



Sveučilište u Zagrebu

PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Deni Vale

**KOLEKTIVNA NUKLEARNA
POBUĐENJA U RELATIVISTIČKOJ
DRUGOJ APROKSIMACIJI SLUČAJNIH
FAZA**

DOKTORSKI RAD

Zagreb, 2026.



Sveučilište u Zagrebu

PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Deni Vale

**KOLEKTIVNA NUKLEARNA
POBUĐENJA U RELATIVISTIČKOJ
DRUGOJ APROKSIMACIJI SLUČAJNIH
FAZA**

DOKTORSKI RAD

Mentor:
prof. dr. sc. Nils Paar

Zagreb, 2026.



University of Zagreb

FACULTY OF SCIENCE

Deni Vale

**COLLECTIVE NUCLEAR EXCITATIONS
IN THE RELATIVISTIC SECOND
RANDOM PHASE APPROXIMATION**

DOCTORAL DISSERTATION

Supervisor:
Professor Nils Paar, PhD

Zagreb, 2026.

Sadržaj

1	UVOD	1
1.1	Pregled dosadašnjih istraživanja	1
1.2	Cilj i hipoteze istraživanja	4
1.3	Metodologija i plan istraživanja	5
1.3.1	Odabir adekvatnog relativističkog funkcionala gustoće	6
1.3.2	Razvoj formalizma	6
1.3.3	Primjena metoda naprednog računarstva	6
1.4	Očekivani doprinos znanstvenog istraživanja	7
2	KOLEKTIVNA POBUĐENJA U ATOMSKIM JEZGRAMA	8
2.1	Povijest proučavanja kolektivnih pobuđenja	8
2.2	Svojstva kolektivnih pobuđenja	9
2.2.1	Širina rezonancija	9
2.2.2	Pojačane vjerojatnosti prijelaza	11
2.2.3	Ovisnost energije gigantskih rezonancija o masenom broju	11
2.2.4	Koherentna struktura valne funkcije	13
2.2.5	Operatori prijelaza	14
2.3	Opis mehanizama gušenja kolektivnih pobuđenja	15
2.3.1	Dvočestični sudari	15
2.3.2	Landauovo gušenje i fragmentacija na $1p-1h$ kontinuumu	18
2.4	Gigantske rezonancije	19
2.4.1	Gigantska monopolna rezonancija	19
2.4.2	Gigantska dipolna rezonancija	22
2.4.3	Gigantska kvadrupolna rezonancija	26
2.5	Pravila sume	29
3	NUKLEARNI ENERGIJSKI FUNKCIONALI GUSTOĆE	31
3.1	Od Hohenberg-Kohnovih do Kohn-Shamovog formalizma	31
3.1.1	Prvi Hohenberg-Kohnov teorem	31
3.1.2	Drugi Hohenberg-Kohnov teorem	33
3.1.3	Kohn-Shamov formalizam	35
3.2	Nuklearni relativistički energijski funkcionali gustoće	36
3.3	Energijski funkcionali gustoće s izmjenom mezonskih polja	38
3.4	Kontaktne energijski funkcionali gustoće	42
3.4.1	DD-PC1 parametrizacija	44
3.4.2	DD-PCX parametrizacija	47

4	APROKSIMACIJA SLUČAJNE FAZE	49
4.1	Standardna RPA	49
4.1.1	Nerelativistički oblik	49
4.1.2	Relativistički oblik	54
4.2	Thoulessov teorem	56
4.2.1	Osnovni teorem	56
4.2.2	Relativističko proširenje teorema	57
4.3	Vremenski ovisni varijacijski princip	59
4.4	Relativistička matrica gustoće	61
4.5	Opći izrazi za elemente RSRPA matrice	63
4.6	EksPLICITNI izrazi matričnih elemenata za DD-PC1 i DD-PCX funkcionalne	67
4.7	Vezani matrični elementi	74
4.8	Metoda suptrakcije u proširenim RPA pristupima	76
4.8.1	Metoda suptrakcije u okviru teorije energijskih funkcionala gustoće	76
4.8.2	Primjena metode suptrakcije u (R)SRPA	77
4.9	Snaga prijelaza i norma stanja	79
4.10	Relativistička druga Tamm-Dancoff aproksimacija	81
5	REZULTATI DRUGE TAMM-DANCOFF APROKSIMACIJE	83
5.1	Raspodjela snage prijelaza za ISGMR	83
5.2	Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacij- skog pravila za ISGMR	85
5.3	Raspodjela snage prijelaza za IVGMR	88
5.4	Raspodjela snage prijelaza za ISGQR	89
5.5	Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacij- skog pravila za ISGQR	92
5.6	Raspodjela snage prijelaza za IVGQR	94
5.7	Kumulativna snaga GMR i GQR prijelaza	96
5.8	Mikroskopska razlika između RTDA, RSTDA i RSSTDA	98
5.9	Mikroskopska razlika između pune forme i dijagonalne aproksimacije u RSTDA i RSSTDA	103
5.10	Mikroskopski opis niskoležećih stanja	107
6	REZULTATI DRUGE APROKSIMACIJE SLUČAJNIH FAZA	109
6.1	Raspodjela prijelazne snage za ISGMR	109
6.2	Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacij- skog pravila za ISGMR	112
6.3	Raspodjela prijelazne snage za IVGMR	115
6.4	Raspodjela prijelazne snage za ISGQR	116

6.5	Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacij- skog pravila za ISGQR	118
6.6	Raspodjela prijelazne snage za IVGQR	121
6.7	Kumulativna snaga GMR i GQR prijelaza	123
6.8	Mikroskopska razlika između RSRPA i RSSRPA	125
6.9	Mikroskopska razlika između potpunog i dijagonalnog oblika RSRPA	130
6.10	Mikroskopski opis niskoležećih stanja	134
6.11	Raspodjela prijelazne snage za IVGDR	136
6.11.1	Slučaj $N = 14$	136
6.11.2	Slučaj $N = 20$	138
6.12	Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacij- skog pravila za IVGDR	140
6.13	Spuriozno stanje u slučaju GDR	142
6.14	Evolucija niskoležećih stanja u slučaju GMR-a i GQR-a	144
7	USPOREDNA ANALIZA I DISKUSIJA	147
7.1	Usporedba energijskih spektara	147
7.2	Položaji niskoležećih stanja	148
7.3	Križna analiza momenata distribucije	150
7.3.1	Usporedba momenata m_0 , m_{-1} i m_1 za ISGMR	150
7.3.2	Usporedba centroida energije za ISGMR	152
7.3.3	Usporedba momenata m_0 , m_{-1} i m_1 za ISGQR	153
7.3.4	Usporedba centroida energije za ISGQR	156
7.3.5	Odabir odgovarajućeg funkcionala	157
7.4	Problem jednostavnog (nekoreliranog) osnovnog stanja	158
7.5	Metodološka ograničenja	159
8	ZAKLJUČAK	161

Zahvala

Posebnu i najveću zahvalu dugujem svojim roditeljima i sestri, a posebice majci. Hvala vam na neizmjerljivoj ljubavi, strpljenju i nesebičnoj potpori koju ste mi pružali tijekom cijelog procesa, od upisa na doktorski studij, preko izazovnih trenutaka provođenja istraživanja, pa sve do samog završetka ovog rada. Bez vašeg razumijevanja i vjere u mene, postizanje ovog cilja i stjecanje titule doktora znanosti ne bi bilo moguće. Vi ste moj najčvršći oslonac i ovaj je uspjeh jednako vaš koliko i moj.

Iskrenu zahvalnost upućujem svom mentoru, prof. dr. sc. Nils Paar. Zahvaljujem Vam na stručnom vodstvu, poticajnim raspravama i konstruktivnim kritikama koje su usmjeravale moj rad. Vaše znanje i iskustvo bili su mi neprocjenjiv putokaz tijekom cijelog istraživačkog procesa. Također, zahvaljujem svim profesorima i djelatnicima Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu koji su mi omogućili stjecanje potrebnih znanja i vještina. Hvala vam na prenošenju stručnosti i stvaranju okruženja u kojem je bilo moguće rasti i razvijati se u znanstvenom smislu. Posebnu zahvalnost dugujem prof. dr. sc. Tamari Nikšić i akademiku Dariju Vretenaru na dragocjenim diskusijama tijekom cjelokupnog istraživačkog procesa. Njihovi savjeti i smjernice pri izradi *toy* modela bili su od presudne važnosti te su mi omogućili temeljito razumijevanje problematike i pružili nužnu osnovu za kasniji razvoj i implementaciju cjelovitog relativističkog formalizma druge aproksimacije slučajnih faza. Posebnu zahvalnost dugujem inozemnim kolegama i suradnicima čija je stručnost bila ključna u razvoju teorijskog formalizma i numeričke implementacije modela ovog rada. Zahvaljujem Danilu Gambacurti, PhD, na osnovnim smjernicama pri izradi numeričkog modela tijekom mog boravka u istraživačkom centru Extreme Light Infrastructure - Nuclear Physics u Bukureštu. Veliku zahvalnost dugujem Panagioti Papakonstantinou, PhD (Institute of Basic Science, Daejeon), na pomoći pri izvođenju članova preraspodjele i detaljnim diskusijama o matričnim elementima dvočestičnog međudjelovanja. Također, zahvaljujem Yifei Niu, PhD, na preciznoj provjeri izvoda i numeričkog modela proton-neutron nadogradnje standardne aproksimacije slučajnih faza. Iskreno zahvaljujem prof. Janu Kvasilu, PhD, s Karlovog sveučilišta u Pragu na iznimno korisnim raspravama o energijskom spektru pobuđenja i usporedbama s nerelativističkim modelima, koje su značajno obogatile moju interpretaciju rezultata tijekom nekoliko posjeta Češkoj Republici. Pored spomenutog, veliku zahvalnost dugujem Antonu Repku, PhD, sa Slovačke akademije znanosti u Bratislavi, na iscrpnim diskusijama o drugoj aproksimaciji slučajnih faza, dobivenim energijskim spektrima atomskih jezgara i numeričkim metodama. Posebno mu zahvaljujem na velikodušnoj donaciji računalnih resursa, odnosno dodatne radne memorije i procesora za poslužitelje, što je značajno ubrzalo izvođenje zahtjevnih numeričkih proračuna.

Na kraju, hvala i svim kolegama, ostalim članovima obitelji i prijateljima koji su na bilo koji način pridonijeli nastanku ovog rada ili mi bili podrška u trenucima kada je to bilo najpotrebnije.

Informacije o mentoru

Prof. dr. sc. Nils Paar je redoviti profesor u trajnom izboru na Fizičkom odsjeku Sveučilišta u Zagrebu Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (PMF). Diplomirao je na istraživačkom smjeru studija fizike na PMF-u 1998. godine. Od 2000. do 2003. godine bio je doktorand na Physik Department, Technische Universität München, Njemačka, gdje je 2003. godine obranio doktorsku disertaciju iz teorijske nuklearne fizike i stekao akademski naziv *Doctor rerum naturalium*. Od 2003. do 2006. godine bio je na poslijedoktorskom usavršavanju na Institut fuer Kernphysik, Technische Universität Darmstadt, Njemačka. Nakon povratka u Hrvatsku, radi kao docent (do 2008.), izvanredni profesor (do 2013) i redoviti profesor (do danas) na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu. Akademsku godinu 2014./2015. provodi kao *Marie Curie research fellow* na Departement Physik, Universität Basel, Švicarska. 2019. godine izabran je u znanstveno-nastavno zvanje redovitog profesora u trajnom izboru. Većina dosadašnje znanstvene djelatnosti prof. Paara jest iz područja prirodnih znanosti, polja fizike, grane nuklearne fizike, što uključuje razvoj i primjenu mikroskopskih teorijskih modela u rješavanju problema moderne nuklearne fizike, posebice (1) nelinearne pojave u vibracijama atomske jezgre, (2) egzotična pobuđenja u nestabilnim atomskim jezgrama, (3) nuklearnu strukturu zasnovanu na koreliranom nukleon-nukleon međudjelovanju, (4) procese slabog međudjelovanja u evoluciji supernove, (5) neutrino-jezgra međudjelovanje i (6) energiju simetrije i svojstva neutronske zvijezde. Autor je i koautor 150 znanstvenih publikacija, od toga 106 izvornih znanstvenih radova objavljenih u međunarodnim recenziranim znanstvenim časopisima, 44 publikacija u recenziranim zbornicima međunarodnih konferencija i jednog poglavlja u znanstvenoj knjizi. Objavljeni radovi citirani su više od 5000 puta prema bazi ISI Web of Science Core Collection. Aktivno je sudjelovao na međunarodnim znanstvenim konferencijama, radionicama i školama gdje je održao ukupno 74 predavanja, od toga 40 pozvanih predavanja. Bio je voditelj niza kompetitivnih znanstveno-istraživačkih projekata, i suradnik je u okviru Znanstvenog centra izvrsnosti za kvantne i kompleksne sustave te reprezentacije Liejevih algebri na Fizičkom odsjeku PMF-a. Mentor je brojnim studentima na diplomskim studijima fizike, doktorskom studiju fizike, kao i poslijedoktorandima i gostujućim znanstvenicima iz inozemstva. Dobitnik je državne nagrade za znanost za značajno znanstveno dostignuće iz fizike za 2017. godinu.

Sažetak

Teorijski opis kolektivnih nuklearnih pobuđenja u jezgrama, kao i niza astrofizički značajnih procesa koji uključuju pobuđena stanja jezgri još uvijek je velikim dijelom temeljen na aproksimaciji slučajnih faza (RPA) koja je zasnovana na jednostavnim konfiguracijama oblika 1 čestica–1 šupljina (1p–1h). Kako bi se omogućila realistična usporedba teorijskih predviđanja s eksperimentalnim rezultatima, potrebno je opisati fragmentaciju spektra pobuđenih stanja uvođenjem vezanja s kompleksnim konfiguracijama. Iako je tzv. druga aproksimacija slučajnih faza (SRPA), dobivena uključivanjem konfiguracija oblika 2 čestice–2 šupljine (2p–2h), uvedena sredinom XX. stoljeća, zbog velikih numeričkih zahtjeva, njezina praktična primjena je bila znatno ograničena. Aktualni razvoj modernih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće i nove mogućnosti primjene naprednih numeričkih metoda otvorile su novu perspektivu razvoja i primjene SRPA.

U okviru ovog rada izrađen je SRPA model zasnovan na relativističkom nuklearnom energijskom funkcionalu gustoće s kontaktnim međudjelovanjem između nukleona (RSRPA), i numerička implementacija modela. Konzistentnost s opisom osnovnog stanja na razini srednjeg polja postignuta je uvođenjem metode suptrakcije, čime je eliminirana redundancija u korelacijskim doprinosima unutar rezidualne interakcije. Validacija RSRPA pristupa provedena je na primjeru pobuđenja gigantskih monopolnih, dipolnih i kvadrupolnih rezonancija za jezgru ^{16}O . U fokusu istraživanja su prijelazne snage gigantskih rezonancija, analiza dobivenih spektara pobuđenja, uključujući centroide energije, širine i ispunjenosti sumacijskih pravila, te njihova usporedba s provedenim eksperimentima i drugim teorijskim modelima.

Rezultati potvrđuju da su 2p–2h konfiguracije ključne za opis fragmentacije spektra pobuđenih stanja, pomicanje centroida energije prema nižim energijama i povećanje širine, dok metoda suptrakcije osigurava numeričku i fizikalnu stabilnost rješenja. Provedena analiza pokazuje značajno bolje slaganje s eksperimentalnim podacima u usporedbi sa standardnom RPA i Tamm-Dancoff aproksimacijom. Također, dobiveni rezultati su kvalitativno i kvantitativno slični nerelativističkim modelima koji uključuju 2p–2h konfiguracije, čime se dodatno potvrđuje pouzdanost i preciznost razvijenog relativističkog teorijskog pristupa. Dobiveni rezultati otvaraju prostor za daljnji razvoj prema kvazičestičnoj varijanti modela s kompleksnim konfiguracijama, uz poboljšanje energijskih funkcionala gustoće i uključivanje kompleksnijih korelacija osnovnog stanja.

Ključne riječi: kolektivna pobuđenja u atomskim jezgrama, relativistički nuklearni energijski funkcionali gustoće, gigantske rezonancije, druga aproksimacija slučajnih faza, druga Tamm-Dancoff aproksimacija

Abstract

Theoretical description of collective nuclear excitations, as well as a number of astrophysically significant processes involving excited nuclear states, is still largely based on the random phase approximation (RPA), which is founded on simple 1 particle–1 hole (1p–1h) configurations. To enable a realistic comparison between theoretical predictions and experimental results, it is necessary to describe the fragmentation of the excitation spectrum by introducing couplings with complex configurations. Although the so-called second random phase approximation (SRPA), obtained by including 2 particle–2 hole (2p–2h) configurations, was introduced in the mid-20th century, its practical application remained significantly limited due to heavy numerical requirements. The current development of modern nuclear energy density functionals and possibilities in the application of advanced numerical methods have opened a new perspective for the development and application of SRPA.

Within this thesis, the SRPA model based on a relativistic nuclear energy density functional with contact nucleon-nucleon interaction (RSRPA) was developed, along with its numerical implementation. Consistency with the description of the ground state through mean-field approach was achieved by implementing a subtraction method, which eliminates redundancy in correlation contributions within the residual interaction. The validation of the RSRPA approach was performed on the example of giant monopole, dipole, and quadrupole resonance excitations in nucleus ^{16}O . The focus of the research is on the transition strengths of giant resonances and the analysis of the obtained excitation spectra, including centroid energies, widths, and sum rule exhaustion, as well as their comparison with experimental data and other theoretical models.

The results confirm that 2p–2h configurations are crucial for reproducing the fragmentation of the excitation spectrum, shifting the centroid energy toward lower energies, and increasing the width, while the subtraction method ensures numerical and physical stability of the solutions. The conducted analysis shows significantly better agreement with experimental data compared to the standard RPA and the Tamm-Dancoff approximation. Furthermore, the obtained results are qualitatively and quantitatively similar to non-relativistic models that include 2p–2h configurations, thereby confirming the reliability and precision of the developed relativistic theoretical approach. The obtained results open the way for further development towards quasiparticle variant of the model including complex configurations, together with improvement of energy density functionals and inclusion of more complex ground state correlations.

Keywords: collective excitations in atomic nuclei, relativistic nuclear energy density functionals, giant resonances, second random phase approximation, second Tamm-Dancoff approximation

1 UVOD

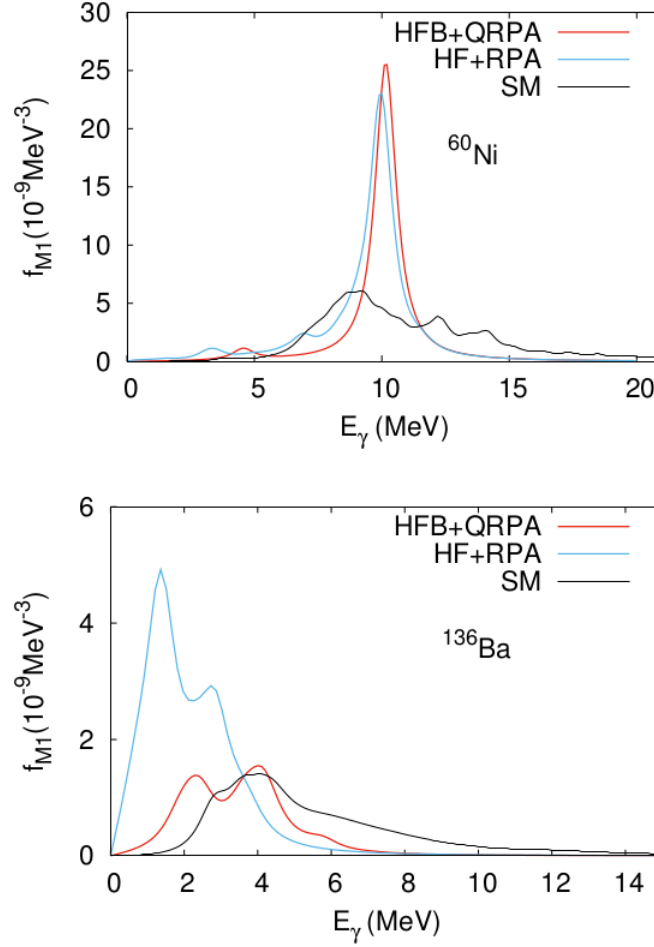
1.1 Pregled dosadašnjih istraživanja

Jedan od značajnih izazova u nuklearnoj fizici jest razvijanje preciznog teorijskog opisa kolektivnih multipolnih pobuđenja, poput gigantskih rezonancija, koje se eksperimentalno proučavaju već desetljećima [1–39]. Takva pobuđenja sadrže informacije o kompresibilnosti nuklearne materije, površinskim svojstvima i raspodjeli mase i naboja unutar jezgre. Njihovo razumijevanje neophodno je za testiranje i kalibraciju efektivnih nuklearnih sila i energijskih funkcionala gustoće [40–52], kao i za točne proračune procesa važnih u astrofizičkim okruženjima [53, 54].

Teorija nuklearnih energijskih funkcionala gustoće omogućuje vrlo uspješan opis atomskih jezgri kroz čitav periodni sustav elemenata [55]. Temeljena na relativno jednostavnom obliku funkcionala, koji su prilagođeni na fenomenološki način prema svojstvima beskonačne nuklearne materije i nekoliko jezgara, navedena teorija omogućava prilično precizan izračun mnogih nuklearnih podataka, od energije vezanja, radijusa i drugih svojstava [45, 55]. Uz statična svojstva u okviru navedene teorije također je uspješno opisan i odziv jezgara na različita vanjska polja, što je omogućilo određivanje udarnih presjeka raznih nuklearnih reakcija s leptonima [55–61] i vremena poluživota u beta raspadima [62, 63]. Polazište teorijskih istraživanja u sklopu relativističke teorije srednjeg polja jest opis nukleona kao točkastih čestica Diracova tipa [55, 64, 65]. Međutim, za razliku od često korištenog modela gdje nukleoni međudjeluju izmjenom mezona konačne mase [43], u ovom istraživanju bit će korišten model kontaktnog međudjelovanja koji ne uzima u obzir mezonske stupnjeve slobode, već međudjelovanje nultog dosega [55, 66]. Zbog navedene bitne razlike, moraju se uključiti članovi međudjelovanja gradijentnog tipa kako bi se opisala površinska svojstva jezgre, odnosno simulirao konačni doseg međudjelovanja. Unatoč jednostavnijoj matematičkoj strukturi u odnosu na modele s izmjenom mezona, dosadašnja istraživanja pokazala su ovaj formalizam jednako uspješnim u opisu raznih strukturnih i dinamičkih svojstava jezgri [45, 67].

Aproksimacija slučajnih faza (RPA) izvorno je razvijena pedesetih godina prošlog stoljeća kao mikroskopski teorijski pristup za opis učinaka kvantno-mehaničkog međudjelovanja elektrona u materiji [68–72]. Narednih desetljeća razvijen je formalizam aproksimacije slučajnih faza u okviru teorije energijskog funkcionala gustoće, što je omogućilo njezinu sustavnu primjenu u području nuklearne fizike [55, 73–79]. Time je omogućeno istraživanje dinamičkih svojstava jezgara, kolektivnih i nekolektivnih pobuđenja, odnosno opis spektara pobuđenja i svojstava gigantskih rezonancija. Iako se RPA pokazala moćnim pristupom s prilično dobrim slaganjem s eksperimentima, postojala su određena ograničenja samog pristupa. Tijekom posljednjih desetljeća kroz razne nadogradnje samog formalizma uvedene su korelacije prisutne u mnogočestičnim sustavima.

