\mathcal{L}_{der} = -\frac{\delta S}{2}(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) \quad (27)$$

član s derivacijama, a

$$\mathcal{L}_{em} = -\frac{e}{2}(1 - \tau_3)A_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \quad (28)$$

član koji opisuje vezanje protona za elektromagnetsko polje. U gornjim izrazima M je masa nukleona, a ψ nukleonski spinor. Vektori u izospinskom prostoru naznačeni su strelicama, dok indeksi S , V i TV označavaju redom sljedeće kanale međudjelovanja u izospinskom i koordinatnom prostoru: izoskalar-skalar, izoskalar-vektor i izovektor-vektor. Kako bi se smanjio broj parametara, lagranžijan ne sadrži kanal izovektor-skalar [14].

Iz gustoće lagranžijana (24)-(28) gustoća hamiltonijana može se izračunati kao (0,0) komponenta tenzora energije i impulsa,

$$\mathcal{H} = T^{00} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - \mathcal{L}, \quad (29)$$

iz čega slijedi energija

$$E = \int \mathcal{H} d^3r. \quad (30)$$

Jednadžba gibanja za gustoću jednočestičnih stanja,

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{i=1}^A |\psi_i(\mathbf{r}, t)\langle \psi_i(\mathbf{r}', t)|, \quad (31)$$

dobiva se iz funkcionala energije vremenski ovisnim varijacijskim principom,

$$\delta \int dt \{ \langle \phi | i\partial_t | \phi \rangle - E[\rho(t)] \} = 0, \quad (32)$$

a glasi

$$i\partial_t \rho(t) = [h(\rho(t)), \rho(t)]. \quad (33)$$

Pritom je $|\phi\rangle$ ukupno kvantno stanje jezgre, a $h(\rho(t))$ jednočestični Diracov hamiltonijan, koji je jednak derivaciji energije po gustoći,

$$h \equiv \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho}. \quad (34)$$

Raspisujući operator gustoće po jednočestičnim valnim funkcijama, Diracova jednadžba (33) može se zapisati u uobičajenom obliku,

$$[\gamma_\mu (i\partial^\mu - \Sigma^\mu - \Sigma_R^\mu - \tau_3 \Sigma_{TV}^\mu) - (M + \Sigma_S)]\psi = 0, \quad (35)$$

gdje su Σ_S , Σ^μ i Σ_{TV}^μ redom izoskalar-skalar, izoskalar-vektor te izovektor-vektor vlastite energije nukleona, a Σ_R^μ doprinos koji nastaje od derivacija konstanti vezanja po gustoći ρ_v . Pojedine energije Σ su definirane relacijama koje glase:

$$\Sigma_S = \alpha_S(\rho_v)\rho_s - \delta_S \square \rho_s, \quad (36)$$

$$\Sigma^\mu = \alpha_V(\rho_v)j^\mu + e \frac{(1 - \tau_3)}{2} A^\mu, \quad (37)$$

$$\Sigma_{TV}^\mu = \alpha_{TV}(\rho_v)j^{\vec{\mu}}, \quad (38)$$

$$\Sigma_R^\mu = \frac{j^\mu}{2\rho_v} \left\{ \frac{\partial\alpha_S}{\partial\rho} \rho_s^2 + \frac{\partial\alpha_V}{\partial\rho} j_\mu j^\mu + \frac{\partial\alpha_{TV}}{\partial\rho} \vec{j}_\mu \vec{j}^\mu \right\}. \quad (39)$$

Osnovno stanje $|\phi_0\rangle$ odgovara samosuglasnom rješenju jednažbi (35)-(39), uz izraze za izoskalaru i izovektorsku 4-struju te skalarnu gustoću:

$$j_\mu = \langle \phi_0 | \bar{\psi} \gamma_\mu \psi | \rangle = \sum_{k=1}^N v_k^2 \bar{\psi}_k \gamma_\mu \psi_k, \quad (40)$$

$$\vec{j}_\mu = \langle \phi_0 | \bar{\psi} \gamma_\mu \vec{\tau} \psi | \rangle = \sum_{k=1}^N v_k^2 \bar{\psi}_k \gamma_\mu \vec{\tau} \psi_k, \quad (41)$$

$$\rho_s = \langle \phi_0 | \bar{\psi} \psi | \rangle = \sum_{k=1}^N v_k^2 \bar{\psi}_k \psi_k, \quad (42)$$

gdje su ψ_k Diracovi spinori, v_k^2 opisuju popunjenost pojedine orbitale, a sumira se po popunjenim jednočestičnim orbitalama pozitivne energije.

Pri računu gustoće i četverostruja koristi se tzv. “no-sea” aproksimacija, prema kojoj su popunjena stanja ona u Fermijevom moru, odnosno stanja pozitivne energije ispod Fermijevog nivoa. Stanja negativne energije iz Diracovog mora nisu popunjena te ne doprinose nuklearnim gustoćama. Može se činiti da su neki efekti međudjelovanja na ovaj način zanemareni, ali oni se uzimaju u obzir fenomenološki, prilagodbom parametara eksperimentalnim podacima. U DD-PC1 funkcionalu (eng. *density dependent point coupling model*; model relativističkog kontaktnog funkcionala gustoće) korištenom u ovom radu, jakost i ovisnost o gustoći pojedinih konstanti vezanja parametrizirane su sljedećim *ansatzima*:

$$\begin{aligned} \alpha_S(\rho) &= a_S + (b_S + c_S x) e^{-d_S x}, \\ \alpha_V(\rho) &= a_V + b_V e^{-d_V x}, \\ \alpha_{TV}(\rho) &= b_{TV} e^{-d_{TV} x}, \end{aligned} \quad (43)$$

gdje je $x \equiv \rho/\rho_{sat}$ nukleonska gustoća u jedinicama gustoće saturacije simetrične nuklearne tvari. Za razliku od ranijih funkcionala, čiji su parametri u konačnici fino podešavani sferičnim jezgrama, parametri DD-PC1 funkcionala podešeni su energijama vezanja deformiranih jezgara.

Pretpostavka da su nukleoni gotovo nezavisne čestice koje se gibaju u srednjem potencijalu osnova je teorije srednjeg polja. Ta je tvrdnja prešutno iskorištena u jednažbi (31). Naime, ukoliko su nukleoni nezavisni, ukupna se valna funkcija jezgre može napisati kao produkt jednočestičnih valnih funkcija. Točnije, budući je riječ o fermionima, valna funkcija jezgre mora biti antisimetrična

s obzirom na njihovu zamjenu te je ona Slaterova determinanta jednočestičnih stanja. Ovo je tzv. Hartree-Fockova aproksimacija (HF), koja se u formalizmu druge kvantizacije može zapisati na sljedeći način,

$$|\phi\rangle = a_{\psi_1}^\dagger a_{\psi_2}^\dagger \dots a_{\psi_A}^\dagger |0\rangle, \quad (44)$$

gdje ψ_i označavaju jednočestična stanja, $|\phi\rangle$ ukupno stanje jezgre, a $|0\rangle$ stanje vakuuma.

Najčešće se, umjesto orbitala ψ_i , koristi matrica gustoće jednočestičnih stanja [15],

$$\rho_{ij} = \langle i|\rho|j\rangle = \langle\phi|a_j^\dagger a_i|\phi\rangle, \quad (45)$$

koja je s istima povezana jednažbom (31). Moguće je također pisati

$$\rho = \sum_i n_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (46)$$

gdje n_i predstavlja zaposjednutost i -tog nivoa, koja u Hartree-Fockovoj aproksimaciji može biti 0 ili 1. Osnovno stanje jezgre aproksimira se Slaterovom determinantom u računima koji zbog jednostavnosti zanemaruju interakciju sparivanja između istovrsnih nukleona.

III. NUMERIČKA IMPLEMENTACIJA MODELA

A. Testovi na jednodimenzionalnom modelu

Utjecaj konačne dimenzije oscilatorske baze na vrijednosti opservabli prvo je testiran na jednostavnom jednodimenzionalnom potencijalu (tzv. *toy* modelu) za koji se Schrödingerova jednažba može riješiti do željene preciznosti. Cilj je provjeriti i ilustrirati neke glavne karakteristike metode ekstrapolacije. Odabran je tzv. *container* potencijal

$$V(x) = V_0 \frac{\tanh(\frac{x-a}{\sigma}) - \tanh(\frac{x+a}{\sigma})}{2 \tanh(\frac{a}{\sigma})}, \quad (47)$$

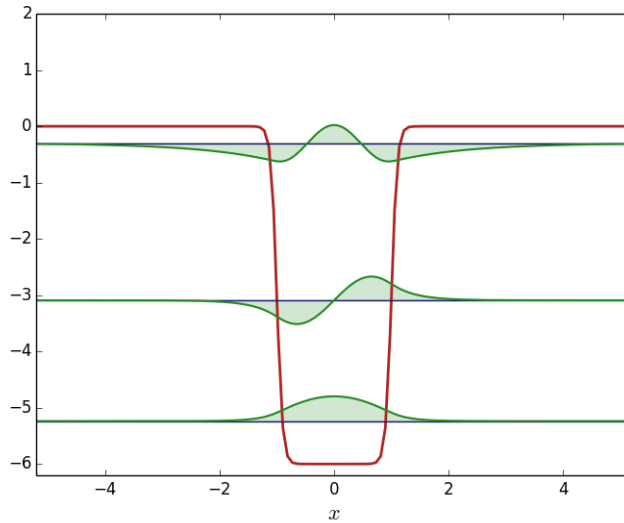
jer je vrlo sličan srednjem polju u atomskoj jezgri. Parametar V_0 kontrolira dubinu, a širinu, a σ strminu jame. Koristimo sustav jedinica u kojem vrijedi $\hbar = 1$, a za vrijednost mase čestice smo radi jednostavnosti također odabrali vrijednost $m = 1$. Promjenama parametra dubine potencijala ujedno mijenjamo broj vezanih stanja u jami, što je potencijal dublji, broj vezanih stanja će biti veći.