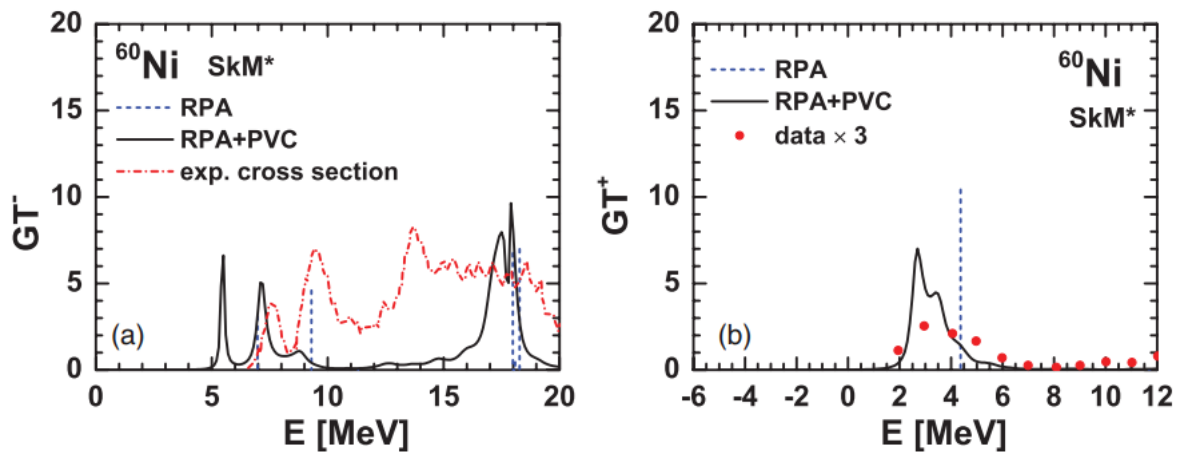
Prva prirodna nadogradnja bila je kvazičestična RPA (QRPA) [73], gdje su korelacije spari-



Slika 1.1: Usporedba raspodjele snage magnetskih M1 prijelaza u jezgrama ^{60}Ni i ^{136}Ba dobivene pomoću Hartree-Fock (HF) + RPA, Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) + QRPA i modela ljusaka (SM). Preuzeto uz dopuštenje iz [80]. Copyright (2024) by the American Physical Society.

vanja uključene definiranjem kvazičestičnih stanja i Bogoliubovom transformacijom [81, 82], što je omogućilo opis modova pobuđenja u superfluidnim jezgrama s otvorenim zadnjim ljuskama [49, 61, 80, 83–88]. Primjer izračuna snage magnetskih M1 prijelaza dobivene pomoću RPA i QRPA u jezgrama ^{60}Ni i ^{136}Ba prikazan je na slici 1.1. Najslabija točka pristupa zasnovanog na (Q)RPA je zanemarivanje efekata širine pobuđenih stanja, odnosno fragmentacije spektra koja je nužna za izravnu usporedbu teorijskih predviđanja s eksperimentalnim rezultatima. Jedna moguća varijanta proširenja modela je uključivanje vezanja dvokvazičestičnih pobuđenja na niskoležeće kolektivne vibracije, što je nedavno izvedeno uz implementaciju relativističkog energijskog funkcionala gustoće [89]. Slični modeli postoje i na temelju nerelativističkih funkcionala, te je pokazano da uključivanje složenijih konfiguracija i vezanja može rezultirati značajnim učinkom u opisu procesa slabog međudjelovanja, kao što je Gamow-Tellerova rezonancija [61, 90] ili nuklearni beta raspad [50, 91]. Primjer raspodjele snage za Gamow-Tellerov prijelaz za jezgru ^{60}Ni izračunate pomoću aproksimacije slučajnih faza s uključenim vezanjem

kolektivnih vibracija (RPA + PVC) prikazan je na slici 1.2. U tom širem kontekstu, uz navedene pristupe utemeljene na PVC shemama, razvijeno je nekoliko specifičnih modela vezanja fonona kako bi se obuhvatile korelacije izvan primarnog jednočestično-jednošupljinskog (1p–1h) prostora. Kvazičestično-fononski model (QPM) [92–94], metoda jednadžbi gibanja s fononima (EMPM) [95–97] te relativistička aproksimacija vremenskog blokiranja (RTBA) [98, 99] proširuju RPA formalizam uključivanjem višefononskih stanja te vezanja čestica i vibracija. Srodne PVC sheme, izgrađene na kvazičestičnom RPA (QRPA) formalizmu, sustavno su doprinijele izraženijoj fragmentaciji i širinama raspada [100].



Slika 1.2: Raspodjela snage za Gamow-Tellerove prijelaze izračunate pomoću RPA i RPA + PVC modela za jezgru ^{60}Ni . Preuzeto uz dopuštenje iz [90]. Copyright (2012) by the American Physical Society.

Druga mogućnost nadogradnje RPA, temeljena na kvazibozonskoj aproksimaciji, jest tzv. druga aproksimacija slučajnih faza (SRPA), u kojoj su, uz standardne konfiguracije sastavljene od jedne čestice i jedne šupljine (1p–1h), uključene i one tipa dviju čestica i dviju šupljina (2p–2h), čime se omogućuje potpuniji opis modova pobuđenja. Iako je općeniti oblik SRPA jednadžbi poznat još od osamdesetih godina prošloga stoljeća, zbog izrazito velikih numeričkih zahtjeva tek su nedavno u potpunosti i samosuglasno riješene. U ranijim su istraživanjima često bile reducirane na jednostavnije varijante, poput druge Tamm–Dancoffove aproksimacije (STDA), ili su uključivale niz dodatnih aproksimacija [101–109]. Najčešće su bile ograničene na mali konfiguracijski prostor i tzv. dijagonalnu aproksimaciju, u kojoj su se uzimale u obzir samo konfiguracije oblika 1p–1h i njihovo međudjelovanje s 2p–2h konfiguracijama, dok je međudjelovanje između samih 2p–2h stanja bilo zanemareno.

Uvođenje 2p–2h konfiguracija kod nerelativističkih je nuklearnih modela omogućilo potpuniji teorijski opis spektra pobuđenja u atomskim jezgrama, uzrokujući eventualni pomak energija pobuđenja i adekvatno tretiranje širina stanja. Prva 0^+ i 2^+ stanja u magičnim jezgrama nisu dobro reproducirana u RPA iz razloga što je potrebno uključiti konfiguracije iznad 1p–1h oblika [106–108]. Stoga, uključivanje 2p–2h konfiguracija može imati ključnu ulogu u tome. Iako su

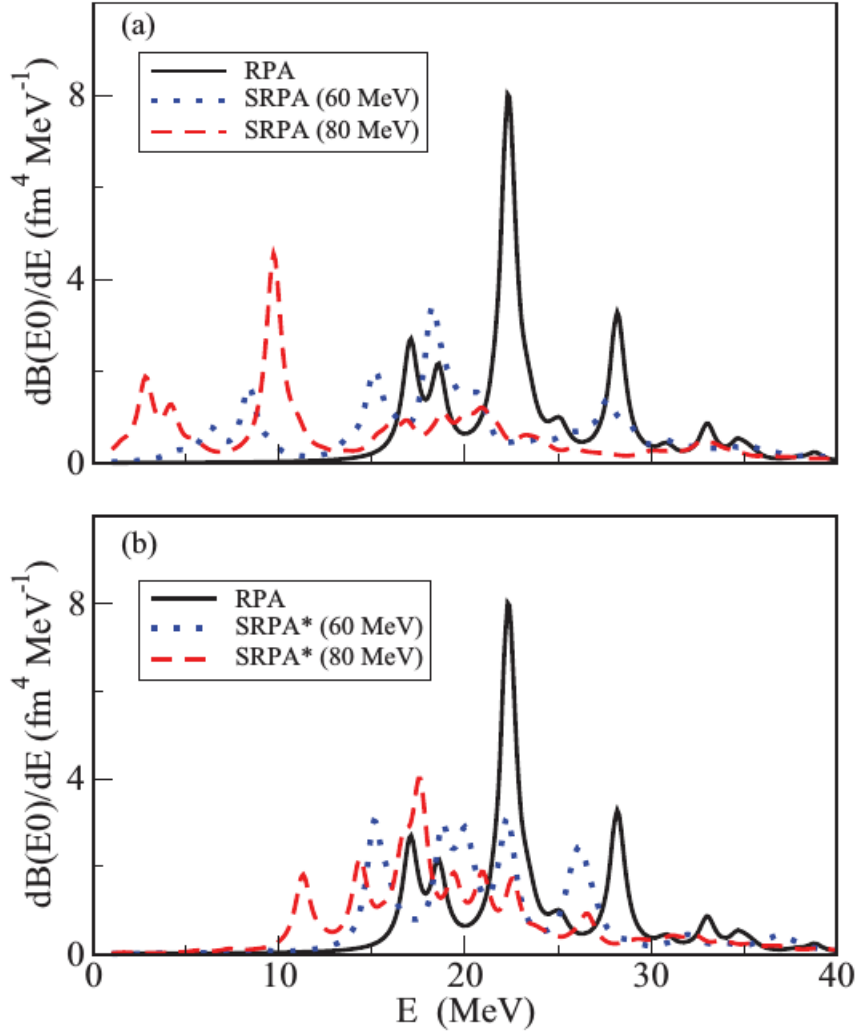
STDA i SRPA izvorno formulirane u radovima [101, 105], kasnije su proširene kroz primjenu realističnog nukleon-nukleon međudjelovanja (Argonne V18 potencijal) [110, 111], Skyrme funkcionala [112–115] te Gognyjeve efektivne interakcije [116]. Primjer nerelativističkog izračuna izoskalarnog monopolnog odziva pomoću SRPA prikazan je na slici 1.3. Zahvaljujući nedavnim teorijskim i računalnim poboljšanjima, omogućeni su iscrpni izračuni za jezgre zatvorenih ljuski poput ^{16}O i ^{40}Ca , što je rezultiralo točnijim opisom raspodjela prijelaznih snaga, fine strukture i prijelaznih gustoća [116–119]. Pored spomenutog, nedavno je SRPA u svom nerelativističkom obliku primijenjena na magnetske M1 [120] i Gamow-Tellerove prijelaze u lakim i srednje teškim jezgrama [121].

Iako je RPA, u svojem kvazičestičnom obliku [122] te u okviru kontinuumske RPA [49, 123], već bila primijenjena na relativističke nuklearne modele s kontaktnim međudjelovanjem, kao i na opis električnih i magnetskih elektromagnetskih prijelaza [124–126] te reakcija s izmjenom naboja [61], relativistički energijski funkcionali gustoće do danas nisu bili korišteni u razvoju SRPA modela. Time je otvorena mogućnost razvoja novog samosuglasnog opisa kolektivnih pobuđenja u jezgrama, kao i niza astrofizički značajnih procesa koji se odvijaju preko pobuđenih stanja u jezgrama. Od sinteze teških elemenata u masivnim zvijezdama i eksplozijama supernova, do opisa egzotičnih jezgri udaljenih od stabilnosti, istraživanje kolektivnih i nekolektivnih ekscitacija omogućuje dublji uvid u strukturu i dinamiku atomskih jezgri. Takva znanja ključna su i za primjene u nuklearnoj astrofizici, kao što su neutrinom inducirane reakcije u kolapsu jezgre zvijezde te za proračune neutronske hvatanja u r -procesu.

Razvoj relativističkih teorijskih metoda za opis ovih pojava vodi do uvođenja višekonfiguracionih modela, koji nadilaze tradicionalne pristupe temeljene na jednočestičnim prijelazima. U tom kontekstu, pristupi kao što su SRPA i njezina pojednostavljena varijanta STDA predstavljaju značajan korak naprijed u teorijskom opisu kolektivnih pobuđenja.

1.2 Cilj i hipoteze istraživanja

Osnovni cilj istraživanja u okviru ove teme je razviti potpuno samosuglasni formalizam druge aproksimacije slučajnih faza (SRPA) zasnovan na teoriji relativističkog energijskog funkcionala gustoće. Osim jednostavnih konfiguracija tipa 1 čestica - 1 šupljina (1p–1h), model će uključivati i konfiguracije pobuđenja 2 čestice - 2 šupljine (2p–2h), te njihova međusobna vezanja. Predviđena je implementacija relativističkog modela koji koristi kontaktni tip međudjelovanja između nukleona. Osim razvoja formalizma, predviđena je i izvedba numeričke implementacije modela za izračune prijelaznih matričnih elemenata i prijelazne snage za monopolna i dipolna pobuđenja na nekoliko jezgara od značaja za aktualna istraživanja na vodećim ubrzivačima u svijetu. U razvojnoj fazi, model će biti testiran putem pravila sume i spurioznih stanja u 1^- kanalu pobuđenja.



Slika 1.3: a) Izoskalarni monopolni odziv za ^{16}O za Gogny međudjelovanje za slučajeve RPA i SRPA za kontinuiranu raspodjelu snage za različite vrijednosti dvočestično-dvošupljinskih (2p–2h) graničnih energija. b) Slično kao i prethodni slučaj, ali za SRPA račun bez miješanih neutron–proton dvočestično-dvošupljinskih konfiguracija (SRPA*). Preuzeto uz dopuštenje iz [116]. Copyright (2012) by the American Physical Society.

1.3 Metodologija i plan istraživanja

Kako bi se ostvarili ciljevi istraživanja, nužno je razviti cjeloviti teorijski okvir za opis kolektivnih pobuđenja u atomskim jezgrama koji se temelji na teoriji energijskih funkcionala gustoće (DFT), odnosno na njezinoj relativističkoj formulaciji. Poseban naglasak stavljen je na primjenu aproksimacija poput RPA, STDA i SRPA, u varijantama koje uključuju kontaktne interakcije i mnogočestične konfiguracije. Predložena metodologija podrazumijeva sustavan razvoj teorijskog formalizma i numeričkih alata, u skladu s aktualnim znanstvenim pristupima, s ciljem postizanja kvantitativne usporedbe teorijskih predviđanja svojstava kolektivnih nuklearnih pobuđenja s eksperimentom.

1.3.1 Odabir adekvatnog relativističkog funkcionala gustoće

U prvom koraku potrebno je provesti odabir adekvatnog relativističkog nuklearnog energijskog funkcionala gustoće. Kao optimalna varijanta odabran je relativistički funkcional s kontaktnim međudjelovanjem između nukleona, koji se onda koristi za izračun matričnih elemenata (standardne) aproksimacije slučajnih faza (RPA). Teorija energijskog funkcionala gustoće (DFT) pruža mogućnost proučavanja statičkih i dinamičkih svojstava jezgri duž čitave karte nuklida. Modeli bazirani na DFT-u dosad su se pokazali vrlo uspješnima u opisu raznih globalnih svojstava jezgri, od energije vezanja pa do radijusa naboja, ali i u predviđanjima novih strukturnih fenomena, izračunu udarnih presjeka nuklearnih reakcija i raspršenja, vremena poluživota beta raspada i drugo. Polazišna točka je opis jezgre u okviru relativističke Hartreejeve teorije koja koristi kontaktno međudjelovanje između nukleona, što kroz izračun osnovnog stanja omogućava određivanje jednočestičnih protonskih i neutronske valnih funkcija te energijskih nivoa, koji se uz efektivni lagrangijan koriste kao input relativističkom RPA (RRPA) modelu.

1.3.2 Razvoj formalizma

Potrebno je provesti razvoj formalizma STDA i SRPA u okviru teorije nuklearnih energijskih funkcionala gustoće i relativističkih modela s kontaktnim međudjelovanjem, izračun STDA i SRPA matričnih elemenata, snaga prijelaza i odgovarajućih pravila sume. Kao polazišna točka uzet će se postojeći formalizam STDA i SRPA definiran u nizu pionirskih znanstvenih radova J. Da Providencije [101], C. Yannouleasa, M. Dworzecke i J. J. Griffina [102–105], B. Schwesinger i J. Wambacha [106–108], S. Drozdza i drugih [109] koji je u ovom radu proširen i primijenjen u okviru teorije nuklearnih energijskih funkcionala gustoće na adekvatan relativistički model s kontaktnim međudjelovanjem. Predviđa se da će uvođenje (2p–2h) konfiguracija omogućiti uz postojeće (1p–1h) konfiguracije, kao i kod nerelativističkih modela, potpuniji teorijski opis spektra pobuđenih stanja u atomskim jezgrama. Uz navedeno, razvoj uključuje izračun STDA i SRPA matričnih elemenata dvočestičnog međudjelovanja i prijelaznih matričnih elemenata, što predstavlja prirodnu nadogradnju (standardne) RPA u okviru DFT-a, te izradu numeričkog modela.

1.3.3 Primjena metoda naprednog računarstva

S obzirom na numeričku složenost izračuna koji uključuju kompleksne konfiguracije u opisu kolektivnih pobuđenja, metode korištene u ovom istraživanju temelje se na primjeni učinkovitih numeričkih algoritama i vlastitih računalnih resursa. U tu svrhu napravljen je namjenski računalni sustav temeljen na rabljenim serverima, konfiguriran za izvođenje paraleliziranih zadataka

i optimiziran za računanje matričnih elemenata STDA i SRPA, prijelaznih snaga i dijagonalizaciju matrica velikih dimenzija. Takav pristup omogućio je veću fleksibilnost u implementaciji numeričkih rutina i neovisnost o institucionalnoj infrastrukturi, čime je ubrzan razvoj i testiranje istraživačkih modela.

1.4 Očekivani doprinos znanstvenog istraživanja

Cilj istraživanja je uvesti formalizam SRPA u okviru teorije relativističkih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće koja treba ići iznad 1 čestica - 1 šupljina (1p–1h) konfiguracija i uključiti konfiguracije pobuđenja 2 čestice - 2 šupljine (2p–2h) i njihova vezanja. Primjena modela koji koriste kontaktni tip međudjelovanja između nukleona i njihova numerička implementacija, osigurava izvedivost praktičnih izračuna nuklearnih matričnih elemenata u SRPA matrici, matričnih elemenata prijelaza, prijelaznih snaga i odgovarajućih pravila sume. Model će omogućiti potpuno samosuglasan opis pobuđenih stanja i njihove fragmentacije u jezgrama bogatim neutronima, što je od posebnog značaja za aktualne istraživačke programe na vodećim ubrzivačima nuklearne fizike u svijetu. Također, razvoj ovog modela će otvoriti perspektivu realističnog opisa čitavog niza astrofizički značajnih procesa, koji su dosad bili zasnovani na običnoj (standardnoj) RPA, što uključuje beta raspade, neutrino-jezgra međudjelovanje, uхват elektrona u fazi koja prethodi eksploziji supernove i druge astrofizičke procese.

2 KOLEKTIVNA POBUĐENJA U ATOMSKIM JEZGRAMA

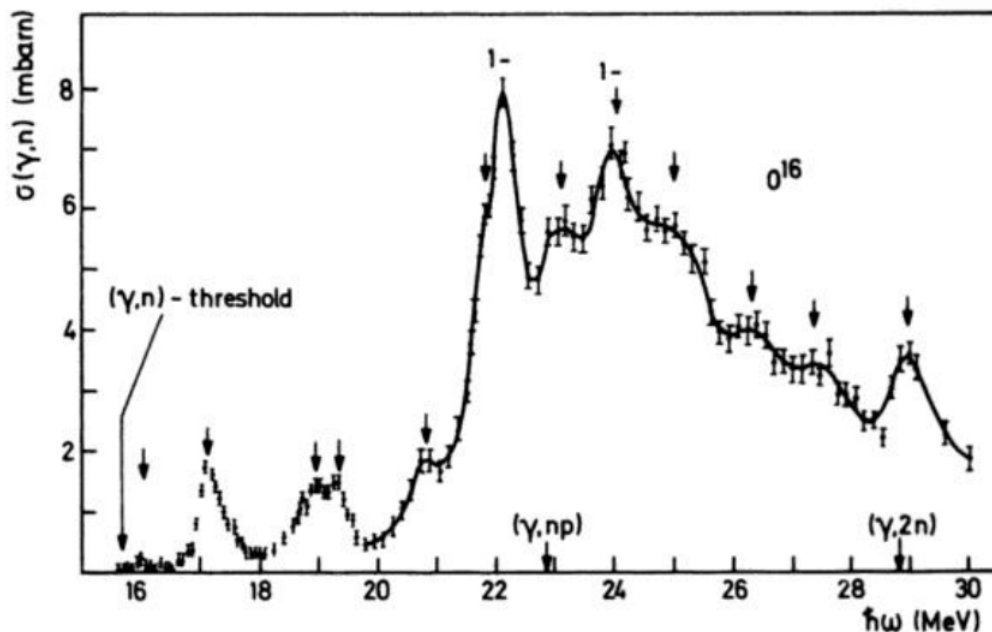
2.1 Povijest proučavanja kolektivnih pobuđenja

Pojavljivanje kolektivnih modova pobuđenja česta je pojava u kvantnomehaničkim mnogočestičnim fermionskim sustavima. Atomska jezgra kao sustav međudjelućih nukleona također manifestira kolektivno gibanje. Povijest proučavanja kolektivnih pobuđenja u atomskim jezgrama započinje sredinom 20. stoljeća s proučavanjem fotoapsorpcije i pojavom eksperimentalne naznake rotacijskih spektara u deformiranim jezgrama.

Postojanje ovakvih uređenih, kolektivnih modova unatoč mnoštvu stupnjeva slobode u jezgri povijesno je bilo prvo potvrđeno kasnih 1940-ih otkrićem gigantske dipolne rezonancije. G. D. Baldwin i G. S. Klaiber su 1947. u fotoapsorpcijskim eksperimentima uočili široki maksimum u apsorpcijskom udarnom presjeku atomskih jezgri na energijama između 15 i 20 MeV, dok je širina rezonancije iznosila 4–6 MeV [1]. M. Goldhaber i E. Teller su ubrzo spomenuto otkriće interpretirali kao kolektivnu dipolnu vibraciju atomske jezgre, odnosno kao koherentno gibanje svih protona nasuprot neutronima [40]. Širina tog rezonantnog vrha ukazivala je na snažno prigušenje kolektivnog pobuđenja (vidjeti sliku 2.1), za razliku od oštih spektralnih linija koje bi se očekivale pri nedisperzivnom pobuđenju jednog nukleona. Time je otkriće gigantske dipolne rezonancije (GDR) postalo prvi eksperimentalni dokaz postojanja kolektivnih modova pobuđenja u jezgri i njihove prigušenosti. U narednim desetljećima, sustavna mjerenja fotoapsorpcije pokazala su da GDR postoji u svim jezgrama te da mu je srednja energija oko $E_{\text{GDR}} \approx 13\text{--}20$ MeV, uz slabiju ovisnost o masenom broju A , dok je tipična ukupna širina reda 4–8 MeV [9, 10, 127, 128].

Idući ključni teorijski iskorak učinio je J. Rainwater 1950. godine, predloživši da deformacija jezgre može uzrokovati kolektivna gibanja, čime je otvoren put za razumijevanje nuklearne strukture izvan okvira isključivo jednočestičnih modela [129]. Na temelju ove spoznaje, A. Bohr i B. Mottelson razvili su cjeloviti teorijski okvir koji je povezao gibanja pojedinačnih nukleona s kolektivnim stupnjevima slobode, posebno rotacijom i vibracijom deformirane jezgre. U seminalnom radu iz 1953. godine, autori su formulirali tzv. "kolektivni model jezgre", koji je u stanju objasniti rotacijske vrpce u spektrima pobuđenih stanja, posebice u jezgrama s izraženom kvadrupolnom deformacijom [130]. Rotacijske energije u deformiranim jezgrama uspješno su opisali kvadratnim zakonima oblika $E(J) = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$, gdje je J kvantni broj ukupnog kutnog momenta, a I moment tromosti jezgre. Takva funkcionalna ovisnost, potvrđena u brojnim eksperimentima, ukazala je na rotacijsko ponašanje kvantnog sustava te predstavila temelje za klasifikaciju spektara deformiranih jezgara.