Uspoređeni su dobiveni rezultati energija E i kvadrata očekivane vrijednosti položaja $\langle x^2 \rangle$ za različite duljine baze s relacijama

$$E_L = E_\infty + a_0 e^{-2k_\infty L_2}, \quad (48)$$

$$\langle x^2 \rangle_L = \langle x^2 \rangle_\infty \left[1 - (c_0 \beta^3 + c_1 \beta) e^{-\beta} \right]. \quad (49)$$

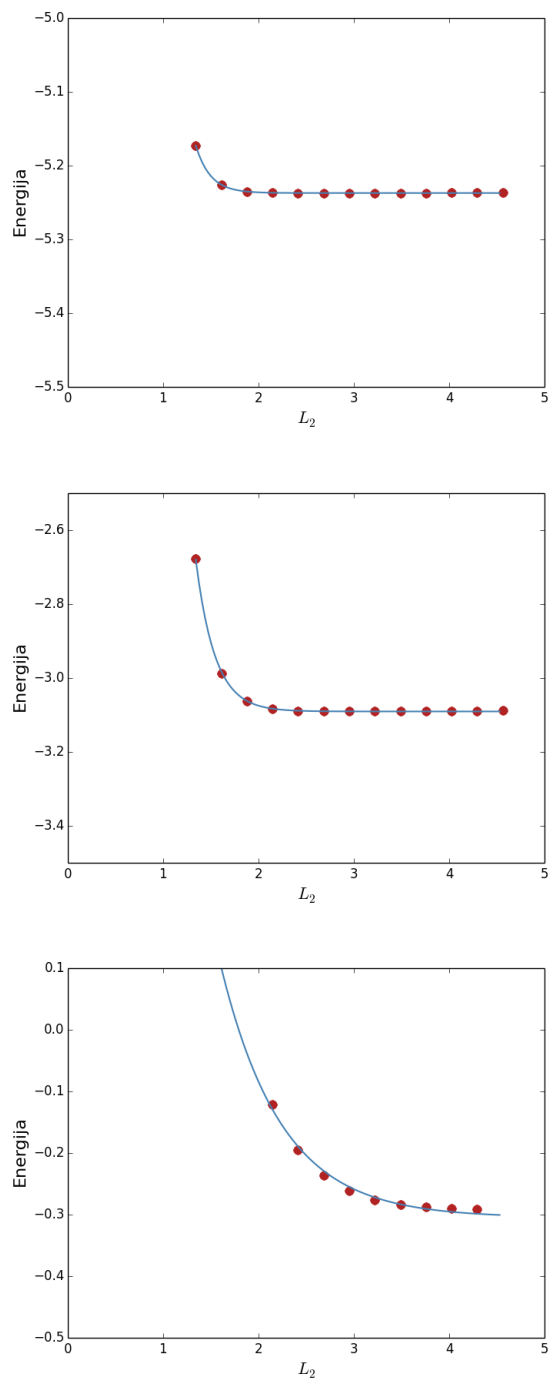
Pritom je $\beta = 2k_\infty L_2$, a koristi se i veza $k_\infty = \sqrt{-2mE_\infty/\hbar^2}$ koja smanjuje broj slobodnih parametara za jedan.



Slika 1: Prikaz *container* potencijala dubine $V_0 = 6$, širine $a = 1$ i strmine $\sigma = 0.1$. Potencijal podržava tri vezana stanja koja su također prikazana na slici.

Na sl. 1 prikazan je *container* potencijal dubine $V_0 = 6$, širine $a = 1$ i strmine $\sigma = 0.1$ koji podržava tri vezana stanja. Valne funkcije vezanih stanja također su prikazane na slici, zajedno s energijskim nivoima.

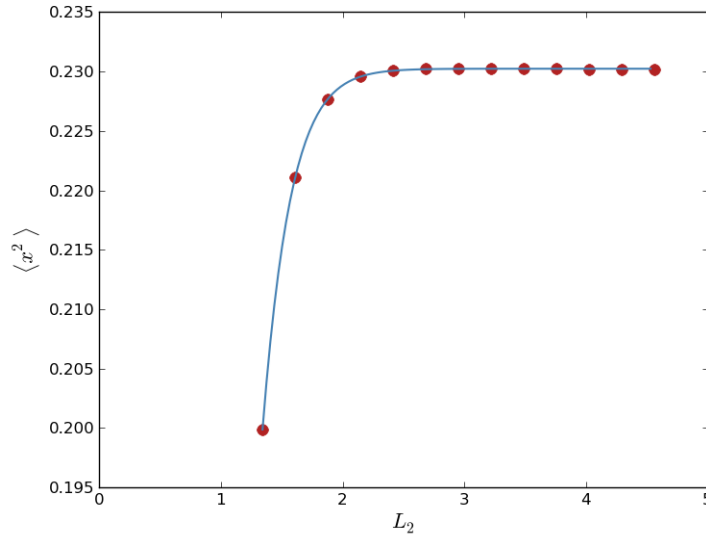
Prostornu dimenziju L_2 možemo mijenjati na dva načina: i) promjenom broja oscilatorskih lju-saka u razvoju valne funkcije, ii) promjenom oscilatorske duljine korištene baze. Kao ilustraciju, fiksiramo broj lju-saka na $N_{sh} = 20$ i mijenjamo oscilatorsku duljinu. Na sl. 2 prikazani su rezultati ekstrapolacije energije vezanih stanja promatranog *container* potencijala. Broj oscilatorskih lju-saka fiksiran je na $N_{sh} = 20$, dok je oscilatorska duljine mijenjana u rasponu koji izbjegava UV kontami-naciju. Kod prilagodbe smo koristili vezu $k_\infty = \sqrt{-2mE_\infty/\hbar^2}$, odnosno prilagodba je napravljena pomoću dva slobodna parametra E_∞ i a_0 .



Slika 2: Rezultati prilagodbe energija vezanih stanja *container* potencijala. Detalji računa objašnjeni su u tekstu.

Sa slike se vidi kako prilagodba daje dobre rezultate za sva tri vezana stanja, a energije E_∞ dobijene prilagodbom iznose -5.237 , -3.090 i -0.305 te se u potpunosti slažu s numeričkim rezultatima dobijenima diskretizacijom Schrödingerove jednadžbe ili *shooting* metodom.

Kao drugi primjer, proveli smo prilagodbu za očekivane vrijednosti kvadrata položaja u osnovnom stanju promatranog *container* potencijala. Rezultati su prikazani na sl. 3, a parametar prilagodbe $\langle x^2 \rangle_\infty$ iznosi 0.230. Kao i u slučaju energija vezanih stanja $\langle x^2 \rangle_\infty$ slaže se s numeričkim rezultatima dobijenima diskretizacijom Schrödingerove jednadžbe ili *shooting* metodom.

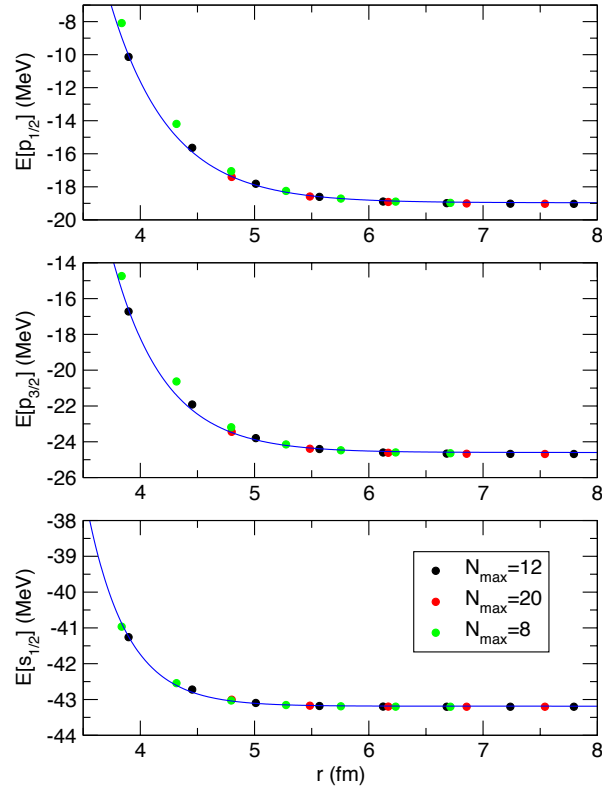


Slika 3: Rezultati prilagodbe kvadrata položaja osnovnog stanja *container* potencijala. Detalji računa objašnjeni su u tekstu.

Dobiveni rezultati u skladu su sa razmatranjima iznijetima u referencama [1], [2], [3], [4]. Vrijedi spomenuti da je ekstrapolacija preciznija za pliće jame jer tada nisu toliko izraženi efekti UV kontaminacije. Ukoliko je jama duboku, smanjivanjem raspona parametra L_2 , odnosno oscilatorске duljine, možemo izbjeći UV kontaminaciju, no tada na raspolaganju imamo manje točaka za prilagodbu te možemo očekivati nešto slabije rezultate.

B. Test na Diracovoj jednadžbi

Sljedeći numerički test proveli smo na Diracovoj jednadžbi za Woods-Saxon potencijal čiji parametri su prilagođeni jezgri ^{16}O .

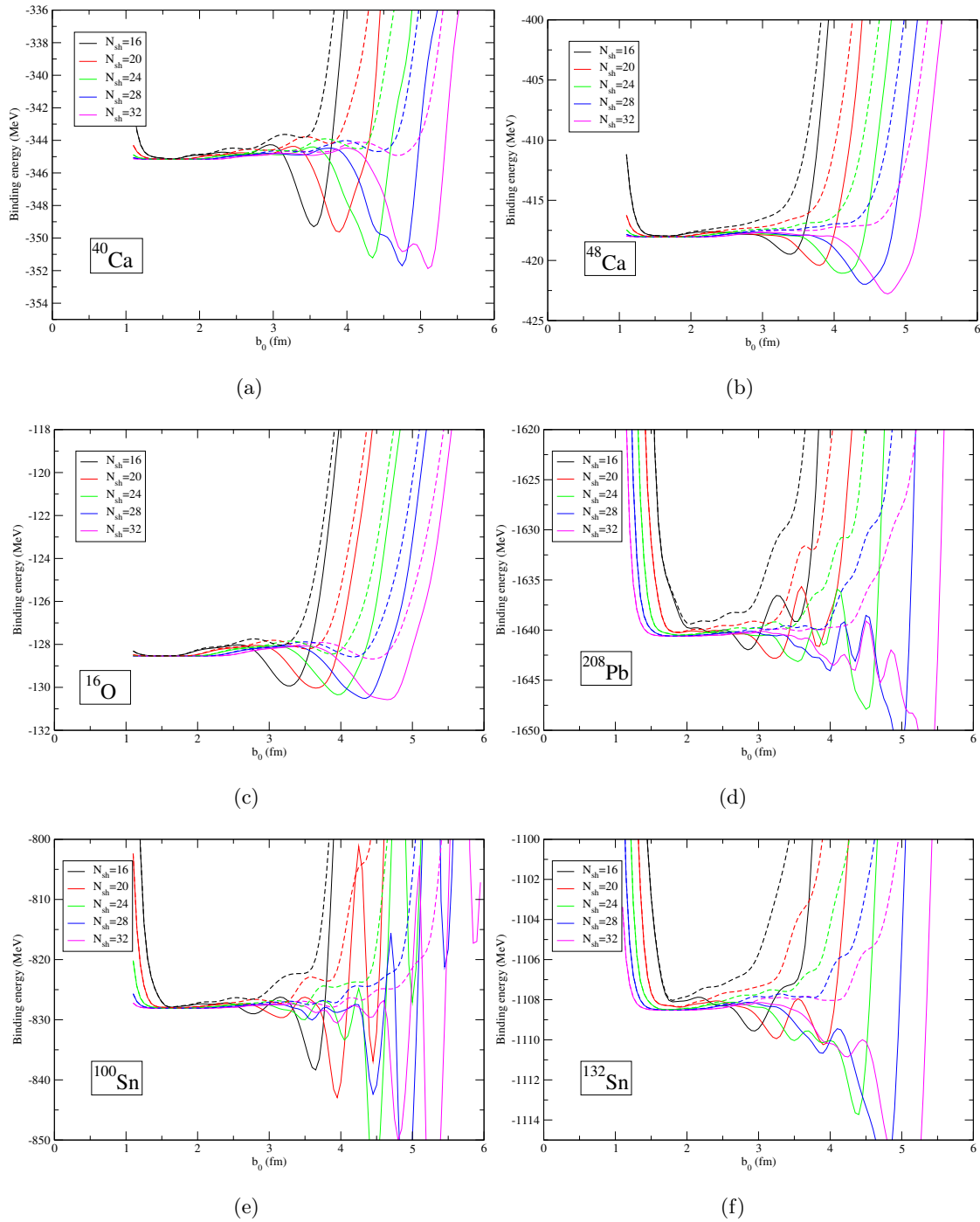


Slika 4: Rezultati prilagodbe vezanih stanja sferno-simetričnog Woods-Saxon potencijala čiji parametri su prilagođeni jezgri ^{16}O . Detalji računa objašnjeni su u tekstu.

Na sl. 4 prikazani su rezultati prilagodbe za tri vezana neutronska stanja ($s_{1/2}$, $p_{3/2}$ i $p_{1/2}$) u sferno-simetričnom Woods-Saxon potencijala čiji parametri su prilagođeni jezgri ^{16}O . Diracova jednačba je riješena razvojem u bazi sferno-simetričnog harmoničkog oscilatora s $N_{sh} = 8$, $N_{sh} = 12$ i $N_{sh} = 20$ ljusaka. Prilagodba je napravljena koristeći podatke za $N_{sh} = 12$ ljusaka i vezu $k_{\infty} = \sqrt{-2mE_{\infty}/\hbar^2}$ što nam ostavlja dva slobodna parametra E_{∞} i a_0 . Bitno je naglasiti da dobijena funkcionalna ovisnost dobro opisuje i podatke za $N_{sh} = 8$ te $N_{sh} = 20$ ljusaka.

Kod primjene metode u realističnim računima, nailazimo na problem pri "neprirodnim", visokim vrijednostima konstante oscilatorske duljine. Na slikama 5(a) do 5(f) vidimo rezultate za promatrane jezgre. Primjetno je kako rezultati za energiju osnovnog stanja promatranih jezgara

vrlo brzo konvergiraju u lokalni minimum, no u UV limesu pojavljuju se novi, niži minimumi zbog čega prilagodba (17) nije dobra i ekstrapolacija ne daje dobru vrijednost energije osnovnog stanja. Uzrok problema nalazi se u razvoju malih komponenti Diracova spinora (B5) za "neprirodne" vrijednosti konstante b_0 . U praktičnim računima je važno da se male komponente razvija u više oscilatorskih ljusaka $\tilde{N}_{max} = 2\tilde{n}_{max} + \tilde{l}_i$ od velikih komponenti koje se razvijaju u $N_{max} = 2n_{max} + l_i$ ljusaka. U protivnom stanje baze u razvoju za veliku komponentu f_i s maksimalnom vrijednosti radijalnog kvantnog broja $n = n_{max}$ nije vezano u Diracovoj jednadžbi sa stanjem kvantnog broja $\tilde{n} = n_{max} + 1$ u razvoju male komponente g_i kako bi trebalo biti u slučaju s beskonačnim razvojem. Problem nastaje rezanjem baze zbog čega se miješaju rješenja pozitivnih i negativnih energija. Stoga se u razvojima za koje vrijedi $\tilde{n}_{max} \leq n_{max}$ pronalaze "spuriozna" stanja s velikim brojem čvorova u blizini Fermijeve površine [17]. Treba naglasiti da se ovaj problem javlja samo u UV području koje nama i nije tako zanimljivo kao IR područje.

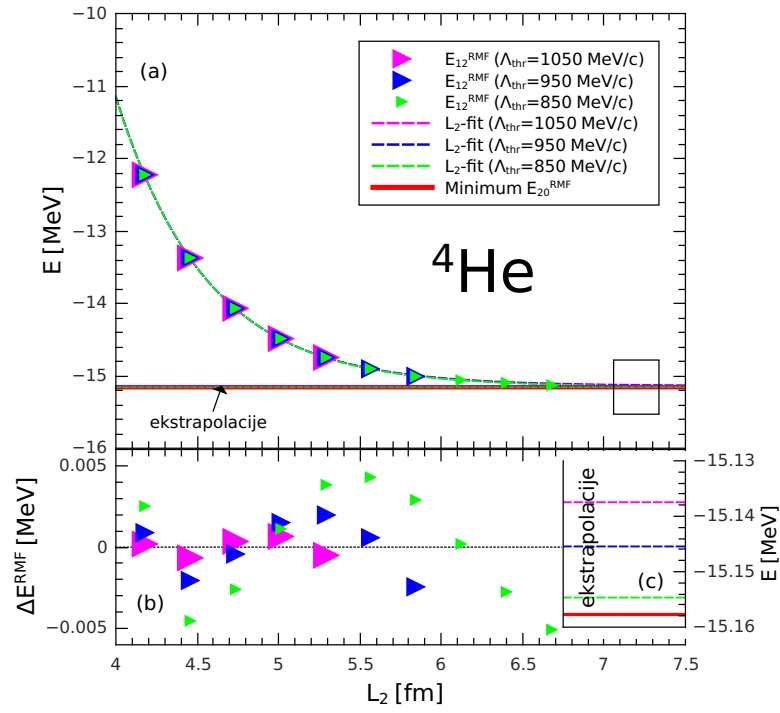
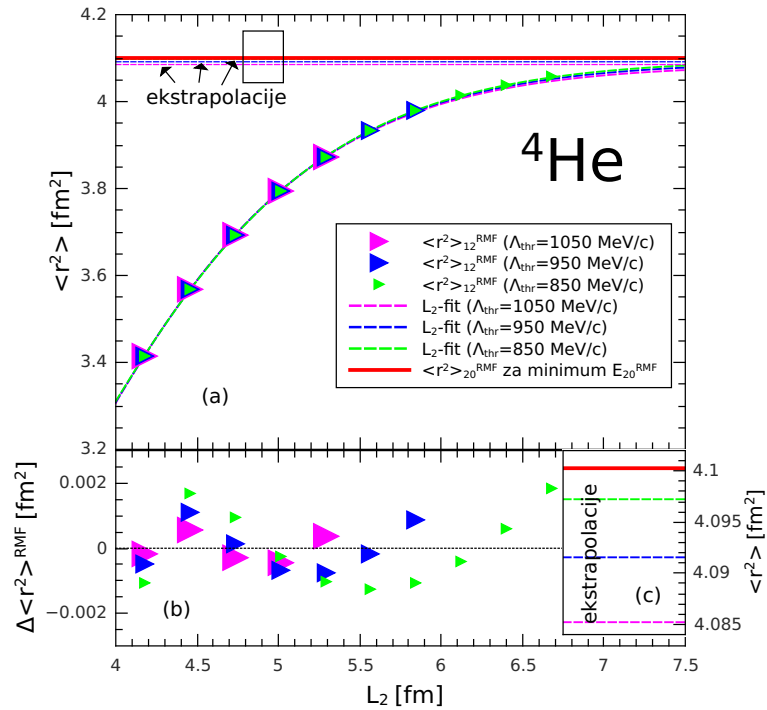