Za svoj izuzetan doprinos razumijevanju strukture atomskih jezgara, Rainwater, Bohr i Mottelson su 1975. godine zajednički nagrađeni Nobelovom nagradom za fiziku, čime je



Slika 2.1: Fotoneutronske udarne presjeka na atomskoj jezgri ^{16}O do 30 MeV. Preuzeto uz dopuštenje iz [3]. Copyright (1964) by the American Physical Society.

njihova teorijska i eksperimentalna sinteza postala temelj modernih nuklearnih modela [131].

2.2 Svojstva kolektivnih pobuđenja

Kolektivna pobuđenja u atomskim jezgrama imaju nekoliko karakterističnih obilježja koja ih razlikuju od jednočestičnih pobuđenja. Ta obilježja su posljedica koherentnog gibanja većeg broja nukleona, što dovodi do promjene, kako u energijskim stanjima, tako i u raspodjeli prijelazne snage. Općenito se mogu izdvojiti sljedeće važne karakteristike [102, 132–134]: i) velika širina rezonancije, ii) pojačane vjerojatnosti prijelaza, iii) slaba ovisnost energije o masenom broju, iv) koherentna struktura valne funkcije, i v) dominantan prijelazni operator. Njihovo razumijevanje ključno je za razvoj mikroskopskih teorija nuklearne strukture i dinamičkih modela, osobito onih temeljenih na RPA, SRPA, i vremenski ovisnim metodama poput vremenski ovisne Hartree-Fockove aproksimacije (TDHF) [74] i vremenski ovisne teorije funkcionala (TDDFT) [135].

2.2.1 Širina rezonancija

Kolektivne rezonancije, poput gigantske dipolne, kvadrupolne i monopolne rezonancije, pokazuju značajnu širinu spektra, tipično oko 5 do 15 MeV [132]. Ova velika širina rezultat je

kombiniranih mehanizama prigušenja, uključujući Landauovo gušenje, širinu za emisiju čestice i miješanje s kompleksnim konfiguracijama [132–134, 136]. Stoga se ukupna širina Γ gigantske rezonancije može raščlaniti na tri temeljna doprinosa [132, 136]:

$$\Gamma = \Delta\Gamma + \Gamma^\uparrow + \Gamma^\downarrow, \quad (2.1)$$

gdje je $\Delta\Gamma$ Landauovo gušenje, $\Gamma^\uparrow$ širina za emisiju čestice, a $\Gamma^\downarrow$ širina zbog miješanja s kompleksnim konfiguracijama. Ova dekompozicija omogućuje detaljno razumijevanje mehanizama prigušenja kolektivnih pobuđenja u atomskim jezgrama, osobito u lakim sustavima poput ^{16}O , ^{40}Ca i ^{48}Ca .

Landauovo gušenje $\Delta\Gamma$ nastaje zbog unutarnjeg raspršenja kolektivne oscilacije na blisko ležeća 1p–1h stanja. U okviru RPA teorije, to se manifestira kao fragmentacija prijelazne snage na više vlastitih stanja umjesto jednog rezonantnog maksimuma [132, 134]. Širina tog rasapa tipično iznosi do 1 MeV i odgovorna je za finu strukturu rezonancije [27]. U laganim jezgrama poput ^{16}O i ^{40}Ca , fragmentacija je izraženija nego u težim jezgrama zbog manjeg broja dostupnih konfiguracija za kolektivno gibanje [23, 24]. Eksperimentalno se fragmentacija vidi kao više uskih vrhova u spektrima prijelaza. Landauovo gušenje je prisutno čak i bez direktnog raspada ili unutarnjeg miješanja, što ga čini osnovnom komponentom širine u svim jezgrama. Iako relativno maleno, ono postavlja temeljnu ograničenost kolektivnosti. U konačnoj širini gigantskih rezonancija, njegov doprinos može se razlučiti teorijski analizom RPA spektra ili eksperimentalno detaljnom analizom fine strukture [132].

Širina za emisiju čestica $\Gamma^\uparrow$ predstavlja doprinos ukupnoj širini koji nastaje izravnim raspadom rezonancije emisijom čestica. Ako je pobuđenje iznad praga vezanja za neutron ili proton, kolektivni mod može se raspasti izravno preko emitirane čestice (najčešće proton, neutron ili α -čestice), uz preostalu jezgru [132, 134]. Ovaj proces je osobito važan u lakim jezgrama gdje su pragovi niski i broj kanala raspada ograničen. U jezgrama poput ^{48}Ca , do 40% ukupne širine GDR-a može potjecati iz direktne emisije neutrona [137]. Širina za emisiju nukleona može se modelirati u okviru kontinuumске RPA (CRPA), gdje čestice prelaze u nelokalizirana stanja kontinuuma [87]. U eksperimentima, ovaj mehanizam se detektira putem koreliranih reakcija tipa $(e, e'X)$, gdje se bilježi emisija čestica zajedno s pobuđenjem [137]. U srednje teškim jezgrama direktni raspad još uvijek značajno doprinosi, dok je u teškim jezgrama zanemariv zbog dominacije statističkih deekscitacija. Širina za emisiju nukleona stoga opada s porastom mase jezgre. Važno je napomenuti da radijativni raspad gotovo ne doprinosi ukupnoj širini ¹, s udjelom manjim od 10^{-3} [138, 139].

U srednje teškim i teškim jezgrama najveći doprinos ukupnoj širini GDR-a najčešće po-

¹U doktorskoj disertaciji E. Ramakrishnana iz 1995. godine, koja proučava GDR u visoko pobuđenim teškim jezgrama poput ^{208}Pb , ističe se da je doprinos radijativnog raspada ukupnoj širini rezonancije vrlo mali. U jezgri ^{208}Pb , dominantni mehanizmi raspada su statističke deekscitacije poput emisije neutrona, dok je radijativni raspad gotovo zanemariv, s udjelom u ukupnoj širini GDR-a manjoj od 0.1% [138]. Dodatno, u slučaju Hoyleovog stanja u ^{12}C , pokazuje se da je radijativna širina tog stanja također vrlo mala u usporedbi s ukupnom širinom, što je u skladu s općim trendom zanemarivog doprinosa radijativnog raspada u kolektivnim nuklearnim pobuđenjima [139].

tječe od širine raspršenja $\Gamma^\downarrow$, zbog miješanja kolektivnih 1p–1h pobuđenja s kompleksnijim konfiguracijama, poput 2p–2h, tročestično-trošupljinskih (3p–3h) i viših pobuđenja [132, 140]. Eksperimentalno se takvo miješanje očituje kroz statističku deekscitaciju emisijom čestica iz pobuđenih stanja jezgre-kćeri. U teškim jezgrama, poput ^{208}Pb , koherentna 1p–1h pobuđenja nakon formiranja postupno se transformiraju u složena višestruka mp–mh stanja prije emisije čestica, što se može izravno povezati sa širinom raspršenja $\Gamma^\downarrow$ [141].

Teorijski modeli pokazuju da se $\Gamma^\downarrow$ povećava s masenim brojem jezgre, dok $\Gamma^\uparrow$ opada [142]. Time se oblik rezonancije s promjenom mase jezgre transformira od fragmentiranog i asimetričnog prema simetričnom Lorentzovom obliku. U lakim jezgrama poput ^{16}O i ^{40}Ca , sve tri komponente doprinose slično ukupnoj širini, odnosno istog su reda veličine, dok u težim jezgrama dominira miješanje s kompleksnijim konfiguracijama ($\Gamma^\downarrow$) [132, 142, 143].

2.2.2 Pojačane vjerojatnosti prijelaza

Kolektivna pobuđenja nose znatno veći udio ukupne prijelazne snage nego jednočestična pobuđenja. U dipolnom slučaju, gigantska dipolna rezonancija može prenijeti do 100%, a ponekad i preko 100% sumacijskog pravila [33, 38], a za kvadrupolne i monopolne prijelaze dominantan kolektivni vrh koncentrira najveći dio snage [23, 24]. Ova pojačana snaga rezultat je koherentnog sudjelovanja velikog broja 1p–1h konfiguracija s jednakim kvantnim brojevima.

Pojačane vjerojatnosti prijelaza odražavaju kolektivni karakter gibanja, pri čemu se nukleoni gibaju u fazi unutar zajedničkog potencijala. Umjesto da prijelaz proizlazi iz ekscitacije pojedinačnih čestica, u kolektivnim modovima dolazi do makroskopski usklađenog pomaka značajnog dijela nukleona, što rezultira znatnim povećanjem efektivnog dipolnog ili kvadrupolnog momenta [132, 134, 136]. Takva koherentnost dovodi do izraženih rezonantnih vrhova u spektru i objašnjava zašto se gigantske rezonancije uočavaju kao jasno izdvojene strukture u eksperimentalnim rezultatima reakcija neelastičnog raspršenja.

2.2.3 Ovisnost energije gigantskih rezonancija o masenom broju

Kolektivna pobuđenja, koja prenose značajan dio ukupne prijelazne snage, pokazuju sustavnu ovisnost o masenom broju jezgre. Ovo pravilo dodatno potvrđuje njihovo kolektivno porijeklo i razlikuje ih od jednočestičnih prijelaza, čije su energije nepravilno raspodijeljene. Empirijski podaci pokazuju da se energije gigantskih rezonancija mogu opisati jednostavnim funkcijama ovisnim o masenom broju A [132]. Kod gigantske monopolne rezonancije (GMR), koja odgovara uniformnoj radijalnoj kompresiji i ekspanziji jezgre (tzv. mod disanja), energija rezonantnog vrha izravno odražava elastična svojstva nuklearne materije, ponajprije njezinu kompresibilnost.

Empirijski se energija GMR može aproksimirati izrazom [132]:

$$E_{\text{GMR}} \approx 80 A^{-1/3} \text{ MeV}, \quad (2.2)$$

pri čemu dominantna ovisnost o $A^{-1/3}$ proizlazi iz činjenice da se karakteristična duljinska skala kolektivnih oscilacija određuje nuklearnim radijusom [74]

$$R \simeq r_0 A^{1/3}, \quad (2.3)$$

gdje je $r_0 \approx 1.2 \text{ fm}$. Budući da se energija kolektivnog moda u prvoj aproksimaciji ponaša obrnuto proporcionalno toj duljinskoj skali, dobiva se prirodna ovisnost $E \propto A^{-1/3}$. U teškim jezgrama, poput ^{208}Pb , energija vrha iznosi približno 14 MeV [12, 144], dok u lakšim sustavima, poput ^{40}Ca , doseže oko 20 MeV [19, 24]. Takva sistematika omogućuje eksperimentalno i teorijsko povezivanje GMR energije s procjenom kompresibilnosti nuklearne materije.

Za izovektorsku gigantsku dipolnu rezonanciju (GDR) vrijedi relacija [10]

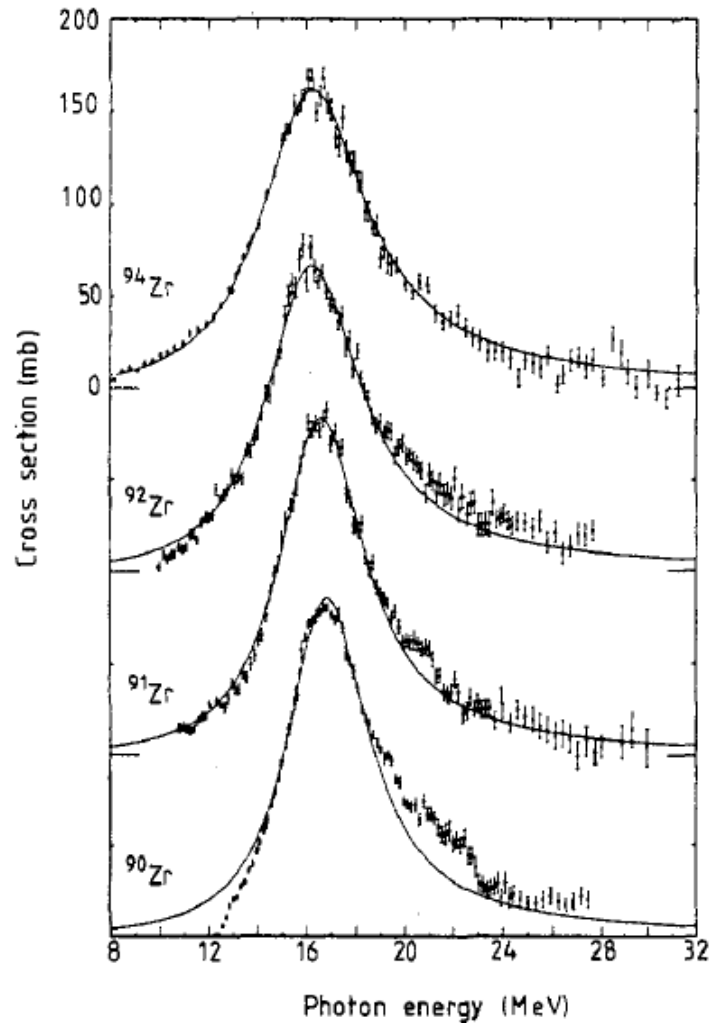
$$E_{\text{GDR}} \approx 31.2 A^{-1/3} + 20.6 A^{-1/6} \text{ MeV}, \quad (2.4)$$

koja opisuje monotono smanjenje energije s porastom masenog broja A . Navedena relacija predstavlja hibridni fenomenološki izraz koji objedinjuje dva komplementarna makroskopska opisa kolektivnih pobuđenja. Prvi član, s ovisnošću $A^{-1/3}$, proizlazi iz Steinwedel-Jensenovog (SJ) modela koji tretira GDR kao oscilaciju protonske i neutronske tekućine unutar fiksnog sferičnog volumena jezgre [41]. Drugi član, s ovisnošću $A^{-1/6}$, odgovara Goldhaber-Tellerovom (GT) modelu u kojem protonski i neutronski fluidi osciliraju jedan u odnosu na drugog [40]. Linearna kombinacija ovih dvaju modela omogućuje prikladniju parametrizaciju eksperimentalnih podataka za široki raspon masenih brojeva, uspješno interpolirajući između laganijih (gdje dominira GT mehanizam) i teških atomskih jezgara (gdje SJ model pruža bolji opis) [10, 132]. Sustavna mjerenja parametara izovektorskog GDR-a uglavnom su izvedena tehnikama fotonuklearne apsorpcije, koristeći kvazimonokromatske fotonske snopove nastale anihilacijom pozitrona u letu ili zakočnim zračenjem (njem. *bremsstrahlung*), pri čemu su položaji i širine rezonancije određene kroz analizu udarnih presjeka za emisiju neutrona [10, 108, 132]. Primjer evolucije oblika udarnog presjeka za fotoapsorpciju i ovisnosti energije GDR-a o masenom broju A unutar lanca izotopa Zr prikazan je na slici 2.2.

Slično tome, energija gigantske kvadrupolne rezonancije (GQR) može se aproksimirati izrazom [132]:

$$E_{\text{GQR}} \approx 63 A^{-1/3} \text{ MeV}, \quad (2.5)$$

što je u skladu s očekivanjem da se energijska skala kvadrupolnih površinskih deformacija jezgre određuje istom karakterističnom duljinom $R \propto A^{1/3}$ i odgovara kolektivnom modu u kojem protoni i neutroni osciliraju u fazi.



Slika 2.2: Fotoapsorpcijski udarni presjek za različite Zr izotope. Preuzeto uz dopuštenje iz [10]. Copyright (1975) by the American Physical Society.

2.2.4 Koherentna struktura valne funkcije

Valne funkcije kolektivnih stanja odlikuju se konstruktivnom interferencijom velikog broja $1p-1h$ komponenti. Takva interferencija dovodi do formiranja jednog dominantnog moda koji nosi znatan dio ukupne prijelazne snage. U standardnoj Tamm-Dancoff aproksimaciji (TDA) i RPA, kolektivna stanja odgovaraju onim vlastitim stanjima koja koncentriraju gotovo cjelokupnu prijelaznu snagu, za razliku od nekoherentnih, nasumično fazno raspoređenih $1p-1h$ pobuđenja [74].

Koherentna superpozicija čestično–šupljinskih konfiguracija ukazuje na postojanje prostorne fazne korelacije prijelazne gustoće unutar cijele jezgre. U kvadrupolnim i monopolnim modovima nukleoni se gibaju zajedno, u fazi ili protufazi između protonskog i neutronskog podsustava. Matrični element operatora prijelaza između početnog i konačnog stanja, izravno određuje jakost kolektivnog pobuđenja [134, 136]. Posljedično, makroskopska koherencija re-

zultira pretvorbom složenog mikroskopskog mnogočestičnog gibanja u kolektivnu oscilaciju atomske jezgre. Povećana prijelazna snaga proizlazi ne samo iz konstruktivne interferencije pojedinačnih komponenti, nego i iz simetrije rezidualne interakcije koja pogoduje kolektivnom spajanju susjednih konfiguracija.

2.2.5 Operatori prijelaza

S teorijskog stajališta, svako kolektivno pobuđenje može se povezati s određenim operatorom prijelaza koji definira njezin multipolni karakter i svojstva simetrija. Operator prijelaza povezuje osnovno i pobuđena stanja, određujući koje konfiguracije doprinose prijelaznoj snazi. U slučaju izovektorskog dipolnog moda, operator ima sljedeći oblik [145],

$$\hat{F}_{1\mu}^{\text{IV}} = e \left(\frac{N}{A} \sum_{p=1}^Z r_p Y_{1\mu}(\Omega_p) - \frac{Z}{A} \sum_{n=1}^N r_n Y_{1\mu}(\Omega_n) \right), \quad (2.6)$$

koji opisuje oscilaciju između protonskog i neutronskog podsustava, što rezultira pojavljivanjem gigantske dipolne rezonancije (GDR). Izoskalarni i izovektorski kvadrupolni operatori prijelaza [119, 132, 146]

$$\hat{F}_{2\mu}^{\text{IS}} = \sum_i r_i^2 Y_{2\mu}(\Omega_i), \quad \hat{F}_{2\mu}^{\text{IV}} = \sum_i r_i^2 Y_{2\mu}(\Omega_i) \hat{t}_z(i), \quad (2.7)$$

povezani su s kvadrupolnim oscilacijama oblika jezgre uz očuvanje volumena, dok monopolni operatori [119, 146]

$$\hat{F}_{00}^{\text{IS}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_i r_i^2, \quad \hat{F}_{00}^{\text{IV}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_i r_i^2 \hat{t}_z(i), \quad (2.8)$$

opisuju uniformnu radijalnu kompresiju i dekompresiju jezgre², karakterističnu za gigantsku monopolnu rezonanciju (GMR). U izrazima (2.6)-(2.8) r_i i Ω_i označavaju radijalnu koordinatu i kutne varijable i -tog nukleona (protona ili neutrona). Operator $\hat{t}_z$ predstavlja treću komponentu operatora izospina $\hat{\mathbf{t}}$, čije vlastite vrijednosti razlikuju neutrone ($|n\rangle$) i protone ($|p\rangle$). U radu će se koristiti sljedeća konvencija: $\hat{t}_z|n\rangle = \frac{1}{2}|n\rangle$ i $\hat{t}_z|p\rangle = -\frac{1}{2}|p\rangle$.

U TDA i RPA formalizmu kolektivna stanja nastaju kao linearne kombinacije 1p–1h konfiguracija koje konstruktivno interferiraju pod djelovanjem odgovarajućeg operatora prijelaza. Vjerojatnost prijelaza između osnovnog i pobuđenog stanja određena je prijelaznim matričnim elementom [64],

$$B(F; 0 \rightarrow \nu) = |\langle \nu | \hat{F} | 0 \rangle|^2, \quad (2.9)$$

gdje $\hat{F}$ predstavlja operator prijelaza, a $|\nu\rangle$ označava kolektivno svojstveno stanje Hamiltoni-

²Operator r^2 je najniži red operatora koji može pobuditi jezgru iz osnovnog stanja u prvo više stanje istog pariteta i istog angularnog momenta ($0^+ \rightarrow 0^+$), a da pritom ne narušava sfernu simetriju.

jana. Kolektivni modovi su oni u kojima se operator $\hat{F}$ projicira na valnu funkciju s velikim koherentnim doprinosom više 1p–1h komponenti, što rezultira pojačanom vrijednošću $B(F)$ i koncentracijom prijelazne snage u uskom energijskom području.

Doprinos određenog operatora prijelaza proizlazi iz simetrijske strukture rezidualnog međudjelovanja koja selektivno povezuje konfiguracije s kvantnim brojevima prijelaza J^π . Operator time određuje smjer kolektivnog gibanja u prostoru mogućih konfiguracija i definira koji će se mod izdvojiti kao kolektivan. U tom smislu, operator prijelaza ne samo da kvantitativno opisuje intenzitet pobuđenja, nego i kvalitativno definira njezinu fizikalnu prirodu, odnosno vrstu koherentnog gibanja unutar jezgre.

2.3 Opis mehanizama gušenja kolektivnih pobuđenja

Kolektivna kvantna pobuđenja u atomskim jezgrama predstavljaju koherentno gibanje velikog broja nukleona kao cjeline. Mikroskopski, teorije poput RPA i vremenski ovisne Hartree-Fockove aproksimacije (engl. *time-dependent Hartree-Fock*, TDHF) objašnjavaju ih kao koherentnu superpoziciju mnogih elementarnih 1p–1h pobuđenja koja oblikuju kolektivno stanje jezgre [74]. Međutim, ta kolektivna stanja nisu beskonačno dugovječna, jer čak pri temperaturi apsolutne nule ($T = 0$ K), ona imaju konačan vijek trajanja, odnosno širinu u energijskom spektru [108, 132]. Drugim riječima, pojavljuje se prigušenje kolektivnog gibanja unutar same jezgre. To prigušenje nije uzrokovano toplinskim fluktuacijama, već inherentnim kvantnim procesima unutar mnogočestičnog sustava. Dva mehanizma pritom imaju najvažniju ulogu u tome [108]: (i) dvočestični sudari među česticama koji su direktna posljedica Paulijevog principa isključenja i kratkodosežnih korelacija među nukleonima, i (ii) fragmentacija snage prijelaza između čestično-šupljinskih pobuđenja sustava koja se često naziva gušenje "srednjeg polja" ili Landauovo gušenje. Gušenje nuklearnih vibracija se opaža kao širenje raspodjele snage prijelaza i poznato je još od otkrića GDR tijekom proučavanja fotoapsorpcije [1, 40].

Ovi se koncepti ne ograničavaju samo na atomske jezgre. Naime, slični kolektivni modovi i njihovo gušenje javljaju se i u drugim fermionskim sustavima (npr. *zero-sound* mod u tekućem ^3He , plazmonske oscilacije u metalima, titranje kvark-gluonske plazme itd.), što ukazuje na univerzalnost Landauovog mehanizma i ulogu višečestičnih sudara u kvantnim mnogočestičnim sustavima [72].