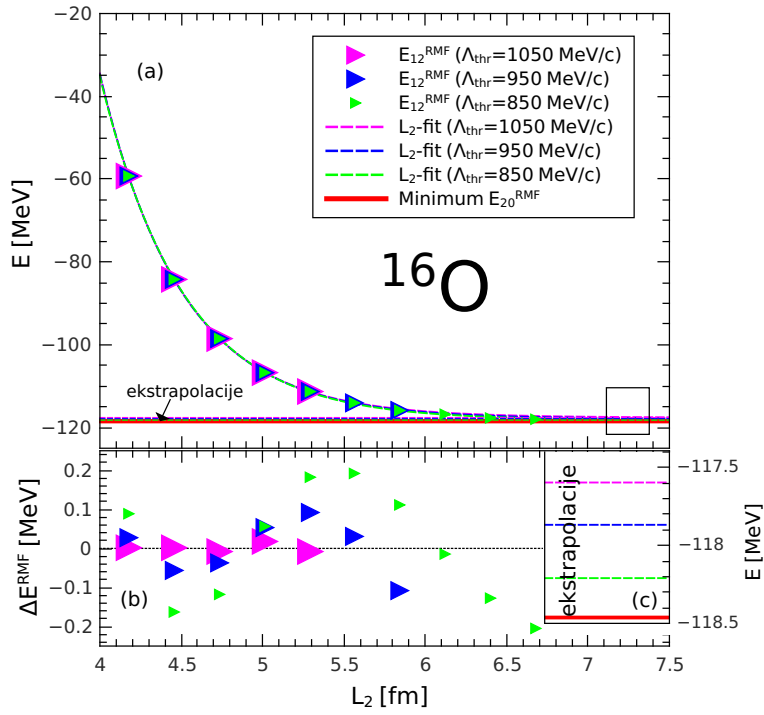
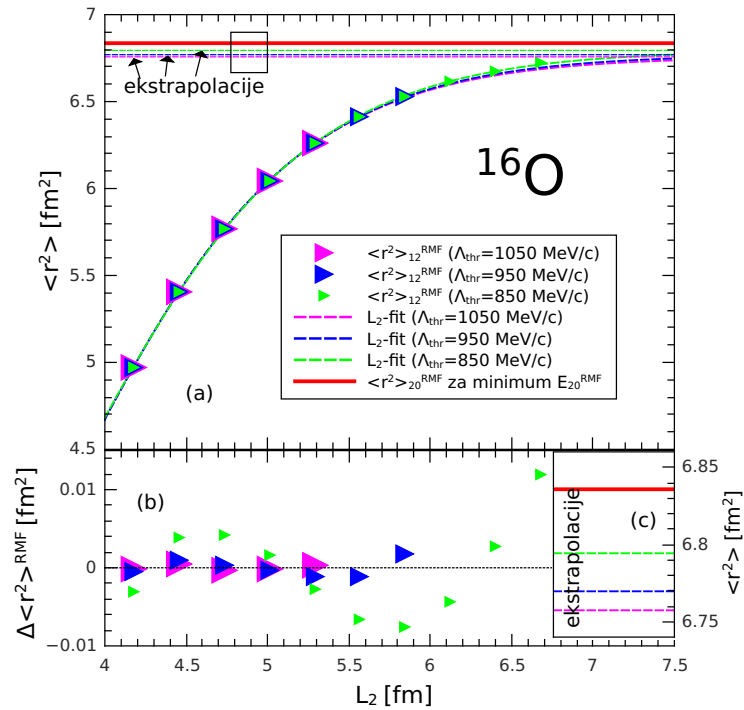
Slika 5: Pune linije su standardni izbor kada malu komponentu razvijamo u $N + 1$ ljusaka (veliku razvijamo u N), a isprekidane kada malu komponentu razvijamo u nešto više ljusaka (u konkretnom računu $N + 7$, iako je već $N + 3$ dovoljno).

C. Primjena u realističnim računima

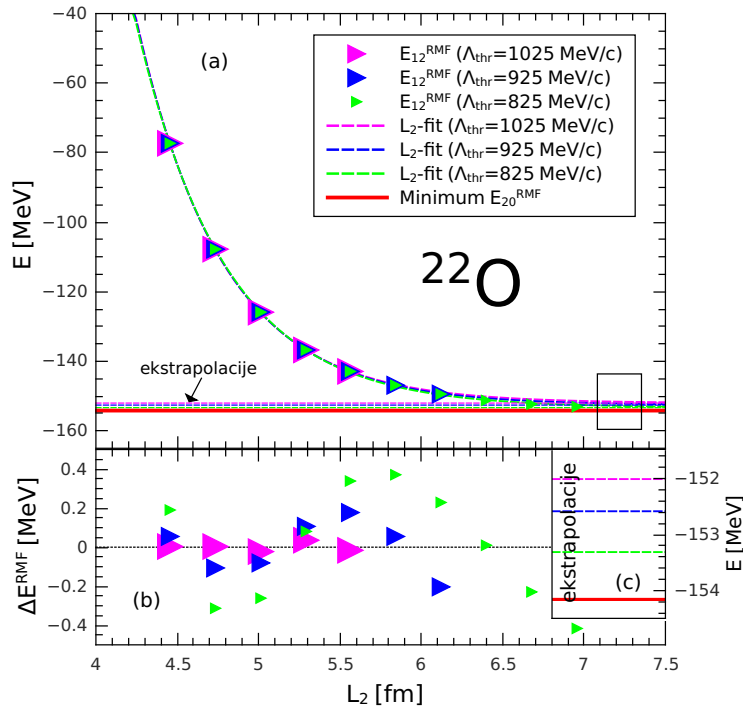
U ovom dijelu je testirana primjena jednadžbi (17) i (21) u računu energija osnovnih stanja i pripadajućih radijusa za jezgre ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{22}\text{O}$, ali i teže jezgre poput ${}^{40}\text{Ca}$, ${}^{48}\text{Ca}$, ${}^{100}\text{Sn}$, ${}^{132}\text{Sn}$. Račun vrijednosti energija i radijusa jezgara proveden je pomoću programskog paketa DIRHB napisanog u programskom jeziku Fortran [16]. Programski paket računa svojstva osnovnog stanja atomskih jezgara u okviru relativističkih samosuglasnih modela srednjeg polja. U proračunima korištenima za izradu ovog rada, korišten je energijski funkcional DD-PC1. Obrada podataka i prilagodbe su izvršene pomoću programa QtPlot i Grace.

Na slikama 6 - 19 grafički su prikazani rezultati za sferne jezgre. U (a) simboli predstavljaju skupove rezultata RMF računa osnovne energije jezgre (ili njenog pripadajućeg kvadrata radijusa), odrezane na različitim impulsima Λ_{thr} , kao funkciju L_2 , uz $N = 12$ oscilatorskih ljustaka u konačnoj bazi. Odabrani su granični impulsi Λ_{thr} za koje su rezultati dovoljno konvergirali i kod kojih se ne pojavljuju značajne numeričke nestabilnosti. Što su jezgre teže, bilo je potrebno smanjivati odabrane Λ_{thr} kako bi se mogla provesti smislena nelinearna prilagodba. Linije predstavljaju pripadajuće prilagodbe na jednadžbu (17) (tj. (21)). Kao parametri prilagodbe na (17) korišteni su E_∞ , a_0 i k_∞ . Pri računu radijusa, parametri prilagodbe na (21) bili su $\langle r^2 \rangle_\infty$, c_0 i c_1 , uz korištenje dobivene vrijednosti k_∞ pri prilagodbi energije osnovnog stanja. (b) dio prikazuje razlike izračunatih i prilagođenih vrijednosti $E_{12}^{RMF}(L_2) - E_L(L_2)$ i $\langle r^2 \rangle_{12}^{RMF}(L_2) - \langle r^2 \rangle_L(L_2)$, za svaku od gornjih prilagodbi. (c) dio je uvećani dio gornjeg grafa i prikazuje ekstrapolacije E_∞ i $\langle r^2 \rangle_\infty$ za svaku od prilagodbi i minimalnu vrijednost energije osnovnog stanja (ili pripadajućeg kvadrata radijusa) dobivenu RMF računom uz $N = 20$ oscilatorskih ljustaka.

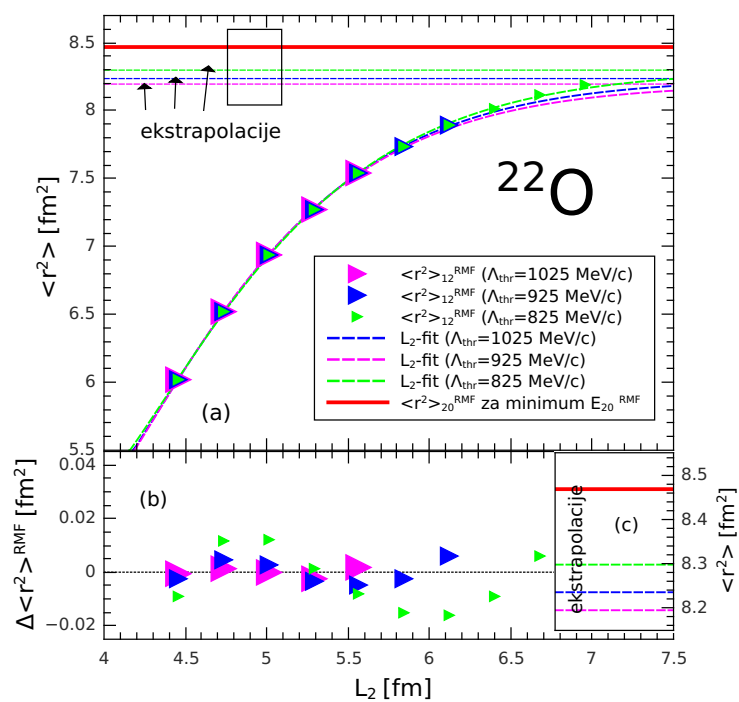
Slika 6: Rezultati računa energije osnovnog stanja jezgre ${}^4\text{He}$.Slika 7: Rezultati računa kvadrata radijusa jezgre ${}^4\text{He}$ u osnovnom stanju.