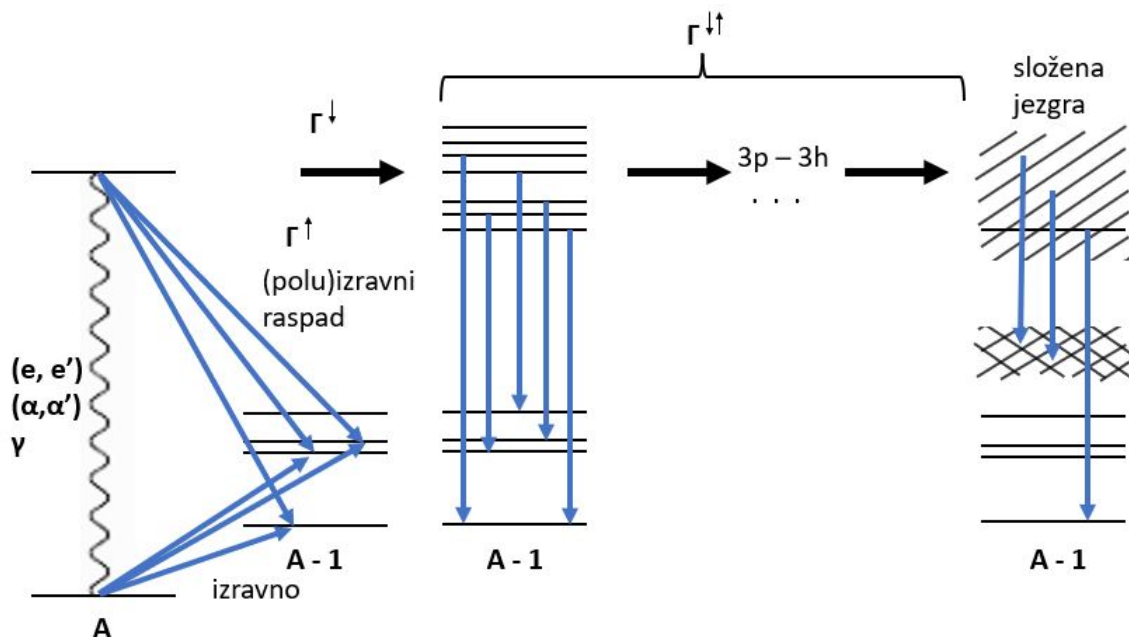
2.3.1 Dvočestični sudari

Prvi mehanizam gušenja kolektivnih pobuđenja povezan je s rezidualnim nukleon–nukleon međudjelovanjem izvan srednjeg polja. Tijekom kolektivne oscilacije nukleoni se ne gibaju potpuno neovisno, nego mogu razmjenjivati energiju i količinu gibanja preko rezidualnog me-

đudjelovanja, što se često opisuje pod pojmom "dvočestični sudari" [108]. Cjelokupni proces se može razumijeti kao unutarnje trenje ili viskoznost nukleonskog fluida [147, 148], slično sudarima molekula koji prigušuju makroskopske zvučne valove u klasičnoj tekućini [149]. Međutim, spomenutu analogiju valja uzeti s oprezom, jer jezgra nije tekućina u klasičnom smislu, nego konačni kvantni sustav.

U mikroskopskoj slici, takvi sudari pobuđuju dodatne parove čestica–šupljina tako da kolektivno pobuđenje, koje je inicijalno koherentno (1p–1h superpozicija), postupno prelijeva svoju energiju u stanja s većim brojem pobuđenih čestica. Na primjer, jedan kolektivni fonon može se "raspršiti" u dva fonona ili više fonona niže energije ili općenitije u konfiguraciju s 2 čestice i 2 šupljine (2p–2h), 3 čestice i 3 šupljine (3p–3h), odnosno općenito u višestruke konfiguracije oblika mp–mh, čime početno koherentno gibanje postupno gubi svoju jednostavnu kolektivnu strukturu [104, 108, 141, 150]. U jezgrama pri $T = 0$ zbog Paulijevog isključenja [151], mnogi naizgled mogući sudari su blokirani jer su niski energijski nivoi već zauzeti nukleonima. No, procesi koji uključuju stanja u blizini Fermijeve površine i dostupna prazna čestična stanja ostaju mogući i dovode do učinkovite disipacije. Pritom pojam "dvočestični sudar", ovdje nema klasično značenje, te se ovdje koristi u fenomenološkom i povijesnom smislu, pa je preciznije govoriti o kvantnomehničkom miješanju dopuštenih konfiguracija putem rezidualnog međudjelovanja. U suvremenijoj interpretaciji isti se proces često opisuje jezikom tzv. *doorway* mehanizma [132, 152]. Početno kolektivno stanje (1p–1h superpozicija) ne raspada se izravno u konačni statistički kanal, nego se najprije miješa s kompleksnijim 2p–2h konfiguracijama, koje predstavljaju prvi korak širenja kolektivne snage [152]. Ovaj proces stvara širinu raspršenja (engl. *spreading width*) kolektivnog stanja tako da umjesto jedne oštre energije, stvarni spektar prijelaza pokazuje raspodjelu oko središnje energije jer se kolektivno pobuđenje fragmentira na mnoga stanja višeg reda [104, 108, 150, 153]. Daljnjim miješanjem s još kompleksnijim, 3p–3h, odnosno mp–mh konfiguracijama, kolektivna snaga prelazi u gusto raspoređenu pozadinu stanja, čime se uspostavlja statistički karakter kasnije deekscitacije, primjerice emisijom čestica (protona, neutrona ili α čestica) ili γ -zračenja [132, 141]. Prikaz navedenih procesa nalazi se na slici 2.3.

Teorijski gledano, takvo gušenje zahtijeva uključivanje korelacija izvan jednostavnog srednjeg polja (engl. *mean-field*). Unutar standardne RPA, koja uključuje samo jednočestična 1p–1h gibanja, taj učinak nije prisutan, ali dodavanje dvočestičnih sudara (npr. u okvirima vremenski ovisnog Hartree-Fock modela s kolizijskim integralom ili dvočestično-dvošupljinskim konfiguracijama u pristupima poput SRPA) generira značajnu širinu fonona [153]. Upravo ta širina raspršenja, ponekad zvana i fononsko raspršenje, predstavlja jedan od glavnih, a nerijetko i dominantan doprinos ukupnoj širini gigantskih rezonancija u srednje teškim i teškim jezgrama [154]. Na kvantitativnoj razini, već 1980-ih je utvrđeno da najveći dio širine GDR u teškim jezgrama potječe od ovog mehanizma "širenja" zbog miješanja kolektivnog 1p–1h stanja s kompleksnijim konfiguracijama (2p–2h, 3p–3h, itd.). Ta širina raste s brojem dostupnih konfiguracija, tako da na primjer, jezgre daleko od magičnih brojeva (s većom gustoćom stanja) imaju šire rezonancije



Slika 2.3: Prikazani su doprinosi ukupnoj širini gigantske rezonancije. $\Gamma^\uparrow$ označava širinu koja dolazi od izravnog ili poluizravnog raspada u otvorene emisijske kanale, dok $\Gamma^\downarrow$ označava širinu koja dolazi od početnog miješanja kolektivnog pobuđenja s 2p–2h konfiguracijama. Daljnje širenje snage prema 3p–3h i složenijim mp–mh konfiguracijama opisuje se doprinosom $\Gamma^\downarrow$, nakon čega sustav prelazi u gusto raspoređena stanja složene jezgre i deekscitira se statistički.

[155]³.

U eksperimentalnim podacima to odgovara finijoj strukturi oko glavnog kolektivnog vrha, kao što primjerice mjerenja raspršenja visoke rezolucije pokazuju da gigantska rezonancija nije jedinstvena linija već skup vrlo gusto nagomilanih stanja⁴[156, 157]. Međutim, fina struktura kolektivnog vrha, odnosno fragmentacija spektra pobuđenja, ne mora uvijek potjecati iz miješanja s kompleksnijim konfiguracijama. U pojedinim slučajevima važan, pa čak i dominantan doprinos, može nastati već u 1p–1h prostoru, kroz Landauovo gušenje, što je opisano u idućem potpoglavlju.

³Ovaj znanstveni rad pruža pregled istraživanja o evoluciji svojstava vruće gigantske dipolne rezonancije (GDR) kao funkcije energije pobuđenja, s posebnim naglaskom na područje $A \sim 100$ –120 i $A \sim 60$ –70. Autori raspravljaju o modelima koji interpretiraju glavne značajke eksperimentalnih rezultata i uspoređuju ih s dostupnim podacima kako bi se izveo koherentan scenarij o granicama razvoja kolektivnog gibanja u jezgrama pri visokim energijama pobuđenja.

⁴Visokorezolucijska mjerenja neelastičnog raspršenja elektrona na jezgrama poput ^{90}Zr pokazala su izraženu fragmentaciju magnetske dipolne (M1) snage [156], pri čemu je utvrđeno više od 40 stanja s kvantnim brojevima $J^\pi = 1^+$, što ukazuje na finu strukturu gigantske M1 rezonancije sa srednjom energijom oko 9 MeV. Ova fragmentacija pripisuje se složenim višefononskim konfiguracijama i rezidualnom međudjelovanju unutar jezgre. Visokorezolucijskim mjerenjem neelastičnog raspršenja protona pri energiji od 200 MeV na jezgrama ^{27}Al , ^{40}Ca , ^{56}Fe , ^{58}Ni i ^{208}Pb pod kutom od 0° [157] otkrivena je značajna fina struktura u području izovektorske gigantske dipolne rezonancije (IVGDR).

2.3.2 Landauovo gušenje i fragmentacija na 1p–1h kontinuumu

Drugi važan mehanizam prigušenja je tzv. Landauovo gušenje, nazvano prema L. D. Landauu koji je 1946. pokazao da kolektivni Langmuirovi valovi u plazmi mogu biti prigušeni čak i bez sudara, uslijed međudjelovanja vala s česticama čije su brzine bliske faznoj brzini vala [158]. Dva desetljeća kasnije su Pines i Nozières u okviru teorije Fermijeve tekućine (*engl. Fermi liquid theory*) promatrali kako se kolektivne oscilacije raspadaju na elementarna kvazičestična pobuđenja [72]. Uočili su kako kolektivni modovi, poput tzv. *zero sound* oscilacija, mogu nastati i prigušiti se unutar sustava bez dvočestičnih sudara u režimu kada je umnožak frekvencije kolektivnog moda i srednjeg vremena između sudara velik ($\omega\tau \gg 1$). U navedenim uvjetima prigušenje nastaje zbog preklapanja kolektivnog moda s kontinuumom kvazičestičnih pobuđenja, što predstavlja analogiju prethodno uočenog prigušenja Langmuirovim valovima u plazmi. Pines i Nozières detaljno su analizirali ovu pojavu u okviru teorije linearnog odziva, koja je postala temelj za kasnije primjene u nuklearnoj fizici, osobito u interpretaciji gigantskih rezonancija i općenito raspada kolektivnog stanja bez potrebe za uvođenjem dvočestičnog sudara, odnosno trenja [72].

U nuklearnom kontekstu Landauovo gušenje očituje se kroz fragmentaciju snage prijelaza zbog miješanja kolektivnog moda s nekolektivnim 1p–1h pobuđenjima blizu njegove energije [104, 108, 136]. Za razliku od kolizijskog gušenja koje uključuje miješanje s kompleksnim konfiguracijama kao što su 2p–2h, 3p–3h ili općenito mp–mh stanja, Landauovo gušenje je jednočestični mehanizam prigušenja (*engl. one-body*). Naime, ono se pojavljuje već na razini jednostavne RPA aproksimacije, budući da sadrži samo 1p–1h konfiguracije općenito različitih energija koje mogu interferirati s kolektivnim modom [153]. U idealiziranom slučaju kad bi sve 1p–1h konfiguracije imale istu energiju, one bi se koherentno sumirale u čisti kolektivni mod. No, u realnosti različita 1p–1h pobuđenja imaju raspon energija. Landauovo gušenje stoga se može shvatiti kao dekoherencija početnog kolektivnog gibanja, pri čemu se prijelazna snaga fragmentira zbog miješanja kolektivnog moda s pojedinačnim nekoreliranim 1p–1h konfiguracijama bliskih energija. Tada se prijelazna snaga, umjesto da bude koncentrirana u jednom oštrom kolektivnom stanju, raspodjeljuje na više bliskih komponenti. Općenito, Landauovo gušenje doprinosi tzv. mikroširini (*engl. implicit width*) kolektivnih modova [102, 108], te objašnjava zašto ni u odsutnosti dvočestičnih ili višečestičnih sudara (čak ni u "zamrznutom" kvantno-mehaničkom sustavu) kolektivni mod nije beskonačno dugovječan.

Landauovo gušenje se najjasnije manifestira u lakšim jezgrama i za modove čija energija leži blizu kontinuumu jednočestičnih pobuđenja [153]. U težim jezgrama velik dio kolektivne snage često je koncentriran u području glavne gigantske rezonancije, ali se i tada može pojaviti fina struktura povezana s Landauovom fragmentacijom. Primjerice, u ^{208}Pb analiza fine strukture izovektorske gigantske dipolne rezonancije (IVGDR), dobivena na temelju visokorezolucijskih mjerenja (p, p') reakcija, pokazuje da su dominantne karakteristične skale prisutne već na razini 1p–1h konfiguracija, što upućuje na Landauovo gušenje kao važan mehanizam fragmentacije

IVGDR snage [159]. Međutim, navedeno ne vrijedi jednako za sve vrste gigantskih rezonancija, jer relativna važnost Landauove fragmentacije i širine raspršenja općenito ovisi o multipolu moda, masenom području i strukturi dostupnih konfiguracija. U lakšim jezgrama, izoskalarni kolektivni mod često fragmentira na nekoliko komponenti jer pojedine 1p–1h konfiguracije, primjerice prijelazi između ljusaka, mogu imati značajno udaljene energije i ne tvoriti jednako snažnu koherentnu superpoziciju. Usporedba eksperimentalne fine strukture s raspodjelama prijelazne snage gigantskih rezonancija izračunatih pomoću mikroskopskih modela, koji uključuju različite mehanizme gušenja, omogućila je uvid u njezino podrijetlo, pri čemu se za izoskalarnu gigantsku kvadrupolnu rezonanciju (ISGQR) kao ključan doprinos ističe početni korak *doorway* mehanizma, odnosno vezanje 1p–1h s 2p–2h konfiguracijama [152]. Novija istraživanja fragmentacije ISGQR putem neelastičnog raspršenja protona u lakšim jezgrama, poput ^{40}Ca , ukazuju da su karakteristične skale fine strukture prisutne već na razini srednjeg polja, što upućuje na prisutno Landauovo gušenje, dok se kod pojedinih SRPA pristupa fina struktura objašnjava vezanjem 1p–1h s 2p–2h konfiguracijama [160]. S druge strane, oba mehanizma gušenja imaju važan doprinos širini izoskalarne gigantske monopolne rezonancije (ISGMR). Novija analiza fine strukture ISGMR-a pokazuje da Landauova fragmentacija ima važnu ulogu u prigušenju ovog moda, osobito u srednje teškim jezgrama (^{58}Ni , ^{90}Zr , ^{120}Sn i ^{208}Pb) [161]. Međutim, izračuni koji uključuju miješanje 1p–1h i 2p–2h konfiguracija mijenjaju raspodjelu snage i karakteristične skale fine strukture, što ukazuje da pored Landauova doprinosa, važan doprinos ima i širina raspršenja ($\Gamma^\downarrow$) [161].

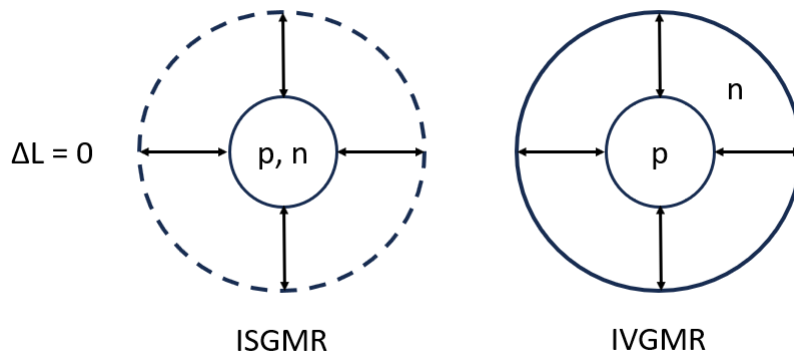
Za dobivanje potpunijeg opisa kolektivnog gibanja, teorijski modeli moraju uključiti oba mehanizma gušenja, Landauovo (jednočestično) i kolizijsko (dvočestično), kako bi se objasnile eksperimentalne širine. Izračuni gigantskih rezonancija na razini RPA ili TDA, koji opisuju fragmentaciju koja proizlazi iz raspodjele 1p–1h konfiguracija (postoji samo Landauovo gušenje), daju nešto manje širine od opaženih u lakim i srednje teškim jezgrama (otprilike dvostruko). To ukazuje na to da miješanje s kompleksnim konfiguracijama tipa 2p–2h značajno doprinosi širini.

2.4 Gigantske rezonancije

2.4.1 Gigantska monopolna rezonancija

Gigantska monopolna rezonancija (GMR), poznata i kao "disanje" jezgre, predstavlja kolektivnu oscilaciju cijele jezgre pri kojoj se njezin volumen periodički širi i skuplja bez promjene oblika (vidjeti sliku 2.4). Ova rezonancija odgovara monopolnom pobuđenju ($\Delta L = 0$) i uglavnom se pod navedenim nazivom podrazumijeva izoskalarna rezonancija (ISGMR), što znači da se radi o koherentnom gibanju nukleona neovisno o njihovom tipu (proton ili neutron) [132]. Budući da je povezana s kompresibilnošću jezgre, GMR je relevantna u određivanju parametra

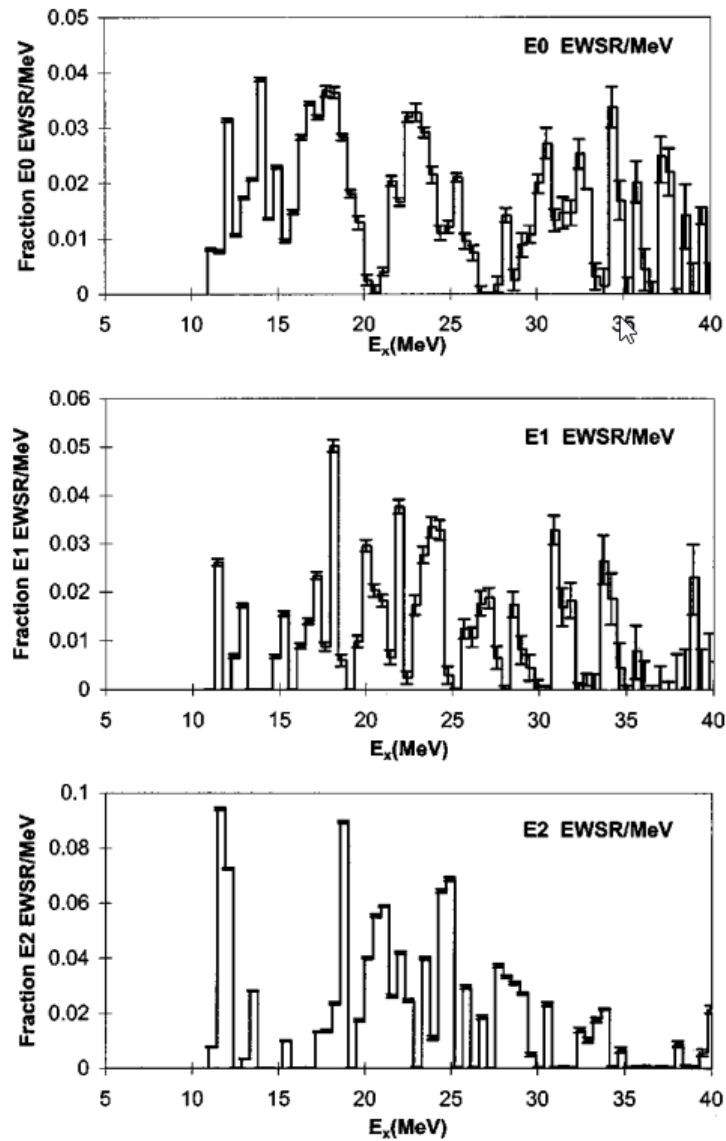
kompresibilnosti nuklearne materije K_{NM} , važnog u astrofizici i teoriji guste materije [36].



Slika 2.4: Shematski prikaz izoskalarne i izovektorske GMR.

Eksperimentalno, identifikacija ISGMR-a je prvenstveno zasnovana na mjerenjima neelastičnog raspršenja α -čestica pri vrlo malim kutovima, uključujući i 0° , gdje diferencijalni udarni presjek za $\Delta L = 0$ prijelaze postiže svoj maksimum [19, 23]. Karakteristična usmjerenost prema naprijed, očitovana kroz strmi pad intenziteta s povećanjem kuta raspršenja, predstavlja ključni potpis koji omogućuje jasno razlikovanje monopolnog doprinosa od ostalih multipolnih pobuđenja, poput GQR. Kako bi se kvantificirala raspodjela monopolne prijelazne snage ($E0$) u širokom rasponu energija pobuđenja [24, 144], provodi se analiza kutne raspodjele zasnovana na Bornovoj aproksimaciji distorziranih valova (engl. *distorted wave Born approximation*, DWBA), čime se omogućuje precizna dekompozicija eksperimentalnog spektra pobuđenja na pojedinačne multipolne doprinose [162–165]. Na primjeru jezgre ^{40}Ca uočeno je više od 97% pravila sume određenog sumom energijski ponderirane prijelazne snage (EWSR), s centroidom energije na približno 19.2 MeV i širinom oko 4.9 MeV u energijskom prozoru pobuđenja od 10 do 55 MeV [24, 25], što ukazuje na snažno koncentriranu i izraženu rezonanciju u navedenom energijskom području. Slična razina kolektivnosti opažena je i kod izotopa ^{48}Ca , gdje je identificirano 95% EWSR-a s centroidom energije pomaknutim prema nešto višim energijama, odnosno s položajem na 19.9 MeV [33]. Međutim, u usporedbi s lakšim izotopom, ovdje dolazi do značajnog širenja rezonancije na 6.68 MeV [33], što upućuje na jaču fragmentaciju monopolne snage i složeniju strukturu pobuđenja u neutronima bogatijoj jezgri, ali i na doprinos vezanja s kompleksnijim konfiguracijama izvan $1p-1h$ prostora. S druge strane, u lakim jezgrama poput ^{16}O , ISGMR se pokazuje više raspršen i fragmentiran u energijskom spektru. Eksperimentima je određen centroid energije 21.13 MeV i uočeno svega oko 48% ukupnog EWSR-a u energijskom području od 11 do 40 MeV [23], što ukazuje na veće površinske efekte i smanjenu koherenciju gibanja nukleona. Primjer eksperimentalne raspodjele ISGMR snage u jezgri ^{16}O prikazan je na slici 2.5. Nasuprot fragmentaciji opaženoj u lakim jezgrama, kod teške dvostruko magične jezgre ^{208}Pb dolazi do snažne lokalizacije ISGMR snage, što ukazuje na visok stupanj koherentnosti u kompresijskom načinu gibanja nukleona. Eksperimentalni

podaci dobiveni neelastičnim raspršenjem α -čestica ukazuju da se centroid rezonancije nalazi na približno 14 MeV sa širinom od oko 3 MeV, pri čemu je iscrpljeno gotovo 100% EWSR-a [22, 29].



Slika 2.5: Eksperimentalna raspodjela snage za izoskalarne monopolne (ISGMR), izoskalarne dipolne (ISGDR) i izoskalarne kvadrupolne prijelaze (ISGQR) za ^{16}O dobivena neelastičnim raspršenjem α -čestica pri malim kutovima. Preuzeto uz dopuštenje iz [23]. Copyright (2001) by the American Physical Society.