Slika 8: Rezultati računa energije osnovnog stanja jezgre ^{16}O .Slika 9: Rezultati računa kvadrata radijusa jezgre ^{16}O u osnovnom stanju.

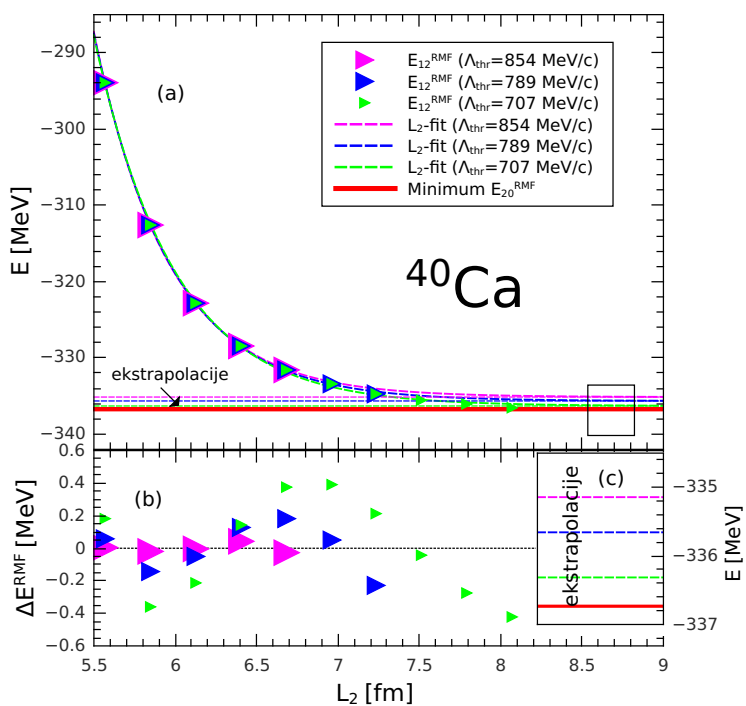
Za jezgre malog masenog broja, kao što su ${}^4\text{He}$ i ${}^{16}\text{O}$, prilagodbe se jako dobro slažu s podacima dobivenim RMF računom. Sve točke leže na pripadnim glatkim, kontinuiranim krivuljama prilagodbi. Odstupanja su reda veličine 0.005 MeV. Ekstrapolacije za energiju osnovnog stanja i pripadni kvadrat radijusa također su u dobrom slaganju s rezultatima dobivenim uz $N = 20$ oscilatorskih ljusaka. Najbolju aproksimaciju daju ekstrapolacije uz najmanji granični impuls Λ_{thr} , tj. prilagodbe iz skupa podataka s najvećim rasponom oscilatorske baze. U slučaju ${}^4\text{He}$ odstupanja ekstrapolacija se kreću od 0.003 do 0.009 MeV u odnosu na $E_{20}^{RMF} \approx -15.155$ MeV i 0.003 do 0.02 fm^2 u odnosu na $\langle r^2 \rangle_{20}^{RMF} \approx 4.1$ fm^2 . Kod ${}^{16}\text{O}$ odstupanja su od 0.3 do 0.9 MeV u odnosu na $E_{20}^{RMF} \approx -118.2$ MeV i 0.04 do 0.08 fm^2 u odnosu na $\langle r^2 \rangle_{20}^{RMF} \approx 6.84$ fm^2 . Iz prikazanog se može zaključiti kako se predstavljeni teorijski model s (17) i (21), može uspješno primijeniti u računanju opservabli lakih jezgara.



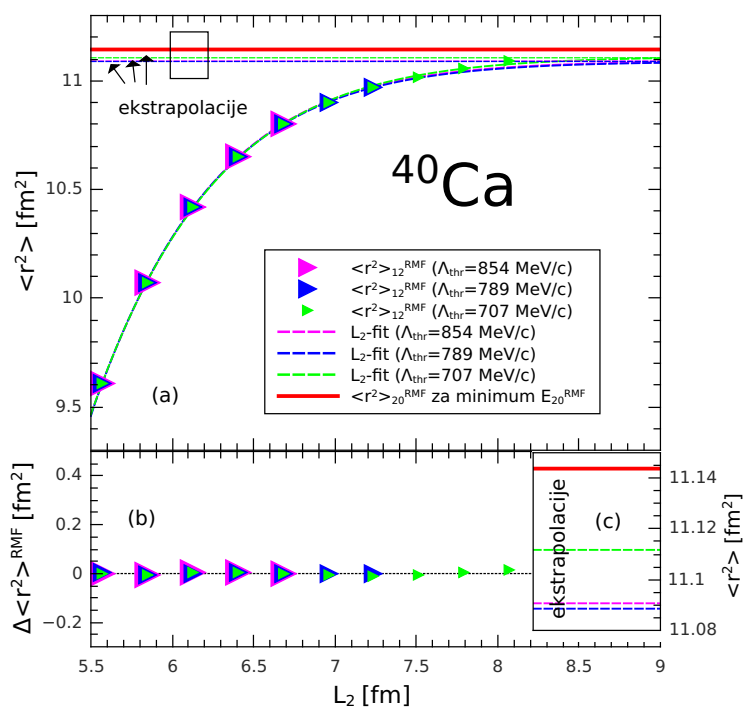
Slika 10: Rezultati računa energije osnovnog stanja jezgre ${}^{22}\text{O}$.



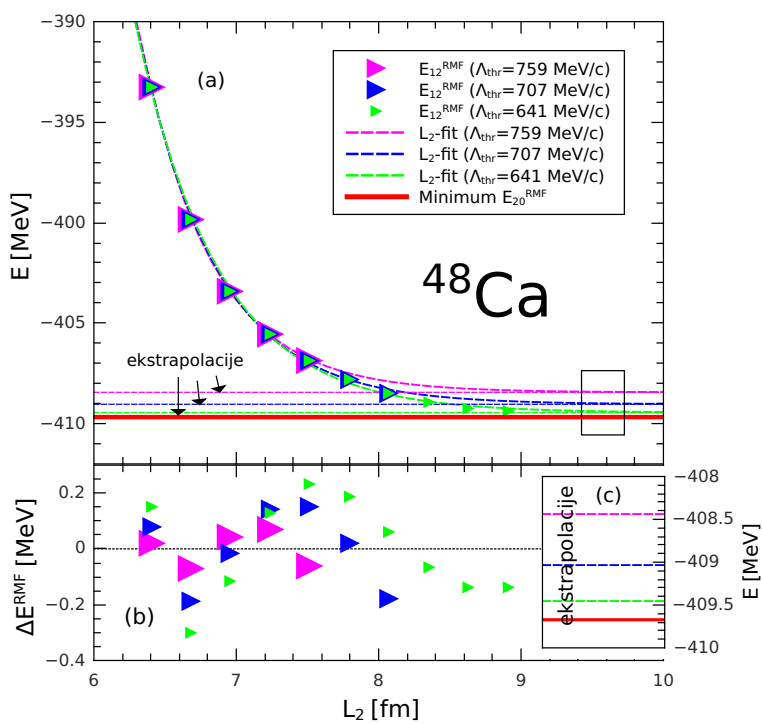
Slika 11: Rezultati računa kvadrata radijusa jezgre ^{22}O u osnovnom stanju.



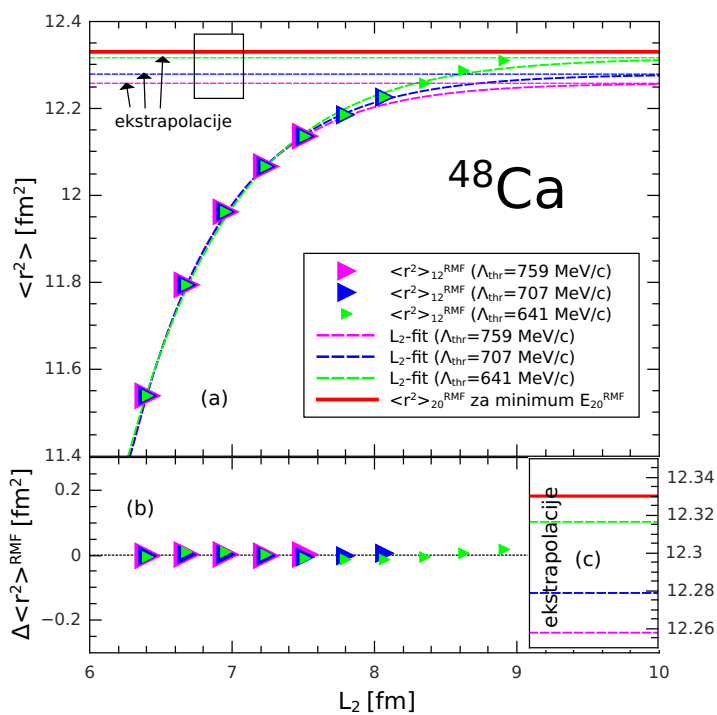
Slika 12: Rezultati računa energije osnovnog stanja jezgre ^{40}Ca .