Uz standardni izoskalarni mod, postoji i izovektorska gigantska monopolna rezonancija (IVGMR), koju karakteriziraju oscilacije protonske i neutronske gustoće u protufazi (vidjeti sliku 2.4). Za istraživanje IVGMR-a u pravilu se koriste površinski osjetljive reakcije s izmjenom naboja pri malim prijenosima količine gibanja, odnosno pri vrlo malim kutovima raspršenja i za male Q -vrijednosti reakcija [132]. Na taj način postiže se potiskivanje dominantne izoskalarne komponente, što ujedno omogućuje i jasniju identifikaciju izovektorskih prijelaza koji bi inače

bili zasjenjeni. Kao probe u proučavanju IVGMR-a najčešće su se koristile $(\pi^\pm, \pi^0)$ [14], $(^{13}\text{C}, ^{14}\text{N}_{\text{g.s.}})$ [17]⁵, $(^7\text{Li}, ^7\text{Be})$ [20] i $(^3\text{He}, ^3\text{H})$ reakcije [31]. Za jezgru ^{40}Ca reakcija (π^-, π^0) selektivno pobuđuje $T+1$ komponentu izovektorskog monopola, pri čemu je centroid rezonancije određen na 24.1 MeV uz FWHM širinu od 21.6 MeV [14]. Nasuprot tome, reakcija (π^+, π^0) pobuđuje $T-1$ komponentu, za koju je izmjeren viši centroid energije 35.9 MeV i širina 24.2 MeV [14]. Za jezgru ^{208}Pb opaža se znatno izraženija ovisnost o vrsti reakcije s izmjenom naboja. U reakciji (π^-, π^0) centroid energije IVGMR određen je na 35.4 MeV uz širinu od 16.6 MeV, dok se u reakciji (π^+, π^0) rezonancija pojavljuje na znatno nižim energijama, s centroidom na 12.0 MeV i širinom od 11.6 MeV [14]. Ovakvo ponašanje ukazuje na složeniju strukturu izovektorskih pobuđenja u teškim jezgrama te naglašava različitu selektivnost piona u pobuđenju pojedinih izospinskih komponenti. U radu [31] analizirana su izovektorska pobuđenja u reakciji $^{90}\text{Zr}(t, ^3\text{He})^{90}\text{Y}$, pri čemu dobiveni spektar sadrži doprinos više multipolnih komponenti. Zbog značajnog preklapanja različitih multipola, osobito $\Delta L = 0$ i $\Delta L = 2$ prijelaza, izovektorski monopolni mod ne može se jednoznačno izdvojiti iz eksperimentalnih podataka. Ipak, u spektru se nazire povećana koncentracija snage oko 19–20 MeV, koja se može povezati s IVGMR [31].

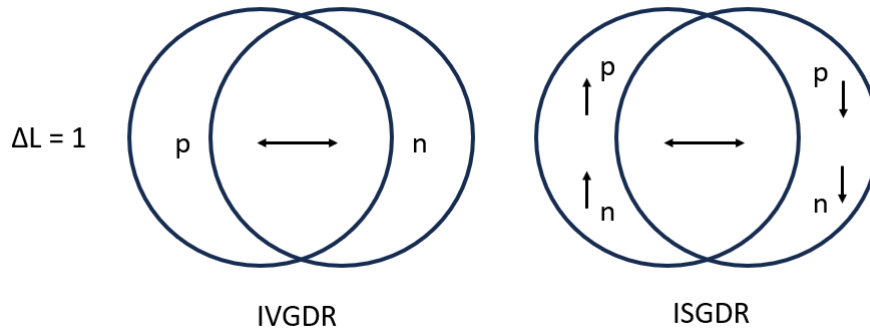
2.4.2 Gigantska dipolna rezonancija

Izoskalarna gigantska dipolna rezonancija (ISGDR) u prvom redu odgovara jednostavnoj translaciji cijele jezgre, odnosno pomicanju centra mase, što ne predstavlja stvarno unutarnje pobuđenje sustava. Budući da takvo gibanje ne mijenja unutarnju strukturu jezgre, ono se u teorijskim izračunima pojavljuje kao stanje koje se odnosi na gibanje centra mase jezgre i potrebno ga je precizno eliminirati (engl. *spurious state*) [74]. Tek u drugom redu, primjenom operatora višeg reda proporcionalnog s r^3 , ISGDR opisuje stvarni kompresijski mod poznat kao dipolni mod disanja (engl. *breathing dipole mode*), u kojem se gustoća nukleona periodički mijenja duž dipolne osi (vidjeti sliku 2.6). Navedeni operator dan je izrazom [145]

$$\hat{F}_{1\mu}^{\text{IS}} = \sum_{i=1}^A (r_i^3 - \eta r_i) Y_{1\mu}(\hat{r}_i), \quad (2.10)$$

gdje član r^3 uzrokuje da se jedan dio jezgre zgušnjava dok se drugi razrjeđuje, što odgovara "stiskanju" (engl. *squeezing*) nuklearne tvari. Član ηr_i je uveden kako bi se osiguralo da je operator $\hat{F}_{1\mu}^{\text{IS}}$ ortogonalan na gibanje središta mase. Vrijednost η obično iznosi $\frac{5}{3}\langle r^2 \rangle$ [145]. Bez ove korekcije, izračun bi bio "zagađen" prividnim stanjima koja ne predstavljaju stvarnu unutarnju vibraciju jezgre. Upravo spomenuti mod drugog reda nosi ključne informacije o nuklearnoj kompresibilnosti.

⁵Nejasno je iz rada [17] je li uočena IVGMR ili IAS, odnosno je li ih uopće moguće razlikovati, budući da je navedena vrijednost centroida energije od 16.5 MeV sa znatno manjom širinom od 3.1 MeV. Položajom i širinom ova rezonancija je bliža IAS-u u ^{208}Pb na 18.9 MeV [166].



Slika 2.6: Shematski prikaz izovektorske i izoskalarne GDR.

Lake jezgre pružaju dobar poligon za određivanje komponenti širine gigantskih rezonancija, jer sve tri komponente ($\Delta\Gamma$, $\Gamma^\uparrow$ i $\Gamma^\downarrow$) mogu biti usporedive veličine. U dvostruko magičnoj jezgri ^{16}O , istraživanja ISGDR provedena neelastičnim raspršenjem α -čestica pri 240 MeV pokazala su prisutnost značajne E1 snage između 11 i 40 MeV (vidjeti sliku 2.5). Ukupno je identificirano oko 32% energijski ponderirane snage (EWSR), s centroidom energije pri 21.67 MeV i širinom oko 7.1 MeV [23]. Ova vrijednost ukazuje na izraženu, ali fragmentiranu dipolnu strukturu u navedenom energijskom području. Drugim riječima, dipolna snaga nije koncentrirana u jednom rezonantnom vrhu, već je raširena na veći broj stanja. U nešto težoj dvostruko magičnoj jezgri ^{40}Ca ($Z = N = 20$), ISGDR je uočena na energiji od 23.4 MeV, uz širinu od 5.3 MeV [24, 25], dok se u jezgri ^{48}Ca pojavljuje na višoj energiji, 27.3 MeV, sa znatno većom širinom od 8.3 MeV [33]. Usporedba energijskih spektara ovih dviju dvostruko magičnih jezgri pokazuje da višak neutrona u ^{48}Ca (8 neutrona u ljusci $1f_{7/2}$), zbog većeg broja dostupnih 2p–2h konfiguracija, dovodi do izraženijeg širenja rezonancije, što upućuje na složeniju strukturu pobuđenja i povećanu fragmentaciju dipolne snage.

Izovektorska gigantska dipolna rezonancija (IVGDR) predstavlja koherentno kolektivno pobuđenje u kojem se protonska i neutronska komponenta gustoće u atomskoj jezgri gibaju u protufazi, što dovodi do periodičkog razdvajanja centra mase protonske i neutronske raspodjele (vidjeti sliku 2.6). Eksperimentalna istraživanja IVGDR-a primarno se provode putem fotoapsorpcijskih procesa u kojima visokoenergijski fotoni izravno induciraju električne dipolne prijelaze (E1), te putem neelastičnog raspršenja elektrona koje omogućuje detaljan uvid u elektromagnetske form-faktore jezgre [132]. Pored spomenutog, suvremena nuklearna spektroskopija oslanja se na neelastično raspršenje protona pod ekstremno malim kutovima te na metodu Coulombova pobuđenja pri relativističkim energijama, što je ključno za određivanje dipolne čvrstoće i debljine neutronske omotača (engl. *neutron skin*) u egzotičnim izotopima [32, 167, 168].

Kako bi se izdvojilo "čisto" područje IVGDR-a, potrebno je promotriti energijski prozor od 18 do 26 MeV. U tablici 2.1 prikazane su srednje vrijednosti energije, širine, i EWSR za IVGDR, dobivene kompilacijom eksperimentalnih rezultata Plujko *et al.* [38] prilagodbom

Lorentzove funkcije eksperimentalnim ukupnim fotoapsorpcijskim presjecima u energijskom intervalu iznad energije separacije neutrona. Pri tome je srednja energija rezonancije definirana položajem maksimuma funkcije dobivene prilagodbom, a iscrpljenost EWSR normalizirana je s obzirom na Thomas–Reiche–Kuhnovo (TRK) sumacijsko pravilo [38]. U razmatranom energijskom intervalu, fotoapsorpcija je dominirana kolektivnim izovektorskim električnim dipolnim pobuđenjima, dok su doprinosi niskoležećih struktura i drugih viših modova zanemarivi. Gornja granica energijskog intervala odabrana je na način da obuhvati cjelokupnu rezonantnu strukturu IVGDR-a, uz istodobno ograničavanje utjecaja visokoenergijskih mehanizama fotoapsorpcije, poput kvazideuteronskog procesa. Riječ je o nerezonantnom mehanizmu fotoapsorpcije na koreliranom proton-neutron (pn) paru, koji se javlja iznad područja dominacije IVGDR te se stoga mora izuzeti pri eksperimentalnoj ekstrakciji parametara rezonancije [38]. Na taj način izdvojeni parametri odražavaju dominantna eksperimentalna obilježja izovektorske gigantske dipolne rezonancije, a ne artefakte povezane s izborom energijskog raspona.

U jezgri ^{16}O izovektorska gigantska dipolna rezonancija (IVGDR) eksperimentalno je vrlo dobro određena putem fotoapsorpcijskih mjerenja, posebno u radovima [6, 8, 9]. Ti podaci dosljedno daju centroid energije oko 23.4–23.7 MeV, uz širinu $\Gamma \approx 5.4\text{--}5.5$ MeV (vidjeti tablicu 2.1). Iscrpljenost energijski ponderiranog sumacijskog pravila u spomenuta tri eksperimentalna izvora iznosi približno 98–102%, što znači da rezonancija gotovo u potpunosti iscrpljuje EWSR. Nasuprot tome, ranija mjerenja pokazuju određena odstupanja, pri čemu podaci iz 1963. godine [2] sugeriraju nešto niži položaj i užu širinu uz zasićenje EWSR-a od oko 102% [38], dok Wyckoff *et al.* (1965.) [5] navode višu energiju ($E_0 \approx 24$ MeV) uz znatno manju širinu od 2.6–2.9 MeV i svega 44–47% iscrpljenosti EWSR-a. Naposljetku, novija kompilacija Ishkhanova *et al.* (2002.) [26] potvrđuje trend nešto višeg položaja centroida energije na oko $E_0 \approx 23.9$ MeV. Štoviše, navedeni rezultati ujedno potvrđuju da je IVGDR u ^{16}O dobro definiran kolektivni mod s relativno malom fragmentacijom. Za jezgru ^{40}Ca IVGDR je eksperimentalno određena prvenstveno iz fotoapsorpcijskih mjerenja. Prilagodba na standardnu Lorentzovu funkciju za dostupne eksperimentalne podatke [4] dala je položaj centroida energije na 20.58 MeV i širinu 6.23 MeV, uz iscrpljenost EWSR od oko 171% [38], dok su prema podacima iz [28] dobivene vrijednosti 20.06 sa širinom od 5.1 MeV, uz manju iscrpljenost EWSR od 120% [38]. U slučaju jezgre ^{48}Ca , IVGDR je istražen fotoapsorpcijskom metodom i pomoću (p, p') reakcija, što omogućuje detaljniju usporedbu eksperimentalnih pristupa. Na temelju fotoapsorpcijskih podataka [15] dobiven je centroid energije 19.70 MeV i širina od 6.23 MeV uz iscrpljenost EWSR od 147% [38]. Prilagodba na fotoapsorpcijska mjerenja iz 2003. [38], dala je slične vrijednosti položaja centroida energije (19.62 MeV), uz nešto veću širinu (6.60 MeV). S druge strane, (p, p') mjerenja na vrlo malim kutovima, analizirana u energijskom prozoru 10–25 MeV, daju niži centroid energije na 18.9 MeV i znatno manju širinu 3.9 MeV, uz iscrpljenost od približno 85% EWSR-a u prethodno navedenom području [35]. Sve navedene razlike jasno ukazuju da eksperimentalno određeni parametri IVGDR-a ovise o metodi, energijskom prozoru i modeliranju pozadine, pri čemu (p, p') pristup pokazuje užu širinu unutar ograničenog energijskog intervala u odnosu na

prilagodbu dobivenu na temelju fotoapsorpcijskih podataka.

Eksperimenti tipa $(e, e'x)$ na ^{40}Ca pokazali su da je direktan raspad IVGDR-a emisijom protona i α -čestice nezanemarljiv, premda značajan dio raspada ide i statistički putem miješanja u složene 2p–2h i više np – nh konfiguracije jezgre [169]. Posljednji mehanizam vodi ka postupnoj termalizaciji sustava i formiranju složene jezgre. U tom stadiju energija pobuđenja statistički se raspodjeljuje među svim nukleonima, što rezultira izotropnom emisijom čestica (vidjeti poglavlje 2.3.1). Analize temeljene na fluktuacijskoj metodi pokazuju da direktni (nestatistički) procesi dominiraju raspadom u protonske kanale, pri čemu njihov doprinos doseže čak 85–95% za prijelaze u osnovno i nisko pobuđena stanja jezgre ^{39}K [169]. Nasuprot tome, α -raspad u istom energijskom području pokazuje dominantno statistička obilježja, što ukazuje na to da se u ovom kanalu ravnoteža uspostavlja brže nego što se događa direktna emisija. Time ^{40}Ca nije ni prelagana jezgra (poput ^{16}O) da bi dominirao direktni raspad, ni preteška jezgra da bi dominirao potpuno statistički raspad te obje komponente treba uzeti u obzir. Jezgra ^{48}Ca zanimljiva je zbog neočekivano široke dipolne rezonancije ($\Gamma \approx 7.0$ MeV), što se djelomično pripisuje višku neutrona koji uvodi nekolektivne prijelaze. Mikroskopski izračuni širine $\Gamma_{7/2}$ [170]. Istodobno, moderna mjerenja $(e, e'n)$ reakcije pokazuju da oko 40% pobuđenja IVGDR-a u ^{48}Ca odlazi direktnim putem kroz neutronske bijeg ($\Gamma^\uparrow$) [137]. Ovakva interpretacija mehanizama prigušenja dodatno je potkrijepljena analizom fine strukture metodom kontinuirane valične transformacije (engl. *Continuous Wavelet Transform*, CWT) [137]. Za razliku od standardne Fourierove analize, CWT omogućuje istodobnu lokalizaciju signala u energetske i frekvencijske domeni, čime se u eksperimentalnim spektrima identificiraju karakteristične energetske skale. Analiza je potvrdila postojanje skale na razini od oko 1 MeV, koje se povezuju s Landauovom fragmentacijom 1p–1h stanja, dok uže skale izravno koreliraju s miješanjem u gusti rezervoar kompleksnih 2p–2h konfiguracija, što je posebno izraženo u ^{48}Ca u usporedbi s lakšim izotopom ^{40}Ca [137].

Tablica 2.1: Eksperimentalno određeni parametri izovektorske gigantske dipolne rezonancije (IVGDR) za ^{16}O . Navedeni su centroid energije E_0 , širina Γ , udio ispunjenja TRK (EWSR) i energijski prozor integracije. Navedeni parametri IVGDR-a preuzeti su iz kompilacije Plujka i suradnika [38].

E_0 [MeV]	Γ [MeV]	TRK [%]	Prozor [MeV]	Izvor (godina)
22.92	4.73	102.1	18.9–25.9	[2] (1963)
23.92	2.58	44.4	18.2–25.6	[5] (1965)
24.04	2.90	46.9	18.2–25.6	[5] (1965)
23.37	5.54	95.7	18.5–26.0	[6] (1969)
23.66	5.44	98.5	18.2–25.9	[8] (1972)
23.70	5.36	98.1	18.1–26.0	[9] (1975)
23.71	3.98	76.2	18.2–26.0	[26] (2002)
23.89	4.59	82.0	18.2–26.0	[26] (2002)

U slučaju izotopa kalcija ^{40}Ca i ^{48}Ca , u [27] također su provedene i detaljne analize E1 snage pomoću fotonskog raspršenja (γ, γ') u energijskom području ispod 10 MeV⁶. U ^{40}Ca detektirano je vrlo malo dipolne snage, odnosno samo 0.023% EWSR, što ukazuje na slabo pobuđenje pri niskim energijama. Nasuprot tome, u ^{48}Ca izmjereno je gotovo deset puta više E1 snage, odnosno 0.27% EWSR [27]. Ta razlika pripisuje se višku neutrona u ^{48}Ca , koji omogućuje razvoj moda poznatog kao *pygmy* dipolna rezonancija (PDR) ili *pygmy* dipolna snaga (PDS). PDR se često interpretira kao oscilacija viška neutrona lokaliziranog na površini jezgre naspram inertne protonsko-neutronske sredice i tipično se javlja ispod praga emisije čestica. Ova rezonancija ima slabiju kolektivnost, ali značajnu ulogu u razumijevanju raspodjele neutrona u jezgri i astrofizičkih procesa povezanih s (n, γ) reakcijama. Eksperimentalni rezultati ukazuju na to da je električna polarizabilnost, definirana kao $\sum B(E1)/E_i$, gotovo sedam puta veća u ^{48}Ca nego u ^{40}Ca u području između 5 i 10 MeV⁷ [35, 37]. To implicira lakše odvajanje centra naboja od centra mase u jezgrama s viškom neutrona. Povećana polarizabilnost direktno je povezana s razvojem viška neutrona u površinskom području jezgre i potencijalnom pojavom dipolne deformacije u pobuđenjima jezgre. Uz navedeno, eksperimentalne metode korištene u ovim studijama, poput nuklearne rezonantne fluorescencije, omogućuju precizno određivanje prijelazne snage bez pretpostavki o unutarnjoj strukturi jezgre. Takva preciznost važna je za provjeru teorijskih modela, posebno onih koji uključuju kompleksnije konfiguracije.

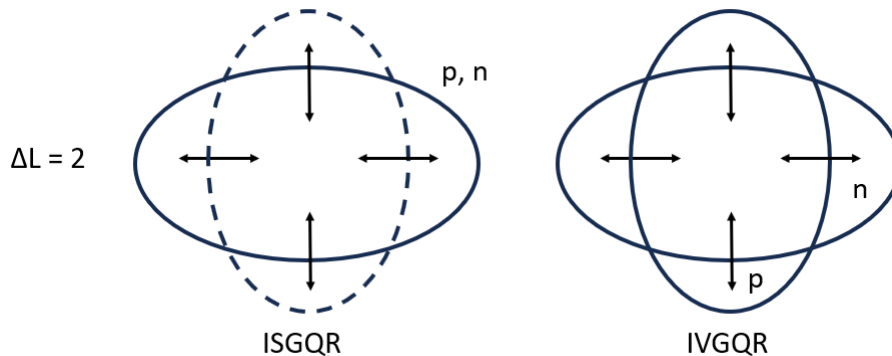
2.4.3 Gigantska kvadrupolna rezonancija

Gigantska kvadrupolna rezonancija (GQR) pripada među osnovna kolektivna pobuđenja atomskih jezgri i odgovara oscilacijama kvadrupolnog tipa ($\Delta L = 2$). Ova rezonancija može se interpretirati kao koherentna deformacija jezgre u obliku elipsoida, gdje se različiti dijelovi jezgre naizmjenično izdužuju i sabijaju [132]. U izoskalarnoj GQR komponenti (ISGQR) svi nukleoni koherentno sudjeluju u oscilaciji, dok u izovektorskoj komponenti dolazi do suprotnog gibanja protona i neutrona (IVGQR). Shematski prikaz obje komponente GQR nalazi se na slici 2.7. GQR zauzima energijsko područje odmah ispod GDR-a, tipično između 10 i 25 MeV, ovisno o masenom broju jezgre. Za razliku od GMR-a, GQR ne utječe na volumen jezgre, već isključivo na njezin oblik. Zbog toga je posebno osjetljiva na nuklearnu deformaciju i raspodjelu mase unutar jezgre. GQR predstavlja važan alat za proučavanje efektivne mase nukleona (m^*), nuklearne površine, inercijskih parametara i momenta tromosti [171, 172]. Eksperimentalne metode korištene za proučavanje GQR-a najčešće uključuju neelastično raspršenje čestica poput protona, deuteronu i α -čestica na jezgrama, pri čemu se koriste detektori s visokom kutnom

⁶E1 snaga je u navedenom području praktički identična IVGDR snazi.

⁷Iako je razlika u niskoležećoj E1 snazi između dva navedena izotopa drastična, važno je napomenuti da je razlika u ukupnoj električnoj dipolnoj polarizabilnosti (α_D), integriranoj preko cijelog energijskog područja (uključujući i GDR), znatno umjerenija i iznosi približno 40%. Taj sustavni porast ukupne polarizabilnosti u ^{48}Ca u odnosu na ^{40}Ca izravno se povezuje s razvojem neutronske omotača. [35, 37]

rezolucijom. Slično kao i kod prethodno opisanih rezonancija, za pouzdano određivanje vjerojatnosti prijelaza ($B(E2)$) koristi se DWBA pristup, koji je standard za dekompoziciju kutnih raspodjela u komponente određenog multipolnog reda.



Slika 2.7: Shematski prikaz izoskalarne i izovektorske GQR.

Svojstva ISGQR često se istražuju pomoću neelastičnog raspršenja α -čestica na jezgrama. U eksperimentima s α -česticama, izoskalarne komponente E2 snage može se izolirati zahvaljujući karakterističnim kutnim raspodjelama koje razlikuju $\Delta L = 0, 1$ i 2 prijelaze [23]. Za ^{16}O utvrđeno je da se GQR snaga prostire između 11 i 30 MeV, s centroidom energije pri 19.76 MeV i širinom od oko 5.11 MeV [23]. Ukupno je identificirano oko 53% energijski ponderirane prijelazne snage (EWSR) za E2 pobuđenje, što ukazuje na snažnu, ali fragmentiranu rezonanciju (vidjeti sliku 2.5). Najniže kvadrupolno stanje za ^{16}O javlja se na 6.92 MeV [23] i također doprinosi ukupnoj E2 snazi. U usporedbi s težim jezgrama, kvadrupolna rezonancija za ^{16}O pokazuje veću širinu i složeniju strukturu, što je rezultat manjeg broja kolektivnih konfiguracija i povećanih površinskih efekata nego u nešto težim jezgrama. U jezgri ^{40}Ca , koja je također dvostruko magična, ISGQR je vrlo izražena. Eksperimenti pokazuju da se gotovo cijeli iznos izoskalarne E2 snage (108% EWSR) nalazi u području oko 17.84 MeV, uz relativno usku širinu od 2.89 MeV [24]. Takva koncentracija snage ukazuje na snažnu kolektivnost i relativnu "čistoću" rezonantnog stanja. Osim dominantnog vrha, manji doprinosi nalaze se i u višim energijama, što je povezano s mogućim višečestičnim konfiguracijama. ISGQR u ^{40}Ca omogućuje precizno određivanje momenta tromosti jezgre i pruža test za različite modele kolektivnog gibanja. Izotop ^{48}Ca , koji sadrži 8 neutrona više, pokazuje nešto drugačije karakteristike kvadrupolne rezonancije. U slučaju ^{48}Ca , ISGQR je određena istom eksperimentalnom tehnikom, pri čemu je dobiven centroid energije u području 18.61 MeV te širina rezonancije od 7.96 MeV [33]. Ukupna iscrpljenost E2 energijski ponderiranog pravila sume iznosi približno 83% u energijskom intervalu od 9.5 do 40 MeV. Navedeni rezultati ukazuju na relativno široku i fragmentiranu kvadrupolnu rezonanciju u usporedbi s prethodno spomenutim lakšim jezgrama.

U okviru sustavnog istraživanja niskoležećih stanja u dvostruko magičnim izotopima Ca, rad Hartmann *et al.* [27], pored dipolne (E1), razmatra i kvadrupolnu (E2) prijelaznu snagu. Ukupna izmjerena E2 snaga u jezgri ^{48}Ca u području od 5 do 10 MeV iznosi oko $407\text{ e}^2\text{fm}^4$,

što odgovara 34% EWSR [27]. Iako je ukupna kvadrupolna snaga u jezgri ^{48}Ca nešto veća nego u ^{40}Ca , gdje iznosi $332 e^2\text{fm}^4$ [27], ona je znatno više fragmentirana i razlomljena na više slabijih stanja. Višak neutrona u ^{48}Ca omogućuje nove kvadrupolne modove koji uključuju neutron-skin oscilacije [173]. Fragmentacija rezonancije upućuje na interferenciju višečestičnih konfiguracija i mogući prijenos snage prema slabije kolektivnim modovima. Teorijski modeli predviđaju da bi viši doprinosi dolazili iz 2p–2h pobuđenja koja se ne mogu u potpunosti opisati u jednostavnoj RPA shemi.

Izovektorska gigantska kvadrupolna rezonancija (IVGQR) predstavlja kolektivni mod pobuđenja u kojem protonska i neutronska komponenta nuklearne gustoće osciliraju u protufazi (vidjeti sliku 2.7), uz očuvanje kvadrupolne simetrije titranja ($T = 1, E2$). Za razliku od dominantne IVGDR, eksperimentalna identifikacija IVGQR-a pokazala se znatno zahtjevnijom [132, 174]. U fotonuklearnim reakcijama, osobito tipa (γ, n) , doprinos IVGQR-a ukupnom udarnom presjeku fotoapsorpcije snažno je potisnut. Ova supresija proizlazi iz same prirode elektromagnetskog operatora, budući da su $E2$ prijelazi inherentno slabiji od $E1$ prijelaza u dugovalnoj aproksimaciji, ali i iz činjenice da se IVGQR javlja na relativno visokim energijama pobuđenja ($E_{\text{IVGQR}} \gtrsim 2 \times 41 A^{-1/3} \text{ MeV}$) [132], gdje udarnim presjekom dominira rep dipolne rezonancije. Zbog navedenih razloga, neelastično raspršenje elektrona (e, e') često se koristi kao komplementarni alat za proučavanje IVGQR-a, budući da omogućuje izravno sondiranje elektromagnetskih multipola kroz kontrolirani prijenos impulsa. Međutim, i u tom slučaju identifikacija IVGQR-a ostaje izazovna, budući da je pored problema malih udarnih presjeka njeno određivanje pogoršano velikom širinom, što dovodi do preklapanja s kontinuumom i drugim multipolnim doprinosima. Pored spomenutog, činjenica da je ovisnost o prijenosu impulsa (kutna raspodjela) za $E2$ i $E0$ prijelaze vrlo slična dodatno otežava pouzdano razdvajanje multipola [132].

U istraživanju koje su proveli T. W. Phillips i R. G. Johnson [7], mjerena je fotonuklearna reakcija $^{16}\text{O}(\gamma, n)^{15}\text{O}$ u području pobuđenja od 25 do 45 MeV. Eksperiment je izveden pomoću neutronske spektrometara koji mjere vrijeme njihova preleta, postavljenih na šest različitih kutova (između 22.5° i 135°), uz korištenje četiri različite krajnje energije zakočnog zračenja (30, 35, 40 i 45 MeV). Analizom kutnih raspodjela pomoću Legendreovih polinoma izdvojen je udarni presjek $\sigma(E2)$, čime je potvrđeno da ovo pobuđenje iscrpljuje približno 68% izovektorskog energijski ponderiranog pravila sume (EWSR) [7], što svjedoči o snažnoj prisutnosti kolektivnih kvadrupolnih modova u tom energijskom intervalu. Navedenom reakcijom istražen je IVGQR u jezgri ^{40}Ca , u energijskom području od približno 27 do 50 MeV [18]. Analiza kutne asimetrije emitiranih neutrona, koja proizlazi iz interferencije između IVGQR-a i repa izovektorske dipolne rezonancije (IVGDR), omogućila je pouzdanu ekstrakciju parametara rezonancije. Dobiveno je da se IVGQR nalazi na energiji pobuđenja oko $E_{\text{IVGQR}} \approx 31 \text{ MeV}$, uz veliku širinu $\Gamma \approx 16 \text{ MeV}$ [18], što upućuje na značajnu fragmentaciju i kolektivnu prirodu moda. Pored spomenutog, utvrđeno je da IVGQR iscrpljuje velik dio energijski ponderiranog pravila sume (EWSR), odnosno približno 95% [18].

2.5 Pravila sume

Pravila sume u nuklearnoj fizici povezuju momente raspodjele snage prijelaza s osnovnim svojstvima početnog stanja i prijelaznog operatora. Ona određuju ukupnu snagu koju određeni prijelazni operator može raspodijeliti među pobuđenim stanjima jezgre, neovisno o tome na koji je način snaga fragmentirana u energijskom spektru [132, 133, 175]. Drugim riječima, predstavljaju snažnu poveznicu između eksperimentalno mjerljivih pobuđenja i inherentnih svojstava jezgre [175], poput njezina sastava (broja protona i neutrona) i prostorne raspodjele naboja. Posebno je važno energijski ponderirano pravilo sume (engl. *energy-weighted sum rule*, EWSR), koje odgovara prvom momentu raspodjele prijelazne snage:

$$m_1(\hat{F}) = \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle \nu | \hat{F} | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \langle 0 | [\hat{F}, [\hat{H}, \hat{F}]] | 0 \rangle. \quad (2.11)$$

Navedeni oblik pravila sume služi kao teorijska normalizacija eksperimentalno izmjerene prijelazne snage i omogućuje procjenu koliki je dio ukupno očekivane snage iscrpljen u promatranom energijskom području.

Za izoskalarnu gigantsku monopolnu rezonanciju odgovarajući prijelazni operator je opisan izrazom (5.15), pa energijski ponderirano pravilo sume glasi [12, 132]

$$S(E0) = \frac{2\hbar^2}{m} A \langle r^2 \rangle. \quad (2.12)$$

Ovdje je $\langle r^2 \rangle$ srednji kvadrat radijusa osnovnog stanja, A broj nukleona, a m masa nukleona. Izraz pokazuje da je ukupna energijski ponderirana E0 snaga određena prostornim proširenjem nuklearne gustoće i brojem nukleona, odnosno faktorom $A \langle r^2 \rangle$. U eksperimentalnim analizama EWSR služi kao normalizacija izmjerene monopolne snage, dok se položaj i raspodjela ISGMR-a koriste za ograničavanje kompresibilnosti nuklearne materije K_{NM} i jednadžbe stanja [176, 177].

Za električne dipolne (E1) prijelaze, karakteristične za gigantsku dipolnu rezonanciju, pravilo sume uključuje ukupnu energijski ponderiranu snagu dipolnih prijelaza. U izovektorskom slučaju, gdje protoni i neutroni osciliraju jedni nasuprot drugih, Thomas-Reiche-Kuhnovo pravilo sume glasi [27]:

$$S(E1) = \frac{9\hbar^2}{4\pi m} \cdot \frac{NZ}{A} \quad (2.13)$$

gdje su N broj neutrona, Z broj protona, a $A = N+Z$ ukupni broj nukleona. Ovo pravilo pokazuje da je E1 snaga proporcionalna umnošku NZ , što implicira najveću snagu kod simetričnih jezgri s $N \approx Z$. Izoskalarno E1 pobuđenje, koje se javlja pri neelastičnom raspršenju bez promjene izospina, koristi modificirane oblike prijelaznih gustoća i zahtijeva dodatne analize kutnih distribucija. Dipolna polarizabilnost, definirana kao $\sum B(E1)/E_i$, također je povezana s pravilom sume i koristi se za opis globalnog odziva jezgre na vanjsko dipolno polje. E1 pravilo sume primjenjuje se i za modeliranje fotoapsorpcije u jezgrama, što je relevantno u r-procesima

u astrofizici⁸ [178]. U relativističkom RQRPA modelu samosuglasan opis IVGDR zahtijeva da se isto efektivno međudjelovanje koristi u statičkom relativističkom Hartree-Bogoliubovom (RHB) računu i u R(Q)RPA jednadžbama. Takav tretman omogućuje ispunjenje energijski ponderiranog pravila sume, dok uključivanje konfiguracija iz Diracova mora negativnih energija ima važnu ulogu u očuvanju struja i odvajanju spurioznih stanja [84]. Za izovektorski dipolni odziv ukupni EWSR često se izražava u odnosu na klasično Thomas–Reiche–Kuhnovo pravilo sume, pri čemu efektivno međudjelovanje može dovesti do faktora pojačanja iznad klasične TRK vrijednosti. Pored spomenutog, eksperimentalno dobivena ograničenja na pravila sume pružaju važne informacije za testiranje modela poput (R)QRPA, odnosno naprednijih modela koji uključuju dodatna vezanja na kompleksnije konfiguracije.

Kvadrupolna kolektivna pobuđenja (E2) opisuju promjene oblika jezgre pri kojima se gustoća periodički deformira bez promjene ukupnog volumena. Matematički oblik izoskalarnog energijski ponderiranog pravila sume za E2 prijelaze je [179]:

$$S(E2) = \frac{25\hbar^2}{4\pi m} \langle r^2 \rangle A. \quad (2.14)$$

Ovaj izraz pokazuje da je ukupna energijski ponderirana E2 snaga proporcionalna broju nukleona i srednjem kvadratnom radijusu osnovnog stanja, odnosno faktoru $A \langle r^2 \rangle$. Ova vrsta rezonancije ne mijenja volumen, već oblik jezgre, pa je izrazito osjetljiva na deformaciju i raspodjelu mase. Eksperimenti s ^{16}O , ^{40}Ca i ^{48}Ca pokazali su različite stupnjeve fragmentacije E2 snage, ovisno o strukturi i izospinskoj simetriji jezgre [19, 23, 33].

⁸U r-procesu sudjeluju jezgre s velikim neutronske viškom. Kod njih se dipolna snaga može "preseliti" na niže energije (*pygmy* dipolna rezonancija). U sudarima neutronske zvijezda (gdje se odvija r-proces), protok fotona je ogroman. Ako veći dio E1 pravila sume otpada na pobuđenja u jezgrama na niskim energijama, ona će se lakše raspasti (fotodezintegracija), što mijenja konačnu zastupljenost elemenata u galaksiji.

3 NUKLEARNI ENERGIJSKI FUNKCIONALNI GUSTOĆE

3.1 Od Hohenberg-Kohnovih do Kohn-Shamovog formalizma

Temelj teorije funkcionala gustoće (*engl. Density Functional Theory*, DFT) čine teoremi koje su 1964. godine formulirali P. Hohenberg i W. Kohn [180]. Teorija je izvorno formulirana za nehomogeni plin međudjelujućih elektrona u statičkom vanjskom potencijalu, ali je njezina univerzalnost omogućila kasniju primjenu na širok spektar mnogočestičnih sustava, uključujući i atomske jezgre. Iako se u većini literature ističu dva osnovna Hohenberg-Kohnova teorema, ukupno se mogu identificirati četiri teorijska rezultata koji se često nazivaju Hohenberg-Kohnovim teoremima. U nastavku je dan pregled dva Hohenberg-Kohnova teorema koji predstavljaju ključne stupove DFT-a.

3.1.1 Prvi Hohenberg-Kohnov teorem

U originalnom radu Hohenberga i Kohna formuliran je temeljni rezultat teorije funkcionala gustoće, tzv. 1. Hohenberg-Kohnov teorem [180]: "*The external potential $v_{ext}(\mathbf{r})$ is (to within a constant) a unique functional of $\rho(\mathbf{r})$; since, in turn, $v_{ext}(\mathbf{r})$ fixes $\hat{H}$, we see that the full many-particle ground state is a unique functional of $\rho(\mathbf{r})$.*" Drugim riječima, vanjski je potencijal $v_{ext}(\mathbf{r})$ (do na aditivnu konstantu) jednoznačno određen gustoćom osnovnog stanja $\rho(\mathbf{r})$. Budući da potencijal određuje Hamiltonijan sustava $\hat{H}$, a time i valnu funkciju osnovnog stanja Ψ_0 , očito je osnovno stanje mnogočestičnog sustava jedinstveni funkcional od $\rho(\mathbf{r})$.

Dokaz navedenog teorema iz [181] zasnovan je na metodi *reductio ad absurdum*. Pretpostavka je da postoje dva različita vanjska potencijala $v_{ext}(\mathbf{r})$ i $v'_{ext}(\mathbf{r})$, koji se razlikuju više od aditivne konstante⁹, a koji daju istu elektronsku gustoću osnovnog stanja $\rho(\mathbf{r})$. Dva vanjska potencijala $v_{ext}(\mathbf{r})$ i $v'_{ext}(\mathbf{r})$ i potencijal međudjelovanja elektrona v_{ee} dio su hamiltonijana sustava $\hat{H}$ i $\hat{H}'$ koji su definirani kao [181]

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{v}_{ext} + \hat{v}_{ee}, \quad \hat{H}' = \hat{T} + \hat{v}'_{ext} + \hat{v}_{ee}. \quad (3.1)$$

Neka su Ψ i Ψ' odgovarajuće valne funkcije osnovnog stanja s energijama E i E' . Budući da je Ψ jedinstveno osnovno stanje hamiltonijana $\hat{H}$, svaka druga valna funkcija koja mu nije identična, poput Ψ' , mora dati strogo veću očekivanu vrijednost energije od stvarne energije osnovnog

⁹Budući da dodavanje konstante vanjskom potencijalu ne mijenja valnu funkciju sustava, a time ni gustoću naboja, pri analizi jednoznačnosti vanjskog potencijala potrebno je unaprijed isključiti slučaj kada se dva potencijala razlikuju za konstantu.

stanja E . Stoga se koristeći Ψ' kao probnu funkciju za hamiltonijan $\hat{H}$ dobije sljedeći izraz:

$$E < \langle \Psi' | \hat{H} | \Psi' \rangle = \langle \Psi' | \hat{H}' | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | \hat{H} - \hat{H}' | \Psi' \rangle, \quad (3.2)$$

što se može zapisati preko razlike vanjskih potencijala s obzirom na to da su kinetička energija $\hat{T}$ i međudjelovanje $\hat{v}_{ee}$ identični u oba hamiltonijana:

$$E < \langle \Psi' | \hat{H} | \Psi' \rangle = E' + \int \rho(\mathbf{r}) [v_{ext}(\mathbf{r}) - v'_{ext}(\mathbf{r})] d\mathbf{r}. \quad (3.3)$$

Vrijedi i obratno, ako sada Ψ promatramo kao probnu funkciju za hamiltonijan $\hat{H}'$, varijacijski princip nalaže:

$$E' < \langle \Psi | \hat{H}' | \Psi \rangle = E + \int \rho(\mathbf{r}) [v'_{ext}(\mathbf{r}) - v_{ext}(\mathbf{r})] d\mathbf{r}. \quad (3.4)$$

Zbrajanjem ovih dviju nejednakosti dobiva se:

$$E + E' < E + E', \quad (3.5)$$

što je očita kontradikcija. Stoga, pretpostavka da dva različita vanjska potencijala daju istu elektronsku gustoću osnovnog stanja mora biti pogrešna. Drugim riječima, elektronska gustoća $\rho(\mathbf{r})$ jedinstveno određuje vanjski potencijal $v_{ext}(\mathbf{r})$, do na aditivnu konstantu.

Budući da je ukupna energija osnovnog stanja funkcional gustoće elektrona u osnovnom stanju, slijedi da i njezine pojedinačne komponente moraju biti izražene kao funkcionali gustoće¹⁰. Stoga se ukupna energija može zapisati u sljedećem obliku [180]:

$$E_0[\rho_0] = T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0] + E_{Ne}[\rho_0]. \quad (3.6)$$

U ovoj formulaciji koristimo oznaku E_{Ne} kako bi se eksplicitno označilo da vanjski potencijal u razmatranom sustavu potječe isključivo od privlačnog djelovanja jezgri i elektrona, odnosno $E_{Ne}[\rho_0] = \int \rho_0(r) V_{Ne}(r) dr$, što je tipično za atomske i molekulske sustave.

U ovoj fazi korisno je razdvojiti one dijelove ukupne energije koji ovise o konkretnoj konfiguraciji sustava (kao što je E_{Ne}) od onih koji imaju univerzalni karakter (neovisni o vrsti atoma ili molekule). Time se olakšava razvoj općih aproksimacija za energijski funkcional, koje su primjenjive na širok raspon sustava. Drugim riječima, može se zapisati:

$$E_0[\rho_0] = \underbrace{\int \rho_0(\mathbf{r}) V_{Ne} d\mathbf{r}}_{\text{ovisi o sustavu}} + \underbrace{T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0]}_{\text{univerzalno primjenjivo}}. \quad (3.7)$$

Grupiranjem dijelova ukupne energije sustava koji su neovisni o specifičnostima sustava u novu

¹⁰Tvrđnja je eksplicitno dokazana u idućem potpoglavlju.

veličinu, tzv. Hohenberg-Kohnov funkcional $F_{\text{HK}}[\rho_0]$ [180], dobivamo:

$$E_0[\rho_0] = \int \rho_0(\mathbf{r}) V_{\text{Ne}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + F_{\text{HK}}[\rho_0]. \quad (3.8)$$

Drugim riječima, ako se Hohenberg-Kohnov funkcional $F_{\text{HK}}[\rho]$ evaluira za neku proizvoljnu gustoću $\rho(\mathbf{r})$, on daje očekivanu vrijednost sume kinetičke energije i međuelektroonskog odbijanja:

$$F_{\text{HK}}[\rho] = \langle \Psi[\rho] | \hat{T} + \hat{v}_{\text{ee}} | \Psi[\rho] \rangle, \quad (3.9)$$

pri čemu je $\Psi[\rho]$ valna funkcija koja generira gustoću ρ i među svim takvim funkcijama daje najnižu moguću energiju. Time je funkcional $F_{\text{HK}}[\rho]$ univerzalan, u smislu da ne ovisi o vanjskom potencijalu, nego samo o međudjelovanju elektrona i kinetičkom dijelu Hamiltonijana [181].

Prvi Hohenberg-Kohnov teorem ima duboke implikacije u kvantnoj mehanici i kemiji. Umjesto da se kvantnomehanički problem formulira preko složene N -čestične valne funkcije u $3N$ -dimenzionalnom prostoru, on se sada može opisati pomoću funkcije elektronske gustoće $\rho(\mathbf{r})$ u trodimenzionalnom prostoru, čime se značajno reducira složenost problema [182]. Direktna posljedica teorema jest da se svaka opservabla stacionarnog kvantno-mehaničkog sustava (sustava u osnovnom stanju) $\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{O} | \Psi_0 \rangle$ može odrediti iz same gustoće osnovnog stanja [183]:

$$\rho_0(\mathbf{r}) \rightarrow \hat{H} \rightarrow \Psi_0 \rightarrow \langle \hat{O} \rangle. \quad (3.10)$$

Drugim riječima, gustoća osnovnog stanja jednoznačno određuje hamiltonijan i valnu funkciju osnovnog stanja, pa se opservable tog stanja mogu, barem formalno, smatrati funkcionalima gustoće.

3.1.2 Drugi Hohenberg-Kohnov teorem

Do ovog trenutka ustanovljeno je da gustoća osnovnog stanja, barem u načelu, sadrži sve potrebne informacije za izračun svih fizikalno relevantnih svojstava sustava. No, ostaje odgovoriti na pitanje odgovara li dana gustoća doista osnovnom stanju sustava. Odgovor na to pitanje daje drugi Hohenberg-Kohnov teorem, koji pruža formalnu osnovu za razlikovanje stvarne gustoće osnovnog stanja od proizvoljnih gustoća.

U izvornom obliku za 2. Hohenberg-Kohnov teorem stoji [180]: *"The functional $E_v[\rho] = F[\rho] + \int v_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ reaches its minimum for the correct ground-state density $\rho_0(\mathbf{r})$, and the minimum value is the ground-state energy E_0 ."* Drugim riječima, funkcional $E_v[\rho] = F[\rho] + \int v_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ poprima svoj minimum za točnu gustoću osnovnog stanja $\rho_0(\mathbf{r})$, a minimalna vrijednost energije odgovara energiji osnovnog stanja E_0 .

Egzaktna gustoća osnovnog stanja $\rho_0(r)$ nekog kvantno-mehaničkog sustava u određenom

vanjskom potencijalu može se dobiti minimizacijom energijskog funkcionala iz direktnog rješavanja Schrödingerove jednadžbe ili Rayleigh-Ritzovog varijacijskog principa [181]:

$$E_0 \leq E[\tilde{\rho}] = T[\tilde{\rho}] + E_{\text{Ne}}[\tilde{\rho}] + E_{\text{ee}}[\tilde{\rho}], \quad (3.11)$$

gdje je $\tilde{\rho}$ probna gustoća, a $E_0 = E[\rho_0]$. Proizvoljna gustoća $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$ po kojoj variramo mora zadovoljavati dva uvjeta [181]

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \geq 0, \quad \int \tilde{\rho}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N_e, \quad (3.12)$$

gdje je N_e fiksni broj elektrona u sustavu, čime se ograničava prostor dopuštenih probnih gustoća. Svaka varijacijska gustoća $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$ određuje vlastiti vanjski potencijal $\tilde{v}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, a time i pripadajući Hamiltonijan $\hat{H}$ te osnovnu valnu funkciju $\tilde{\Psi}$ ¹¹. Ta se valna funkcija može zatim koristiti kao probna valna funkcija unutar varijacijskog principa za originalni Hamiltonijan $\hat{H}$, definiran stvarnim vanjskim potencijalom $\hat{v}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Koristeći varijacijski princip za izvorni Hamiltonijan $\hat{H} = \hat{T} + \hat{v}_{\text{ee}} + \hat{v}_{\text{ext}}$, dobiva se

$$E[\rho_0] = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle \leq \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle. \quad (3.14)$$

Energija za danu gustoću $\tilde{\rho}$ dana je s

$$E[\tilde{\rho}] = \langle \tilde{\Psi} | \hat{T} + \hat{v}_{\text{ee}} | \tilde{\Psi} \rangle + \int \tilde{\rho}(\mathbf{r}) \hat{v}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.15)$$

što je ekvivalentno izrazu

$$E[\tilde{\rho}] = \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle \geq E[\rho_0]. \quad (3.16)$$

Jednakost vrijedi samo ako je $\tilde{\Psi} = \Psi_0$, odnosno ako je $\tilde{\rho} = \rho_0$. Time je dokazano da funkcional energije poprima minimum upravo za gustoću osnovnog stanja.