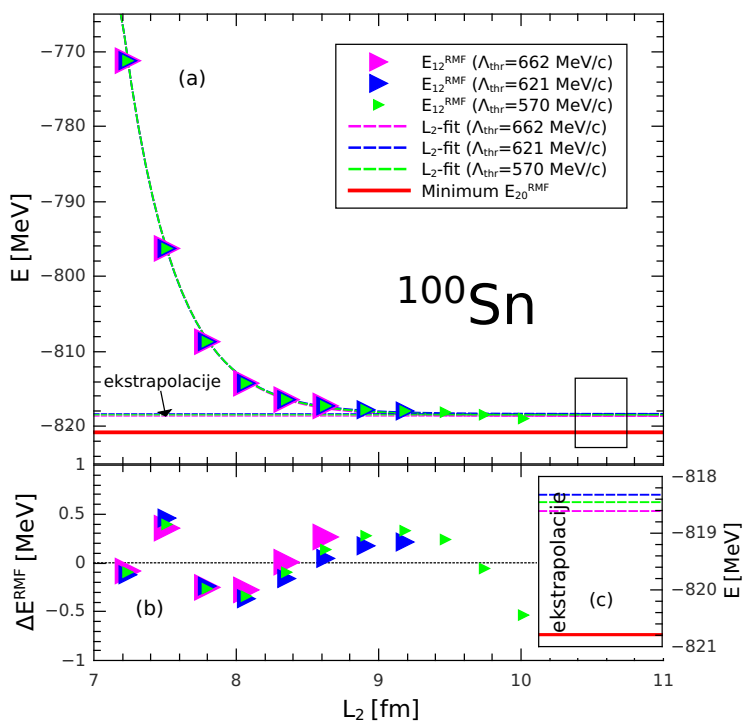
Slika 13: Rezultati računa kvadrata radijusa jezgre ^{40}Ca u osnovnom stanju.



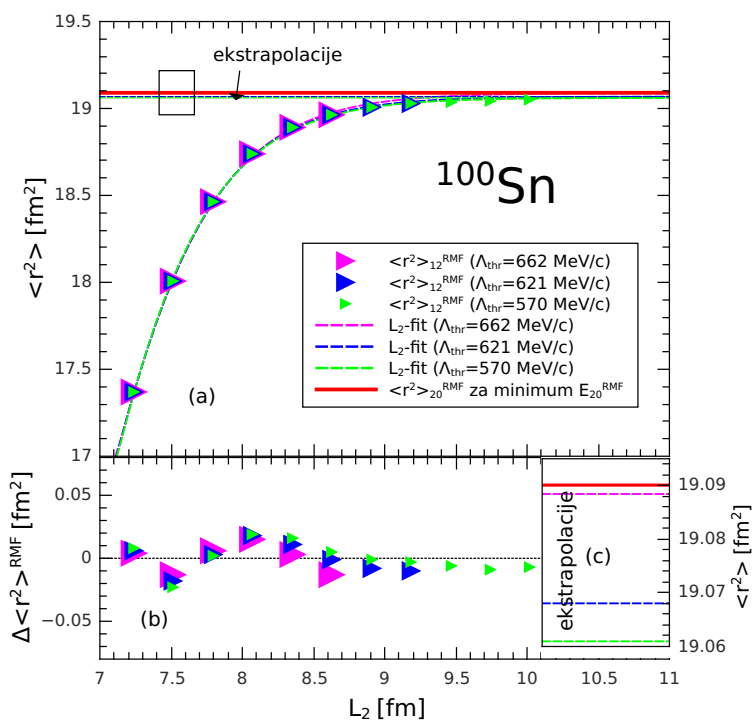
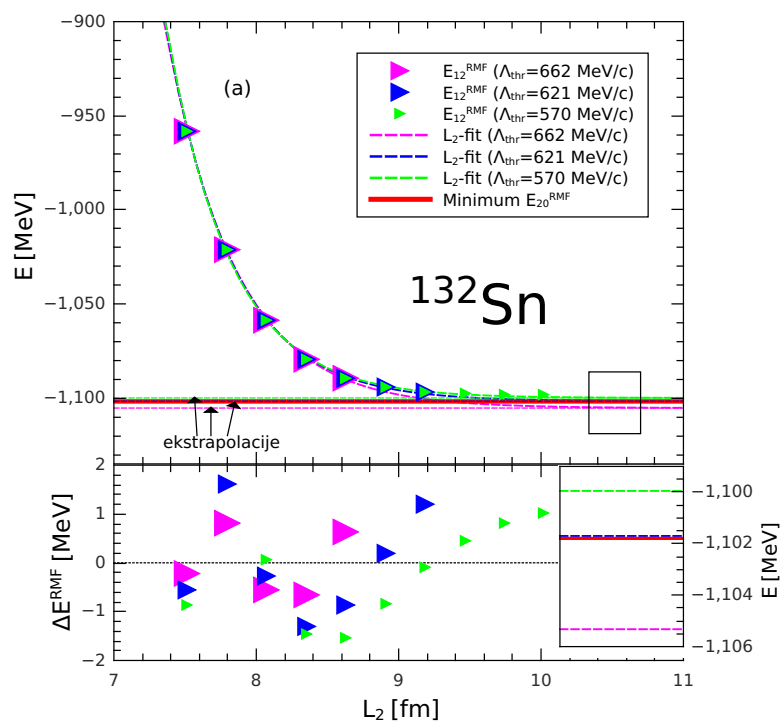
Slika 14: Rezultati računa energije osnovnog stanja jezgre ^{48}Ca .

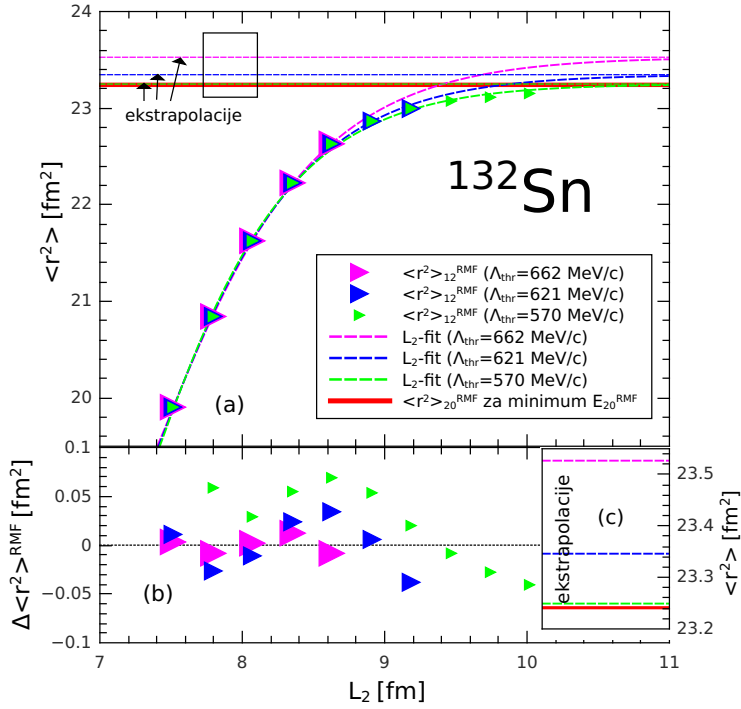


Slika 15: Rezultati računa kvadrata radijusa jezgre ^{48}Ca u osnovnom stanju.



Slika 16: Rezultati računa energije osnovnog stanja jezgre ^{100}Sn .

Slika 17: Rezultati kvadrata radijusa jezgre ^{100}Sn u osnovnom stanju.Slika 18: Rezultati računa energije osnovnog stanja jezgre ^{132}Sn .



Slika 19: Rezultati računa kvadrata radijusa jezgre ^{132}Sn u osnovnom stanju.

Za teže jezgre prilagodbe i dalje dobro prate ovisnost numerički dobivenih vrijednosti, iako su odstupanja ponešto veća. Odstupanja su najizraženija pri računu energija ^{100}Sn i ^{132}Sn , najtežih promatranih jezgara. Odstupanja ekstrapoliranih E_∞ u odnosu na E_{20}^{RMF} se kreću do 6 MeV. Najbolju aproksimaciju minimalne vrijednosti energije osnovnog stanja i pripadnog radijusa za $N = 20$ oscilatorskih ljusaka i dalje daje prilagodba provedena na skupu s najnižim graničnim impulsom Λ_{thr} . Iznimke su najteže promatrane jezgre ^{100}Sn i ^{132}Sn , gdje najbolje aproksimacije dolaze od najvišeg promatranog graničnog impulsa (u slučaju ^{100}Sn) i srednjeg graničnog impulsa (u slučaju ^{132}Sn). Uzrok tome je možda i numerička nestabilnost pri provedbi nelinearnih prilagodbi. Naime, uključenjem ili isključenjem čak i jedne točke iz analiziranog skupa podataka, dovodi do drugačijih vrijednosti ekstrapolacija. Sličan efekt primjećen je i u radu [18]. Glavni uzrok ovom ponašanju su energijski nivoi u blizini Fermijeve plohe. Naime, vratimo li se rezultatima za Woods-Saxon potencijal prikazanima na sl. 4 vidjet ćemo da se konstanta u eksponencijalnom članu bitno razlikuje za pojedine jednočestične nivoe. Ako bi se radilo o lakoj jezgri tipa ^{16}O koja ima samo jedan nivo blizu Fermijeve plohe, onda to nije poseban problem jer ćemo kod ekstrapolacije vidjeti samo taj nivo. Međutim, ako se radi o težoj jezgri, oko Fermijeve plohe ima više nivoa koji će doprinositi u ekstrapolaciji te će stoga metoda funkcionirati slabije nego za lake jezgre. Iako bismo,

u principu, kao funkciju prilagodbe mogli koristiti neki složeniji *ansatz*, problem bi i dalje bio prisutan [18].