Drugi Hohenberg-Kohnov teorem postavlja temelje varijacijske formulacije DFT-a prema kojem energija osnovnog stanja sustava odgovara globalnom minimumu univerzalnog funkcionala energije $E[\rho]$. Ovaj se minimum postiže isključivo za točnu gustoću osnovnog stanja $\rho_0(\mathbf{r})$ unutar skupa svih fizički dopuštenih gustoća. U prethodnom potpoglavlju pokazano je da se funkcional energije $E[\rho]$ može zapisati kao zbroj univerzalnog dijela $F_{\text{HK}}[\rho]$, koji uključuje kinetičku energiju i međudjelovanje čestica, te vanjskog potencijala (izraz (3.7)). Iako eksplisiti oblik $F_{\text{HK}}[\rho]$ nije poznat, njegova egzistencija je ključna za konstrukciju aproksimativnih

¹¹Taj potencijal definira novi pomoćni Hamiltonijan $\hat{\tilde{H}} = \hat{T} + \hat{V}_{\text{ee}} + \hat{\tilde{V}}_{\text{ext}}$ čije je jedinstveno osnovno stanje valna funkcija $\tilde{\Psi}$, takva da vrijedi:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \langle \tilde{\Psi} | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \tilde{\Psi} \rangle. \quad (3.13)$$

Valna funkcija $\tilde{\Psi}$ sada ne mora biti osnovno stanje originalnog sustava s potencijalom $\hat{v}_{\text{ext}}$ ali je svejedno dopuštena probna funkcija u smislu varijacijskog principa. Drugim riječima, možemo je iskoristiti za procjenu gornje granice energije osnovnog stanja u izvornom sustavu.

funkcionala koji omogućuju primjene DFT-a. Varijacijski princip ovdje se primjenjuje tako da se traži gustoća koja minimizira ukupnu energiju, uz ograničenje da integral gustoće po cijelom prostoru daje ukupan broj elektrona N_e .

Analogno elektronskim sustavima, u nuklearnoj fizici se upotrebljavaju energijski funkcionali gustoće (EDF), gdje gustoća $\rho(\mathbf{r})$ uključuje protonske i neutronске doprinose, a ukupan broj čestica odgovara masenom broju $A = Z + N$. U nastavku se uvodi Kohn-Shamov formalizam, koji predstavlja ključan korak prema praktičnoj implementaciji teorije funkcionala gustoće. Ovaj pristup omogućuje konstrukciju matematičkog modela temeljenog na jednočestičnim orbitalama, uz zadržavanje univerzalnosti osnovne teorije.

3.1.3 Kohn-Shamov formalizam

Unatoč formalnoj točnosti Hohenberg-Kohnovih teorema, njihova primjena u praksi otežana je činjenicom da je funkcional $F_{\text{HK}}[\rho]$, koji obuhvaća kinetičku energiju i međučestične interakcije, u općenitom slučaju nepoznat. Kako bi se omogućila praktična implementacija teorije funkcionala gustoće, Kohn i Sham su 1965. godine predložili konstrukciju pomoćnog, fiktivnog sustava neinteragirajućih čestica, koji daje istu gustoću osnovnog stanja kao stvarni, interagirajući sustav [184].

Temeljna ideja Kohn-Shamova pristupa jest da se gustoća osnovnog stanja $\rho_0(\mathbf{r})$ može dobiti iz skupa jednočestičnih orbitala $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$, koje zadovoljavaju efektivne jednočestične Schrödingrove jednadžbe [184–186]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{KS}}[\rho](\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad (3.17)$$

pri čemu je ukupna gustoća dana kao:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (3.18)$$

Efektivni potencijal $V_{\text{KS}}[\rho](\mathbf{r})$ sadrži sve učinke interakcija i definiran je kao funkcional gustoće:

$$V_{\text{KS}}[\rho](\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_{\text{H}}[\rho](\mathbf{r}) + V_{\text{XC}}[\rho](\mathbf{r}). \quad (3.19)$$

Ovdje je $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ vanjski potencijal, koji u atomskoj i molekularnoj fizici obično predstavlja elektrostatsko privlačenje od strane jezgre, $V_{\text{H}}[\rho](\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$ je tzv. Hartreejev potencijal, koji opisuje klasično Coulombovo odbijanje između elektrona, dok je $V_{\text{XC}}[\rho](\mathbf{r})$ efektivni potencijal izmjene i korelacije, koji uključuje sve kvantnomehaničke učinke povezane s antisimetrijom valne funkcije i višestrukim korelacijama među česticama. Kohn-Shamov formalizam

omogućuje da se ukupna energija sustava napiše kao:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + E_H[\rho] + E_{XC}[\rho] + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.20)$$

pri čemu je $T_s[\rho]$ kinetička energija neinteragirajućeg sustava, a sve preostale korekcije od interakcije i kvantnih efekata sadržane su u funkcionalu izmjene i korelacija $E_{XC}[\rho]$. Valja naglasiti da gustoće korištene u Kohn-Shamovom pristupu nisu ograničene samo na one koje su v -reprezentabilne (gustoće koje su osnovna stanja nekog potencijala v_{ext}), već pripadaju širem skupu N -reprezentabilnih gustoća. To su sve gustoće koje se mogu konstruirati iz antisimetričnih valnih funkcija za N čestica, što osigurava da je prostor varijacijske optimizacije matematički dobro definiran i dovoljno širok za pronalaženje globalnog minimuma energije [181, 183]. Drugim riječima, cilj takve optimizacije je pronaći upravo onu gustoću koja minimizira funkcional energije neinteragirajućeg sustava, a koja prema Kohn-Shamovom teoremu odgovara točnoj gustoći osnovnog stanja stvarnog interagirajućeg sustava. Ova konstrukcija predstavlja elegantan kompromis između formalne teorijske točnosti i računske izvedivosti, te čini osnovu gotovo svih modernih DFT pristupa kako u atomskoj i kondenziranoj materiji, tako i u nuklearnoj fizici. Tipični primjeri takvog pristupa su nuklearni energijski funkcionali temeljeni na Skyrme-ovom kontaktnom međudjelovanju [187–189] ili Gognyjevom međudjelovanju konačnog dosega [189–191], koji su desetljećima standard za nerelativističke opise svojstava osnovnih stanja i kolektivnih pobuđenja jezgara duž cijele karte nuklida. Iako su ti modeli, barem u svojoj povijesnoj osnovi, temeljeni na Hartree-Fockovom (ili Hartree-Fock-Bogoliubovom) formalizmu s efektivnim silama, oni se u modernom se kontekstu interpretiraju kao specifične realizacije nuklearnih EDF-ova. Međutim, fokus ovog rada je na relativističkim nuklearnim EDF-ovima, koji će biti opisani u idućem potpoglavlju. Za razliku od elektronskog Kohn-Shamova DFT-a, u kojem se ukupna energija najčešće razdvaja na poznate jednočestične, Hartreejeve i doprinose članova izmjene i korelacija (vidjeti izraz (3.20)), u nuklearnim EDF-ovima takvo se razdvajanje u pravilu ne provodi eksplicitno. Zbog složene strukture efektivnog nukleon-nukleon međudjelovanja, $E_{XC}[\rho]$ najčešće su sadržani u samoj parametrizaciji funkcionala. Drugim riječima, parametri nuklearnih EDF-ova ne opisuju samo izravni doprinos srednjeg polja, nego u efektivnom smislu uključuju i dio doprinosa izmjene i korelacija koji nije izdvojen u obliku zasebnog funkcionala $E_{XC}[\rho]$.

3.2 Nuklearni relativistički energijski funkcionali gustoće

Teorija energijskih funkcionala gustoće (EDF) je vrlo fleksibilna kvantnomehanička metoda koja se koristi u mnogim područjima fizike i kemije, uključujući nuklearnu fiziku. Za razliku od tradicionalnih metoda za opis kvantnomehaničkih problema u kojima se koriste komplicirane mnogočestične valne funkcije, kod EDF-a dolazi do promicanja lokalne gustoće $\rho(r)$ u ključnu

varijablu koja služi u izračunu svih ostalih opservabli. U relativističkom formalizmu, nuklearni EDF zasnovan je najčešće na dvije varijante međudjelovanja [55]: i) nukleoni u jezgri opisani su kao Diracove čestice koje međudjeluju izmjenom mezona, i ii) kontakti oblik međudjelovanja (engl. *point-coupling*), gdje je mezonski propagator zamijenjen kontaktnim međudjelovanjem.

Relativistička teorija srednjeg polja (RMF) predstavlja fenomenološki opis nuklearnog mnogočestičnog problema, pri čemu obuhvaća tri temeljne pretpostavke [192]: i) nukleoni se smatraju točkastim česticama, ii) teorija je Lorentz invarijantna, i iii) striktno je kauzalna. U okviru RMF-a, nukleoni se modeliraju kao Diracove čestice bez unutarnje strukture. Ova aproksimacija podrazumijeva da se svi unutarnji stupnjevi slobode (poput raspodjele naboja, spina ili kvark-gluonske strukture) efektivno apsorbiraju u parametrizaciju mezonskih ili kontaktnih međudjelovanja. Posljedično, međudjelovanje između nukleona opisuje se posredovanjem efektivnih polja čija su svojstva određena eksperimentalnim podacima. Takav pristup značajno pojednostavljuje formalizam jer omogućuje izgradnju teorije u kojoj su temeljna svojstva nukleona (masa, naboj, spin i izospin) tretirana kao fiksni parametri točkastih čestica, bez potrebe za uvođenjem dodatnih stupnjeva slobode povezanih s njihovom unutarnjom strukturom [193, 194].

Druga ključna pretpostavka RMF teorije jest Lorentzova invarijantnost [195, 196], odnosno nepromjenjivost fizikalnih zakona pri transformacijama između različitih inercijalnih sustava. Ova invarijantnost osigurava konzistentnost s principima specijalne relativnosti, što je presudno pri opisu jezgara u kojima relativistički efekti značajno doprinose dinamici sustava. Konstrukcija efektivne Lagrangeove gustoće u RMF modelu temelji se na kovarijantnim operatorima i članovima međudjelovanja, čime se jamči očuvanje temeljnih simetrija poput pariteta, vremenske inverzije i globalne $U(1)$ simetrije broja čestica. Lorentzova invarijantnost također omogućuje dosljedan opis odnosa prostora i vremena te ispravnu transformaciju energije i impulsa u sustavima s relativističkom dinamikom [192, 197].

Treća temeljna pretpostavka jest kauzalnost, koja nalaže da uzročno-posljedični odnosi ne smiju biti narušeni, odnosno da se nijedna informacija ne može širiti brže od brzine svjetlosti [195]. U RMF formalizmu ovo je načelo implementirano kroz specifičan izbor propagatora i strukturu međudjelovanja, što je osobito važno pri korištenju mezonskih propagatora ili konstanti vezanja ovisnih o gustoći u kontaktnom međudjelovanju. Očuvanje kauzalnosti ključno je za formulaciju teorije u vremenskoj domeni, što dolazi do izražaja u vremenski ovisnim proširenjima kao što su TD-RMF i R(Q)RPA pristupi [198].

Klasična teorija polja kreće od određenog broja polja $q_i(x)$. Njihova dinamika određena je kroz gustoću lagrangijana $\mathcal{L}(q, \partial_\mu q, t)$ i varijacijski princip [192]:

$$\delta \int d^4x \mathcal{L}(q, \partial_\mu q, t) = 0, \quad (3.21)$$

iz kojeg slijede Euler-Lagrangeove jednačbe gibanja:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu q_j)} = 0, \quad \text{za sve } j. \quad (3.22)$$

Poveznica između relativističke teorije polja i formalizma DFT-a ostvaruje se preko tenzora energije i impulsa $T^{\mu\nu}$, koji se dobiva izravno iz gustoće lagrangijana Legendreovom transformacijom [192]:

$$T^{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu q_j)} \partial^\nu q_j - g^{\mu\nu} \mathcal{L}. \quad (3.23)$$

U stacionarnom stanju, energijski funkcional gustoće $E[\rho]$, koji je u prethodnim poglavljima definiran kroz Hohenberg-Kohnove teoreme, odgovara očekivanoj vrijednosti komponente T^{00} (gustoće energije) integrirane po cijelom prostoru:

$$E[\rho] = \int d^3r \langle \Psi | T^{00} | \Psi \rangle. \quad (3.24)$$

Na taj način, varijacijski princip za lagrangijan iz jednadžbe (3.21) postaje ekvivalentan minimizaciji energijskog funkcionala u DFT-u. U nerelativističkom obliku DFT-a funkcional se konstruira fenomenološki (npr. Skyrme), dok u RMF-u on prirodno proizlazi iz Lorentz-invarijantne gustoće lagrangijana, čime se osigurava da su sve struje i potencijali unutar funkcionala međusobno konzistentni.

3.3 *Energijski funkcionali gustoće s izmjenom mezonskih polja*

U relativističkoj teoriji srednjeg polja klasična polja $q_i(x)$ iz izraza (3.21) odnose se na valne funkcije nukleona, nekoliko mezona i elektromagnetski potencijal. Protoni i neutroni su opisani Diracovim četverokomponentnim spinorima $\psi_i(x, s, t)$ gdje je $x = (t, \mathbf{r})$, odnosno prostorno-vremenska koordinata, dok s predstavlja spinsku, a t izospinsku koordinatu [199]. Nukleoni ne međudjeluju direktno, nego kroz mezoniska polja koja su također okarakterizirana kvantnim brojevima (J, T, P) koji se odnose na ukupni moment kutne količine gibanja, izospin i paritet [192, 194].

Mezoni se u hadronskoj fizici modeliraju kao kvark-antikvark parovi s ukupnim momentom kutne količine gibanja $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Kombinacijom relativnoga orbitalnog momenta L i ukupnoga spina S definiraju se kvantni brojevi mezona, pri čemu se pseudoskalarna ($J^\pi = 0^-$) i vektorska stanja ($J^\pi = 1^-$) razlikuju po svojim transformacijskim svojstvima pod Lorentzovim transformacijama i paritetom [195, 200]. Pioni, kao najlakši pseudoskalarni mezoni ($L = 0, S = 0$), čine izotriplet ($T = 1$) električki nabijenih $\pi^\pm$ i neutralnog π^0 člana. Zbog negativnog pariteta ($P = -1$), koji proizlazi iz intrinzičnih svojstava kvarkova i prostorne simetrije $(-1)^L$, pioni na Hartreejevoj razini lome paritet osnovnog stanja jezgre, zbog čega se u standardnim RMF izračunima njihov doprinos obično zanemaruje [200].

Dva ili bilo koji drugi paran broj piona daje doprinos poljima pozitivnog pariteta. Na taj način moguće je uvesti σ -mazon s kvantnim brojevima $J = 0, T = 0$ i $P = +1$ koji u mezonskoj slici zapravo predstavlja dvopionsku rezonanciju. Riječ je o fenomenološkoj aproksimaciji

složenog objekta sastavljenog od kvark-antikvark parova i gluona s istim kvantnim brojevima. Njegova masa i konstanta sparivanja nisu izračunate, niti dobivene iz eksperimenta, već je riječ o prilagodljivim parametrima u modelu. Fenomenološki uvedenom σ -mezonu pridruženo je odgovarajuće skalarno polje $\sigma(x)$, odgovorno za privlačni dio međudjelovanja između nukleona [192, 194]. Odbojna komponenta nuklearnog međudjelovanja u okviru RMF-a proizlazi iz razmjene vektorskih mezona. U stanju gdje je $L = 0$ i $S = 1$, ukupni moment kutne količine gibanja iznosi $J = 1$, što definira vektorsku prirodu polja. Naziv "vektorski" očituje se u transformacijskim svojstvima, ova polja se pri prostornim rotacijama transformiraju kao polarni vektori, dok im je paritet, slično pseudoskalarnim mezonima s $L = 0$, negativan ($P = -1$) [195]. Najznačajniji predstavnik ove skupine je izoskalarni vektorski ω -mezon ($m_\omega \approx 783 \text{ MeV}$, $T = 0$). Na razini srednjeg polja, ω mezon generira vektorski potencijal čija je vremenska komponenta izvor snažne repulzije na malim udaljenostima. Kasnije, uključivanje trećeg mezona se pokazalo neophodnim, prenoseći odgovarajući izospin kako bi se zbog razlike u broju protona i neutrona moglo reproducirati energiju asimetrije u jezgrama. Riječ je o izovektorsko-vektorskom ρ -mezonu, s odgovarajućim poljem $\vec{\rho}(x)$, čiji su kvantni brojevi $J = 1$, $P = -1$ i $T = 1$ [192].

Kako bi se izvele jednačbe gibanja u okviru teorije srednjeg polja, razumno je započeti s relativističkim kovarijantnim lagrangijanom koji se sastoji od nukleonskih i mezonskih stupnjeva slobode te elektromagnetskog polja [192, 194],

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_N + \mathcal{L}_m + \mathcal{L}_{\text{int}}. \quad (3.25)$$

Dio gustoće lagrangijana koji opisuje slobodne nukleone dan je izrazom

$$\mathcal{L}_N = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi, \quad (3.26)$$

gdje je m masa golog nukleona (*engl. bare nucleon mass*). Mezonski dio gustoće lagrangijana dan je izrazom [192, 194]

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_m = & \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - \frac{1}{4} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu \\ & - \frac{1}{4} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \vec{\rho}^\mu - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

gdje su mase mirovanja σ -, ω - i ρ -mezona redom m_σ , m_ω i m_ρ . Tenzori mezonskih i elektromagnetskog polja dani su izrazima

$$\Omega_{\mu\nu} = \partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu, \quad \vec{R}_{\mu\nu} = \partial_\mu \vec{\rho}_\nu - \partial_\nu \vec{\rho}_\mu, \quad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu. \quad (3.28)$$

Međudjelovanje nukleona kroz mezonska polja opisano je gustoćom lagrangijana međudjelovanja [192, 194]:

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -\bar{\psi} \Gamma_m \phi_m \psi = -\bar{\psi} \Gamma_\sigma \sigma \psi - \bar{\psi} \Gamma_\omega^\mu \omega_\mu \psi - \bar{\psi} \vec{\Gamma}_\rho^\mu \vec{\rho}_\mu \psi - \bar{\psi} \Gamma_\gamma^\mu A_\mu \psi. \quad (3.29)$$

Kod prve jednakosti u izrazu (3.29) pretpostavlja se sumacija po ponavljajućem indeksu m , koji vezujemo uz pripadne mezone i foton. Prvi član u (3.29) opisuje vezanje izoskalarno-skalaranog polja σ -mezona za skalarnu gustoću nukleona, a drugi vezanje izoskalarno-vektorskog polja ω -mezona za struju nukleona, dok izospinska ovisnost nuklearne interakcije dolazi od trećeg člana u izrazu (3.29) i posljedica je vezanja izovektorskog vektorskog polja ρ -mezona za vektorsku izostruju nukleona. Boguta i Bodmer proširili su model tako da uključuje i nelinearno vezanje između σ -mezona, zamjenjujući maseni član s $\frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2$ s kvartičnim potencijalom $\frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + \frac{1}{3}g_2\sigma^3 + \frac{1}{4}g_3\sigma^4$ [201], tako da gustoća lagrangijana vezana uz σ -mezon sada izgleda:

$$\mathcal{L}^\sigma = \frac{1}{2}\partial_\mu\sigma\partial^\mu\sigma - \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 - \frac{1}{3}g_2\sigma^3 - \frac{1}{4}g_3\sigma^4. \quad (3.30)$$

Diracove jednadžbe za nukleone izvode se iz gustoće lagrangijana klasičnim varijacijskim principom opisanim izrazom (3.22) s obzirom na $\bar{\psi}$. U statičkoj aproksimaciji pretpostavlja se vremenska nezavisnost mezonskih polja i vremenska ovisnost faze $\exp(i\epsilon_i)$ spinora ψ_i . Nadalje, ograničavanjem samo na slučajeve invarijantne na vremenski obrat i na slučajeve očuvanog pariteta, kakvi su prisutni kod parno-parnih atomskih jezgara, prostornolike komponente nukleonskih struja i pripadnih mezonskih polja, kao i elektromagnetskog vektorskog potencijala iščezavaju, što vodi do sustava stacionarnih jednadžbi gibanja [192]:

$$\begin{aligned} [-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta(m + S) + V] \psi_i &= \epsilon_i \psi_i, \\ (-\Delta + m_\sigma^2)\sigma &= -g_\sigma \rho_S - g_2\sigma^2 - g_3\sigma^3, \\ (-\Delta + m_\omega^2)\omega^0 &= g_\omega \rho_V, \\ (-\Delta + m_\rho^2)\rho_3^0 &= g_\rho \rho_{TV}, \\ -\Delta A^0 &= e\rho_C. \end{aligned} \quad (3.31)$$

gdje je skalarna i nulta, odnosno vremenska komponenta vektorske vlastite energije dana izrazima:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r}) &= g_\sigma \sigma(\mathbf{r}), \\ V(\mathbf{r}) &= g_\omega \omega^0(\mathbf{r}) + g_\rho \tau_3 \rho_{TV}(\mathbf{r}) + eA^0(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.32)$$

U okviru relativističke teorije energijskog funkcionala gustoće, uloga Kohn-Shamovih orbitala pripada nukleonskim Diracovim spinorima ψ_i . Nuklearno se međudjelovanje u okviru srednjeg polja opisuje isključivo preko statičkih skalarnih polja (σ) i vremenolikih komponenta vektorskih polja (ω^0, ρ^0, A^0). Dodatno, zahtjev za očuvanjem električnog naboja i izospinske simetrije osnovnog stanja nalaže da od svih izovektorskih komponenti ρ -mezona samo komponenta ρ_3^0 ima nenultu očekivanu vrijednost. Time se osigurava da jednadžbe gibanja ne sadrže članove koji bi vodili miješanju protonskih i neutronskih stanja [192, 194]. Izoskalarna-skalarna (S), izoskalarna-vektorska (barionska) (V), treća komponenta izovektorske-vektorske (TV) i nabojna

gustoća (C) pritom su definirane kao:

$$\begin{aligned}\rho_S(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \gamma^0 \psi_i(\mathbf{r}), & \rho_V(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}), \\ \rho_{TV}(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \tau_3 \psi_i(\mathbf{r}), & \rho_C(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \frac{1 - \tau_3}{2} \psi_i(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (3.33)$$

U prethodnom izrazu suma po jednočestičnim stanjima ograničena je na zauzeta stanja pozitivne energije, odnosno na nukleonska stanja u Fermijevom moru. Stanja negativne energije iz Diracova mora, koja odgovaraju antičestičnim stupnjevima slobode, ne uključuju se eksplicitno u konstrukciju gustoća. Ova aproksimacija, u kojoj se izostavljaju eksplicitni doprinosi Diracova mora, poznata je kao aproksimacija bez mora (engl. *no-sea approximation*) [192]. U izrazu (3.33) koristi se konvencija gdje je za proton $\tau_3 = -1$, a za neutron $\tau_3 = 1$.