Vidljivo je, dakle, da se iz računa s manjim brojem oscilatorskih ljusaka ($N = 12$), odnosno iz oscilatorske baze manje konačne dimenzije, mogu uspješno ekstrapolirati vrijednosti opservabili kakve dobivamo u računima za veće oscilatorske baze ($N = 20$). Ovo se pokazalo najuspješnijim kod lakih jezgara, dok je kod težih jezgara metoda nešto manje uspješna. Primjetno je da se bolje ekstrapolacije dobivaju za veći raspon oscilatorske baze, definiran preko L_2 i graničnog impulsa Λ_{thr} .

IV. ZAKLJUČAK

Nedostatak metode rješavanja Schrödingerove jednadžbe razvojem valne funkcije u bazi svojstvenih stanja potencijala harmoničkog oscilatora je ovisnost rezultata o korištenoj dimenziji baze i/ili oscilatorskoj duljini baze. Moguće rješenje ovog problema je ekstrapolacija rezultata dobijenih pomoću konačne baze čime bismo mogli procijeniti potrebne korekcije pojedinih observabli [1, 2].

U ovom radu smo predloženu metodu provjerili na primjeru Schrödingerove jednadžbe s jednim stupnjem slobode, Diracove jednadžbe sa sferno-simetričnim potencijalom te samosuglasnog računa za nekoliko sferičnih atomskih jezgri. Provjere na Schrödingerovoj i Diracovoj jednadžbi su bile vrlo uspješne i u potpunosti su potvrdile rezultate dosadašnjih istraživanja [1, 2]. U slučaju samosuglasnih računa situacija je nešto kompleksnija. Za jezgre malog masenog broja, kao što su ${}^4\text{He}$ i ${}^{16}\text{O}$, dobivene ekstrapolacije za energiju osnovnog stanja i pripadni kvadrat radijusa su u dobrom slaganju s rezultatima dobivenim uz $N = 20$ oscilatorskih ljusaka. Najbolju aproksimaciju daju ekstrapolacije uz najmanji granični impuls Λ_{thr} , tj. prilagodbe iz skupa podataka s najvećim rasponom oscilatorske baze. Za srednje teške i teške jezgre kao što su ${}^{40}\text{Ca}$, ${}^{48}\text{Ca}$, ${}^{100}\text{Sn}$ i ${}^{132}\text{Sn}$, model i dalje daje jako dobro slaganje s rezultatima dobivenim uz $N = 20$ ljusaka, ali uz nešto ponešto veća odstupanja u usporedbi s lakim jezgrama. Najbolje rezultate i ovdje su dale prilagodbe iz skupa s najvećim rasponom oscilatorske baze. Također je primjećena i numerička osjetljivost na promatrani skup podataka. Najosjetljivijima su se pokazale najteže promatrane jezgre, uzrok čemu je sama činjenica da režemo razvoj u oscilatorskoj bazi te imamo utjecaj stanja u blizini Fermijeve plohe, što predstavlja određeno ograničenje ove metode za jezgre velike mase. Predložena metoda najbolje rezultate daje za lake jezgre zbog stoga bi mogla biti primjenjiva u opisu nekih vrlo lakih halo jezgri.

Dodatak A: Izvod L_2 u modelu ekstrapolacija

U ovom dodatku izvodimo analitički izraz za parametar L_2 uveden u jednadžbi (9). Izvod je preuzet iz članka [2] uz dodatna pojašnjenja.

Analitički računamo najmanju svojstvenu vrijednost κ_{min} od operatora p^2 u konačnoj oscilatorskoj bazi i vidjet ćemo da vrijedi $\kappa_{min} = \pi/L_2$. U ostatku izvoda uzimamo da je oscilatorska duljina jednaka $b = 1$. Usredotočujemo se na s valove (za koje je angularni moment $l = 0$) i razmatramo valne funkcije koje su regularne u ishodištu tj. radijalne valne funkcije su identične neparnim valnim funkcijama jednodimenzionalnog harmoničkog oscilatora.

Lokalizirana svojstvena funkcija operatora p^2 s najmanjom svojstvenom vrijednošću κ^2 je

$$\psi_\kappa(x) = \begin{cases} \sin \kappa x, & 0 \leq x \leq \frac{\pi}{\kappa} \\ 0, & x > \frac{\pi}{\kappa} \end{cases} \quad (\text{A1})$$

Za jednodimenzionalni harmonički oscilator neparne valne funkcije su:

$$\varphi_{2n+1}(x) = [\pi^{1/2} 2^{2n+1} (2n+1)!]^{-1/2} H_{2n+1}(x) e^{-x^2/2}, \quad (\text{A2})$$

energije $E = (2n + 3/2)\hbar\omega$. Ovdje je H_n Hermiteov polinom n -tog reda. Razvijemo svojstvenu funkciju (A1) u bazi neparnih funkcija harmoničkog oscilatora koje čine potpuni skup stanja za ovaj problem:

$$\psi_\kappa(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{2n+1}(\kappa) \varphi_{2n+1}(x). \quad (\text{A3})$$

Kako bismo izračunali koeficijente razvoja $c_{2n+1}(\kappa)$, promotrimo problem svojstvenih vrijednosti za operator p^2 . Imamo

$$p^2 \psi_\kappa = \kappa^2 \psi_\kappa. \quad (\text{A4})$$

Djelujemo operatorom p^2 na svojstvenu funkciju, razvijenu u oscilatorskoj bazi te iskoristimo rekursivne relacije za Hermiteove polinome. Matrica p^2 je tridijagonalna u oscilatorskoj bazi. U matričnoj reprezentaciji poredak stanja baze je $(\varphi_1, \varphi_3, \varphi_5, \dots)$. Stoga problem svojstvenih vrijednosti $p^2 - \kappa^2 = 0$ postaje skup vezanih linearnih jednadžbi. U beskonačnoj bazi svojstveni vektor $(c_1(\kappa), c_3(\kappa), c_5(\kappa), \dots)$ identički zadovoljava svaki redak problema svojstvenih vrijednosti za svaku vrijednost κ . U konačnoj bazi $(\varphi_1, \varphi_3, \varphi_5, \dots, \varphi_{2n+1})$, međutim, zadnji redak problema svojstvenih vrijednosti,

$$(2n + 3/2 - \kappa^2)c_{2n+1}(\kappa) = \frac{1}{2} \sqrt{2n} \sqrt{2n+1} c_{2n-1}(\kappa), \quad (\text{A5})$$

je ispunjen samo za određene vrijednosti κ . To je uvjet kvantizacije. Kako bismo riješili ovaj problem svojstvenih vrijednosti potrebni su nam koeficijenti razvoja $c_{2n+1}(\kappa)$ za $n \gg 1$.

Izrazimo svojstvenu funkciju (A1) kao Fourierov transformat

$$\psi_\kappa(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty dk \tilde{\psi}_\kappa(k) \sin(kx). \quad (\text{A6})$$

Uvrštavanjem (A1) i (A2) u (A3) dobivamo:

$$\sin(kx) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{2n+1}(\kappa) \varphi_{2n+1}(x) \quad (\text{A7})$$

$$\sin(kx) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{2n+1}(\kappa) \varphi_{2n+1}(x) \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^{2n+1} (2n+1)!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_{2n+1}(x) \quad (\text{A8})$$

Pomnožimo prethodnu jednadžbu s $H_{2m+1}(x)e^{-\frac{x^2}{2}}$ i integriramo od $-\infty$ do ∞ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin(kx) H_{2m+1}(x) e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_{2n+1}(\kappa) \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^{2n+1} (2n+1)!}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_{2n+1}(x) H_{2m+1}(x) dx \quad (\text{A9})$$

Iskoristimo činjenicu da $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_{2n+1}(x) H_{2m+1}(x) dx = \sqrt{\pi} 2^{2n+1} (2n+1)! \delta_{nm}$:

$$c_{2m+1}(\kappa) \sqrt{\sqrt{\pi} 2^{2m+1} (2m+1)!} = \int_{-\infty}^{\infty} \sin(kx) H_{2m+1}(x) e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (\text{A10})$$

Kako bismo dobili vrijednosti c_{2m+1} pogledajmo sljedeći integral [19]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) dx = \sqrt{2\pi} e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y) i^n \quad (\text{A11})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \cos(xy) e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) dx + i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(xy) e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) dx \quad (\text{A12})$$

Integral s \cos iščezava za neparne n , dok integral sa \sin samo u tom slučaju preživi:

$$i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(xy) e^{-\frac{x^2}{2}} H_{2n+1}(x) dx = \sqrt{2\pi} e^{-\frac{y^2}{2}} H_{2n+1}(y) i^{2n+1} \quad (\text{A13})$$

Dobivamo za c_{2m+1} :

$$c_{2m+1}(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^{2m+1} (2m+1)!}} \sqrt{2\pi} (-1)^m e^{-\frac{k^2}{2}} H_{2m+1}(k) \quad (\text{A14})$$

$$c_{2m+1}(\kappa) = \sqrt{2\pi} (-1)^m \varphi_{2m+1}(k) \quad (\text{A15})$$

Uvrštenjem (A15) u (A3) dobivamo razvoj sinusa preko oscilatorskih valnih funkcija:

$$\sin(kx) = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{2\pi} (-1)^n \varphi_{2n+1}(x) \varphi_{2n+1}(k). \quad (\text{A16})$$

Koeficijenti razvoja iz jednadžbe (A3), izraženi preko Fourierovog transformata $\tilde{\psi}_\kappa(k)$, su

$$c_{2n+1}(\kappa) = (-1)^n \int_0^\infty dk \tilde{\psi}_\kappa(k) \varphi_{2n+1}(k). \quad (\text{A17})$$

Trebamo izraz za $c_{2n+1}(\kappa)$ za $n \gg 1$ pa koristimo asimptotski razvoj Hermiteovog polinoma:

$$\varphi_{2n+1}(k) \approx \frac{(-1)^n \sqrt{2} (2n-1)!!}{\pi^{1/4} \sqrt{(2n)!}} \sin(\sqrt{4n+3}k), \quad (\text{A18})$$

koji vrijedi za $|k| \ll \sqrt{2n}$ [19]. Koristeći ovu aproksimaciju i Fourierov transformat, imamo

$$\begin{aligned} c_{2n+1}(\kappa) &\approx \pi^{1/4} \frac{(2n-1)!!}{\sqrt{(2n)!}} \psi_\kappa(\sqrt{4n+3}) \\ &= \pi^{1/4} \frac{(2n-1)!!}{\sqrt{(2n)!}} \sin(\sqrt{4n+3}\kappa), \end{aligned} \quad (\text{A19})$$

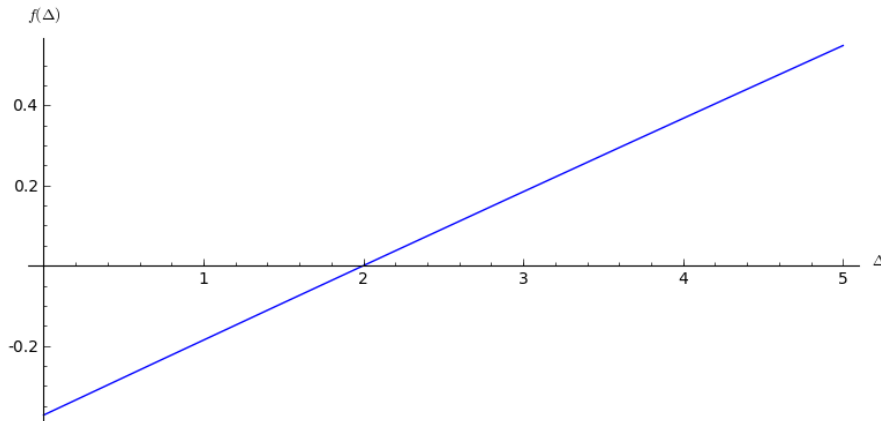
uz $\kappa \leq \pi/\sqrt{4n+3}$ zbog jednadžbe (A1).

Vratimo se rješenju uvjeta kvantizacije (A5). Napravimo ansatz

$$\kappa = \frac{\pi}{\sqrt{4n+3+2\Delta}}, \quad (\text{A20})$$

te moramo pretpostaviti $\Delta > 0$. Motivacija iza ovog ansatza jest činjenica da uvrštavanje prvotne, jednostavne poluklasične procjene $\kappa = \pi/L_0$ daje $\Delta = 0$. Uvrstimo koeficijente razvoja (A19) u uvjet kvantizacije (A5) i promotrimo njenu aproksimaciju u prvom redu za $n \gg 1$ i $n \gg \Delta$. To daje kao rješenje

$$\Delta = 2. \quad (\text{A21})$$



Slika 20: Ovisnost razlike lijeve i desne strane uvjeta kvantizacije (A5) $f(\Delta)$ o Δ . Dobiveno je rješenje $\Delta = 2$.

Problem se može i grafički riješiti. Na slici 20 je prikazana ovisnost razlike lijeve i desne strane jednažbe (A5), uz relacije (A19) i A20, u ovisnosti o Δ za $n \gg$. Dobiveno rješenje je $\Delta = 2$. Rezanje baze na φ_{2n+1} odgovara maksimalnoj energiji $E = (2n + 3/2)\hbar\omega$ iz čega vidimo da mora vrijediti $N = 2n$. Stoga je $\kappa_{min} = \pi/L_2$ najniži impuls u konačnoj oscilatorskoj bazi s $n \gg 1$ stanja baze.

Dodatak B: Razvoj u bazi harmoničkog oscilatora

U sfernosimetričnom slučaju Diracova jednadžba (35) se rješava razvojem spinora u bazi svojstvenih stanja sfernog harmoničkog oscilatora. Za sustave sferne simetrije, kakav imamo u radu, koristimo sferne koordinate:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta. \quad (\text{B1})$$

Gustoće nukleona i mezonska polja ovise samo o radijalnoj koordinati r . Spinor karakterizira angularni moment j_i , njegova projekcija m_i , paritet π_i i izospinska projekcija $t_i = \pm 1/2$ za neutrone i protone respektivno

$$\psi_i(\mathbf{r}, s, t) = \begin{pmatrix} f_i(r)\Phi_{l_i j_i m_i}(\theta, \phi, s) \\ i g_i(r)\Phi_{\tilde{l}_i j_i m_i}(\theta, \phi, s) \end{pmatrix} \chi_{t_i}(t). \quad (\text{B2})$$

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

$$l = j \pm \frac{1}{2}, \quad \tilde{l} = j \mp \frac{1}{2}, \quad \pi = (-)^{j \pm \frac{1}{2}}, \quad \kappa = \pm(j + \frac{1}{2}). \quad (\text{B3})$$

χ_{t_i} označava izospinsku valnu funkciju, a $\Phi_{l_j m}$ je dvodimenzionalni spinor s kvantnim brojevima angularnog momenta $l_j m$

$$\Phi_{l_j m}(\theta, \phi, s) = [\chi_{1/2}(s) \otimes Y_l(\theta, \phi)]_{j m} \quad (\text{B4})$$

gdje su $Y_l(\theta, \phi)$ kugline funkcije.

U principu bi se trebalo uzeti potpunu bazu, no u praktičnim računima ona je odrezana nakon konačnog broja glavnih oscilatorskih ljsaka, N_{max} . Razvijamo velike i male komponente Diracovog spinora (B2), $f_i(r)$ i $g_i(r)$, preko radijalnih funkcija $R_{nl}(r)$ sfernog harmoničkog oscilatora s oscilatorskom frekvencijom $\hbar\omega_0$ i odgovarajućom oscilatorskom duljinom $b_0 = \sqrt{\hbar/M\omega_0}$, gdje je M masa nukleona,

$$f_i = \sum_{n=1}^{n_{max}} f_n^{(i)} R_{nl_i}(r), \quad g_i = \sum_{\tilde{n}=1}^{\tilde{n}_{max}} g_{\tilde{n}}^{(i)} R_{\tilde{n}l}(r), \quad (\text{B5})$$

gdje su kvantni brojevi orbitalnog angularnog momenta l_i i \tilde{l}_i definirani u jednadžbi (B3). Radijalna funkcija je

$$R_{nl} = \frac{N_{nl}}{\sqrt{b_0}} \xi^l L_n^{l+1/2}(\xi^2) e^{-\xi^2/2}, \quad (\text{B6})$$

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

$$N_{nl} = \sqrt{2n!/(l+n+1/2)!}. \quad (\text{B7})$$

Gornje granice n_{max} i \tilde{n}_{max} u jednadžbi (B5) su radijalni kvantni brojevi i određeni su odgovarajućim brojem oscilatorske ljuske $N_{max} = 2n_{max} + l_i$ i $\tilde{N}_{max} = 2\tilde{n}_{max} + \tilde{l}_i$. Male komponente se razvijaju do $\tilde{N}_{max} = N_{max} + 1$ kako bi se izbjegli prividni doprinosi rješenju Diracove jednadžbe [17, 20].

-
- [1] R. J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, *Corrections to nuclear energies and radii in finite oscillator spaces*, Phys. Rev. C 86, 031301(R) (2012).
 - [2] S. N. More, A. Ekström, R. J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, *Universal properties of infrared oscillator basis extrapolations*, Phys. Rev. C 87, 044326 (2013).
 - [3] R. J. Furnstahl, S. N. More, T. Papenbrock, *Systematic expansion for infrared oscillator basis extrapolations*, Phys. Rev. C 89, 044301 (2014).
 - [4] S. König, S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, S. N. More, T. Papenbrock, *Ultraviolet extrapolations in finite oscillator bases*, Phys. Rev. C 90, 064007 (2014).
 - [5] D. Djajaputra, B. R. Cooper, Eur. J. Phys. 21, 261 (2000).
 - [6] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
 - [7] W. Kohn, Rev. Mod. Phys. 71, 1253 (1999).
 - [8] D. G. Madland, B. A. Nikolaus, T. Hoch, Phys. Rev. C 46, 1757 (1992).
 - [9] T. Hoch, D. Madland, P. Manakos, T. Mannel, B. A. Nikolaus, D. Storrman, Phys. Rep. 242, 253 (1994).
 - [10] J. L. Friar, D. G. Madland, B. W. Lynn, Phys. Rev. C 53, 3085 (1996).
 - [11] J. J. Rusnak, R. J. Furnstahl, Nucl. Phys. A 627, 495 (1997).
 - [12] T. Bürvenich, D. G. Madland, J. A. Maruhn, P. G. Reinhard, Phys. Rev. C 65, 044308 (2002).
 - [13] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, *Relativistic nuclear energy density functionals: Adjusting parameters to binding energies*, Phys. Rev. C 78, 034318 (2008).
 - [14] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, *Relativistic Nuclear Energy Density Functionals: Mean-Field and Beyond*, Prog. Part. Nucl. Phys. 66, 519 (2011).

- [15] G. Ripka, J. P. Blaizot, *Quantum Theory of Finite Systems*, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, 2nd Edition, 1994.
- [16] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, P. Ring, *DIRHB—A relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei*, Comput. Phys. Commun. (2014).
- [17] Y. K. Gambhir, P. Ring, A. Thimet, *Annals Of Physics* 198, 132-179 (1990).
- [18] A. Arzhanov, *Gogny-Hartree-Fock-Bogolyubov nuclear mass models with application to r-process stellar nucleosynthesis* (Master's thesis), Royal Institute of Technology Stockholm, 2013.
- [19] L. S. Gradshteyn, L. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series, and Products*, 6th ed. (Academic Press, San Diego, 2000).
- [20] P. Ring, Y. Gambhir, G. Lalazissis, *Comp. Phys. Comm.* 105, 77 (1997).