Ukupni energijski funkcional relativističke teorije srednjeg polja može se prema izrazima (3.23), (3.24), (3.26)–(3.30) i (3.33) eksplicitno zapisati kao zbroj kinetičke energije nukleona, energije slobodnih mezonskih i elektromagnetskih polja (uključujući nelinearne članove potencijala $U(\sigma)$) te energije međudjelovanja nukleona s navedenim poljima:

$$\begin{aligned}E[\psi, \bar{\psi}, \sigma, \omega^0, \rho_3^0, A^0] &= \sum_i^A \int d^3r \psi_i^\dagger (-i\alpha + \beta m) \psi_i \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3r [(\nabla\sigma)^2 + U(\sigma)] + \frac{1}{2} \int d^3r \left[(\nabla\omega^0)^2 + m_\omega^2 (\omega^0)^2 \right] \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3r \left[(\nabla\rho_3^0)^2 + m_\rho^2 (\rho_3^0)^2 \right] + \frac{1}{2} \int d^3r (\nabla A^0)^2 \\ &+ \int d^3r (g_\sigma \rho_S \sigma + g_\omega \rho_V \omega^0 + g_\rho \rho_3^0 + e \rho_C A^0).\end{aligned}\quad (3.34)$$

U radu T. Nikšić *et al.* [43] u relativistički Hartree-Bogoliubov model (RHB) uvedena je ovisnost mezonsko-nukleonskog vezanja o vektorskoj (barionskoj) gustoći [42], pri čemu su slobodni parametri prilagođeni svojstvima simetrične i asimetrične nuklearne materije, energijama vezanja, nabojnim i neutronske polumjerima sferičnih jezgara [43]. U slučaju vezanja σ - i ω -mezona s nukleonskim poljima korištena je ovisnost vezanja o barionskoj (vektorskoj) gustoći [44]

$$g_i(\rho) = g_i(\rho_{\text{sat}}) f_i\left(\frac{\rho}{\rho_{\text{sat}}}\right), \quad \text{za } i = \sigma \text{ i } \omega, \quad (3.35)$$

gdje je

$$f_i(x) = a_i \frac{1 + b_i (x + d_i)^2}{1 + c_i (x + d_i)^2}. \quad (3.36)$$

Ovdje je $x = \rho/\rho_{\text{sat}}$, a ρ_{sat} se odnosi na gustoću saturacije nukleona. Osam realnih parametara iz jednadžbe (3.36) koji se odnose na σ - i ω -nukleon vezanje nije u potpunosti nezavisno. Naime, postoji nekoliko ograničenja: $f_i(1) = 1$, $f_i''(1) = f_i''(0)$ i $f_i'(0) = 0$. Prvi je očit

iz izraza (3.35), drugi slijedi iz zahtjeva za smanjenjem broja slobodnih parametara modela, uz pretpostavku da funkcije skalarnog i vektorskog vezanja u točki saturacije imaju jednaku zakrivljenost. Funkcionalna ovisnost vezanja izovektorsko-vektorskog ρ -mezona i nukleona o barionskoj gustoći dana je sljedećim izrazom [44]:

$$g_\rho(\rho) = g_\rho(\rho_{\text{sat}}) \exp[-a_\rho(x - 1)]. \quad (3.37)$$

U modelima s izmjenom mezonskih polja koji imaju vezanja ovisna o gustoći, vektorska vlastita energija $V(\mathbf{r})$ poprima prošireni oblik koji, uz standardne doprinose σ , ω , ρ i fotonskih polja, uključuje i doprinos člana preraspodjele Σ_R^0 . Ovaj je član određen derivacijama konstanti vezanja po barionskoj gustoći ($\partial g_m / \partial \rho_V$), odnosno [66]

$$\Sigma_R^0 = \frac{\partial g_\sigma}{\partial \rho_V} \rho_S \sigma + \frac{\partial g_\omega}{\partial \rho_V} \rho_V \omega^0 + \frac{\partial g_\rho}{\partial \rho_V} \rho_{TV} \rho_3^0, \quad (3.38)$$

te je nužan za postizanje termodinamičke samosuglasnosti sustava. Tada vektorski dio vlastite energije postaje

$$V(\mathbf{r}) = g_\omega(\rho_V) \omega^0(\mathbf{r}) + g_\rho(\rho_V) \tau_3 \rho_3^0(\mathbf{r}) + e A^0(\mathbf{r}) + \Sigma_R^0(\mathbf{r}), \quad (3.39)$$

dok izraz za skalarni dio vlastite energije ostaje *de facto* isti (vidjeti (3.32)), a drugi integral u izrazu (3.34) umjesto $U(\sigma)$ zapravo sadrži samo član proporcionalan s $m_\sigma^2 \sigma^2$.

3.4 Kontaktni energijski funkcionali gustoće

U povijesnoj perspektivi razvoja relativističkih kontaktnih modela, rad Bürvenicha *et al.* [67] predstavlja ključno konceptualno uporište za izgradnju općega lagrangijana nuklearne interakcije. Opći efektivni lagrangijan kontaktnog tipa konstruira se u skladu s temeljnim simetrijama kvantne kromodinamike (QCD), poput Lorentzove kovarijantnosti, baždarne invarijantnosti i kiralne simetrije, analogno pristupu koji se primjenjuje u modelima temeljenima na izmjeni mezona. Navedeni pristup omogućuje sustavnu konstrukciju funkcionala temeljenoga na bilinearnim nukleonskim strujama različite Lorentzove strukture, čime se izbjegava eksplicitno uvođenje mezonskih stupnjeva slobode uz zadržavanje svih bitnih fizikalnih simetrija. Takav lagrangijan, u načelu, treba obuhvatiti sve članove međudjelovanja koji su dopušteni navedenim simetrijama. Istodobno, radi osiguravanja prediktivne moći modela, nužno je ograničiti broj slobodnih parametara na najmanju moguću mjeru.

Kontaktni funkcionali mogu se dobiti iz funkcionala s izmjenom mezona razvojem mezon-skog propagatora:

$$\frac{g_m}{-\Delta + m_m^2} \simeq \frac{g_m}{m_m^2} + g_m \frac{\Delta}{m_m^4}, \quad (3.40)$$

gdje se indeks m odnosi na σ , ω i ρ mezona. Slično se može uključiti i doprinos δ mezona u izovektorskom skalarnom kanalu, koji se u funkcionalima s izmjenom mezona najčešće ne uzima eksplicitno u obzir jer se njegov učinak djelomično može apsorbirati u parametrizaciju ostalih izovektorskih članova funkcionala [202, 203]. Na taj način dobiveni su članovi gustoće lagrangijana vezani uz četverofermionsko međudjelovanje [67]:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{4f} = & -\frac{1}{2}\alpha_S (\bar{\psi}\psi) (\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TS} (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) \\ & - \frac{1}{2}\alpha_{TV} (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi),\end{aligned}\quad (3.41)$$

kao i derivativne članove:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{der} = & -\frac{1}{2}\delta_S\partial_\nu (\bar{\psi}\psi) \partial^\nu (\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\delta_{TS}\partial_\nu (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \partial^\nu (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \\ & - \frac{1}{2}\delta_V\partial_\nu (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) \partial^\nu (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) - \frac{1}{2}\delta_{TV}\partial_\nu (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \partial^\nu (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi).\end{aligned}\quad (3.42)$$

U navedenim jednadžbama indeksi S , TS , V i TV odnose se redom na izoskalarno-skalarna, izovektorsko-vektorska, izoskalarno-vektorska i izovektorsko-vektorska polja. Kao i obično, vektori u izospinskom prostoru su označeni strelicama. Osim spomenutih skalarnih i vektorskih članova u $\mathcal{L}_{4f}$ i $\mathcal{L}_{der}$, određeni pristupi unutar relativističke teorije energijskih funkcionala gustoće s kontaktnim međudjelovanjem uvode dodatne članove kako bi se obuhvatio širi spektar fizikalnih pojava, poput spinskih i izospinskih pobuđenja, koji uključuju pseudoskalarne, pseudovektorske i tenzorske članove u izoskalarnom i izovektorskom kanalu [46, 61, 204]. U pravilu se mogu uključiti i članovi višeg reda koji odgovaraju nelinearnim članovima σ mezona, odnosno odgovarajućeg izoskalarnog-skalarnog polja poput [67]

$$\mathcal{L}_{hot}^S = -\frac{1}{3}\beta_S (\bar{\psi}\psi)^3 - \frac{1}{4}\gamma_S (\bar{\psi}\psi)^4, \quad (3.43)$$

ili izoskalarnog-vektorskog polja

$$\mathcal{L}_{hot}^V = -\frac{1}{4}\gamma_V [(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)]^2. \quad (3.44)$$

Slobodni dio efektivnog lagrangijana, koji opisuje dinamiku nukleona mase m razmatranih kao neinteragirajuće Diracove čestice, zadan je standardnim izrazom,

$$\mathcal{L}_{free} = \bar{\psi} (i\gamma_\mu\partial^\mu - m) \psi, \quad (3.45)$$

pri čemu $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$ označava adjungirani Diracov spinor. Kako bi se u model uključila elektromagnetska interakcija, prethodno navedenim članovima lagrangijana pridružuje se elektromagnetski doprinos koji opisuje vezanje nukleona na fotonsko polje A_μ te kinetičku energiju

samoga polja:

$$\mathcal{L}_{em} = -eA_\mu \bar{\psi} [(1 - \tau_3)/2] \gamma^\mu \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \quad (3.46)$$

Dok se u ranijim varijantama modela kontaktnog međudjelovanja, poput onih koje su uveli Bürvenich *et al.* [67], nelinearnost nuklearne interakcije uvodila putem viših potencija skalarnih i vektorskih polja uz fiksne iznose konstanti vezanja, suvremeni pristup u okviru modela DD-PC1 i DD-PCX nelinearnost ugrađuje izravno kroz ovisnost o barionskoj gustoći parametara međudjelovanja $\alpha(\rho)$ [45, 51]. Ovakva evolucija formalizma omogućuje znatno precizniji opis svojstava zasićenja nuklearne materije te osigurava modelu veću mogućnost predviđanja u širokom području nuklearne karte, posebice kod egzotičnih jezgri daleko od linije stabilnosti. U idućim će potpoglavljima biti detaljnije opisane navedene parametrizacije, s posebnim osvrtom na njihovu funkcionalnu ovisnost o gustoći i fizikalnu motivaciju njihova uvođenja.

3.4.1 DD-PC1 parametrizacija

Parametrizacija DD-PC1 uvedena je za funkcional koji sadrži ovisnost četverofermionskog vezanja izoskalarno-skalarnog, izoskalarno-vektorskog i izovektorsko-vektorskog kanala o barionskoj gustoći i izoskalarno-skalarni derivativni član međudjelovanja [45]:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi}(i\gamma \cdot \partial - m)\psi \\ & - \frac{1}{2}\alpha_S(\rho_V)(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V(\rho_V)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TV}(\rho_V)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \\ & - \frac{1}{2}\delta_S(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - e\bar{\psi}\gamma \cdot A \frac{(1 - \tau_3)}{2}\psi. \end{aligned} \quad (3.47)$$

U okviru relativističkih kontaktnih modela (engl. *point-coupling*) ovisnih o gustoći, konstante međudjelovanja α nisu fiksni parametri, već se tretiraju kao funkcionali barionske četverostruje $j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$. U sustavu mirovanja homogene nuklearne tvari, gdje prostorna brzina iščezava ($\mathbf{v} = 0$), ova se struja svodi na lokalnu vektorsku (barionsku) gustoću ρ_V [66]. Drugim riječima, funkcionalna ovisnost četverofermionskog vezanja (drugi, treći i četvrti član u lagrangijanu (3.47)) dana je izrazom [45]

$$\alpha_i(x) = a_i + (b_i + c_i x) e^{-d_i x}, \quad i = \{S, V, TV\}. \quad (3.48)$$

Parametri koji određuju funkcionalnu ovisnost vezanja o gustoći, a_i , b_i , c_i i d_i , odnosno konstanta vezanja derivativnog člana δ_S za DD-PC1 parametrizaciju prikazani su u tablici 3.1 [45]. U izrazu (3.48) uvedena je bezdimenzijska varijabla $x = \rho_V/\rho_{sat}$, koja definira omjer lokalne vektorske (barionske) gustoće nukleona ρ_V i gustoće saturacije nuklearne tvari ρ_{sat} [45].

Legendreovom transformacijom gustoće relativističkog lagrangijana (3.23), uz promjenu

funkcionalne ovisnosti o skupu polja $\{\bar{\psi}, \psi, \sigma, \omega^\mu, \bar{\rho}^\mu, A^\mu\}$ u modelu sa izmjenom mezona na ovisnost o $\{\bar{\psi}, \psi, A^\mu\}$ u modelu s kontaktnim međudjelovanjem, dobiva se gustoća hamiltonijana [67]:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}_{\text{free}}(\mathbf{r}, t) + \mathcal{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) + \mathcal{H}_{\text{em}}(\mathbf{r}, t) \quad (3.49)$$

s doprinosima slobodnih nukleona $\mathcal{H}_{\text{free}}$, njihova međudjelovanja $\mathcal{H}_{\text{int}}$ te elektromagnetskog polja $\mathcal{H}_{\text{em}}$:

$$\mathcal{H}_{\text{free}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger(\mathbf{r}, t) [-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m] \psi_i(\mathbf{r}, t), \quad (3.50)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\alpha_S}{2} \rho_S^2 + \frac{\delta_S}{2} \rho_S \Delta \rho_S + \frac{\alpha_V}{2} j_\mu j^\mu + \frac{\alpha_{TV}}{2} \vec{j}_{TV}^\mu \cdot \vec{j}_{TV\mu}, \quad (3.51)$$

$$\mathcal{H}_{\text{em}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - F^{0\mu} \partial_0 A_\mu + e A_\mu j_C^\mu, \quad (3.52)$$

gdje je $\alpha = \gamma^0 \gamma^i$ i $\beta = \gamma^0$ [205]. Slično kao i ranije, vektori u izospinskom prostoru su označeni strelicama, a podebljani simboli označavaju vektore u običnom trodimenzionalnom koordinatnom prostoru. U stacionarnom slučaju, uz pretpostavku vremenske neovisnosti polja, elektromagnetski dio gustoće hamiltonijana reducira se na standardni Coulombov član međudjelovanja i energiju statičkog električnog polja, dok je dio međudjelovanja $\mathcal{H}_{\text{int}}$ definiran preko bilinearnih produkata izoskalarne skalarne gustoće i vektorskih struja u oba izospinska kanala te derivativnog člana u skalarnom kanalu koji služi za opis efekata konačnog dosega sile i površinskih svojstava jezgara (drugi član u $\mathcal{H}_{\text{int}}$). Drugim riječima, $-F^{0\mu} \partial_0 A_\mu$ je dio Legendre-ove transformacije pri prijelazu s gustoće lagrangijana na gustoću hamiltonijana koji, u slučaju osnovnog stanja jezgre gdje su $\partial_0 A_\mu = 0$ i $\partial_0 \psi = 0$, iščezava. S druge strane, član $\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$ u statičkom limitu postaje $-\frac{1}{2} (\nabla A^0)^2$ i predstavlja klasični Coulombov doprinos energiji polja. Nabojna struja j_C^μ (engl. *charge current*) u relativističkom modelu uključuje samo protone doprinose.

Tablica 3.1: Parametrizacija DD-PC1 za kontaktni oblik funkcionala [45], gdje se a_i , b_i , c_i i d_i odnosi na funkcionalnu ovisnost četverofermionskog vezanja o gustoći, a δ_i na konstante vezanja derivativnih članova. Oznake S, V i TV označavaju izoskalarno-skalarni, izoskalarno-vektorski i izovektorsko-vektorski kanal.

DD-PC1	a_i [fm ²]	b_i [fm ²]	c_i [fm ²]	d_i	δ_i [fm ⁴]
S	-10.0462	-9.1504	-6.4273	1.3724	-0.815
V	5.9195	8.8637	0.0	0.6584	0.0
T V	0.0	2.2657	0.0	0.9214	0.0

Slijedeći standardni formalizam relativističke teorije srednjeg polja, iz gustoće hamiltonijana

$\mathcal{H}(\mathbf{r})$ izvodi se ukupni energijski funkcional (EDF) modela za kontaktno međudjelovanje [66]:

$$\begin{aligned}
E_{RMF}[\psi, \bar{\psi}, A_\mu] = & \sum_{i=1}^A \int d^3r \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) [-i\alpha \cdot \nabla + \beta m] \psi_i(\mathbf{r}) \\
& + \int d^3r \left[\frac{\alpha_S(\rho_V)}{2} \rho_S^2 + \frac{\delta_S}{2} \rho_S \Delta \rho_S + \frac{\alpha_V(\rho_V)}{2} j_\mu j^\mu + \frac{\alpha_{TV}(\rho_V)}{2} \rho_{TV}^2 \right] \\
& + \int d^3r \left[e \rho_C(\mathbf{r}) A^0(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \left(\nabla A^0(\mathbf{r}) \right)^2 \right]. \quad (3.53)
\end{aligned}$$

Gustoće koje se pojavljuju u definiciji energijskoga funkcionala (3.53) istovjetne su onima prethodno uvedenima u izrazima (3.33). Varijacijom navedenog funkcionala po Diracovim spinorima $\bar{\psi}$, uz pretpostavku invarijantnosti na vremenski obrat, dobiva se sustav jednočestičnih Diracovih jednadžbi koje u relativističkom formalizmu preuzimaju ulogu Kohn-Shamovih jednadžbi:

$$\left[-i\alpha \nabla + \beta (m + \Sigma_S) + \Sigma_V + \vec{\tau} \cdot \vec{\Sigma}_V \right] \psi_i = \epsilon_i \psi_i. \quad (3.54)$$

Međudjelovanje nukleona sa srednjim poljem opisano je preko vlastitih energija Σ , koje unutar Diracove jednadžbe poprimaju ulogu efektivnih potencijala. Skalarna vlastita energija Σ_S , pribrojena masi mirovanja m , definira skalarni doprinos, dok vektorski potencijal obuhvaća doprinose izoskalarnoga (Σ_V) i izovektorskoga ($\vec{\tau} \cdot \vec{\Sigma}_V$) kanala. Uz standardne doprinose vektorskih polja i Coulombova polja, vektorski potencijal u izoskalarnom kanalu nužno uključuje i vlastitu energiju preraspodjele (engl. *rearrangement self-energy*) Σ_R^0 . Navedena je komponenta izravna posljedica ovisnosti vezanja o vektorskoj gustoći $\alpha(\rho_V)$ i ključna je za očuvanje termodinamičke konzistentnosti modela. Diracov hamiltonijan i dalje ima sličan oblik kao i u izrazu (3.31), s vlastitim energijama nukleona danim nešto drugačijim izrazima:

$$\begin{aligned}
\Sigma_S &= \alpha_S(\rho_V) \rho_S - \delta_S \Delta \rho_S, \\
\Sigma_V^0 &= \alpha_V(\rho_V) \rho_V + e \frac{1 - \tau_3}{2} A^0 + \Sigma_R^0, \\
\Sigma_{TV}^0 &= \alpha_{TV}(\rho_V) \rho_{TV}, \quad (3.55)
\end{aligned}$$

gdje je doprinos članova preraspodjele vektorske prirode zbog ovisnosti vezanja isključivo o barionskoj gustoći, te iznosi

$$\Sigma_R^0 = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \alpha_S}{\partial \rho_V} \rho_S^2 + \frac{\partial \alpha_V}{\partial \rho_V} \rho_V^2 + \frac{\partial \alpha_{TV}}{\partial \rho_V} \rho_{TV}^2 \right]. \quad (3.56)$$

Od derivativnih doprinosa u odabranoj parametrizaciji funkcionala ostaje samo izoskalarno-skalarni član, dok su derivativni članovi u izoskalarno-vektorskom i izovektorsko-vektorskom kanalu izostavljeni [66, 67].

U okviru relativističkih kontaktnih modela, RMF pristup predstavlja direktnu implementaciju relativističke teorije energijskih funkcionala gustoće u kojoj je ukupna energija sustava

definirana isključivo kao funkcional nukleonskih stupnjeva slobode ($\bar{\psi}, \psi$) i elektromagnetskog polja (A^0). Minimizacijom navedenog funkcionala u okviru Kohn-Shamovog pristupa dolazi se do samosuglasnog određivanja jednočestičnih stanja i vlastitih energija, što se shematski može prikazati slijedom:

$$\psi_i^{(1)} \rightarrow \hat{\rho} \rightarrow \Sigma \rightarrow \{S, V\} \rightarrow h \rightarrow \psi_i^{(2)} \rightarrow \dots, \quad (3.57)$$

pri čemu početne Diracove valne funkcije $\psi_i^{(1)}$ generiraju gustoće i struje sadržane u operatoru gustoće $\hat{\rho}$, koje zatim određuju vlastite energije nukleona Σ . Iz tih vlastitih energija konstruiraju se skalarno i vektorsko polje S i V , koja ulaze u Diracov Hamiltonijan h , a njegovo rješenje daje novu iteraciju valnih funkcija, odnosno Kohn-Shamovih orbitala. Postupak se ponavlja sve do postizanja samosuglasne konvergencije osnovnog stanja.

3.4.2 DD-PCX parametrizacija

Parametrizacija DD-PCX [51] za funkcional s kontaktnim međudjelovanjem ovisnom o gustoći optimizirana je kako bi precizno reproducirala ne samo svojstva osnovnog stanja jezgri, već i kolektivna pobuđenja poput centroida energije izoskalarne gigantske monopolne rezonancije (ISGMR) i dipolne polarizabilnosti (α_D) u ^{208}Pb . Ova optimizacija omogućila je bolje ograničavanje parametara energije simetrije (J) i njezinog nagiba (L) pri gustoći saturacije, što je ključno za određivanje izovektorskog kanala efektivnog nuklearnog međudjelovanja, odnosno razumijevanje izovektorskih svojstava jezgri i nuklearne materije [51]. Konkretni iznosi parametara DD-PCX funkcionala navedeni su u tablici 3.2. Ovakav pristup omogućuje dosljedan opis svojstava jezgri s otvorenim ljuskama, kao i kolektivnih pobuđenja, uzimajući u obzir korelacije sparivanja putem separabilne sile [206]. DD-PCX je posebno uspješan u predviđanju debljine neutronske omotača Δr_{np} u teškim jezgrama, kao što je ^{208}Pb , gdje predviđa vrijednost od (0.159 ± 0.005) fm [51]. Ta je vrijednost bliska vrijednostima Δr_{np} dobivenima kombinacijom eksperimentalno određene električne dipolne polarizabilnosti α_D i teorijske korelacije između α_D i Δr_{np} unutar nuklearnih EDF-ova [207, 208]. Navedena vrijednost također je kompatibilna, unutar nešto većih neodređenosti, s vrijednošću $\Delta r_{np} = 0.211^{+0.054}_{-0.063}$ fm dobivenom iz protonskog elastičnog raspršenja [209]. Usporedbe s drugim funkcionalima, poput DD-PC1 [45, 47] i DD-ME2 [44], pokazuju da DD-PCX pruža poboljšanu usklađenost s eksperimentalnim podacima za niz izovektorskih svojstava, posebice dipolne polarizabilnosti, a time i u predviđanju energije simetrije i njezine ovisnosti o gustoći [51]. Ova poboljšanja čine DD-PCX korisnim funkcionalom za istraživanje egzotičnih jezgri i za razumijevanje procesa u ekstremnim uvjetima, kao što su oni u supernovama i neutronske zvijezdama.

U nastavku ovog rada fokus istraživanja bit će usmjeren na razvoj teorijskog formalizma za opis kolektivnih pobuđenja u jezgrama zasnovanog na klasi nuklearnih energijskih funkcionala s kontaktnim međudjelovanjem ovisnim o gustoći, s posebnim naglaskom na suvremene DD-

Tablica 3.2: Parametri vezanja za kontaktni oblik funkcionala DD-PCX. Oznake S, V i TV imaju isto značenje kao u tablici 3.1. Vrijednost mase nukleona je 939.0 MeV, a gustoća saturacije postavljena je na 0.152 fm^{-3} . Jakosti sparivanja opisanog separabilnim međudjelovanjem za neutrone i protone označene su s G_n i G_p [51].

DD-PCX	$a_i \text{ [fm}^2\text{]}$	$b_i \text{ [fm}^2\text{]}$	$c_i \text{ [fm}^2\text{]}$	d_i	$\delta_i \text{ [fm}^4\text{]}$
S	-10.9792	-9.0383	-5.3130	1.3791	-0.8789
V	6.4301	8.8706	–	0.6553	–
TV	–	2.9632	–	1.3098	–
Pairing: $G_n = -800.66 \text{ MeV fm}^3$, $G_p = -773.78 \text{ MeV fm}^3$					

PC1 i DD-PCX parametrizacije. U tom je okviru u idućem poglavlju razvijen formalizam relativističke aproksimacije slučajnih faza drugog reda (RSRPA), koji po prvi put dosljedno uključuje doprinose članova preraspodjele proizašle iz ovisnosti funkcija vezanja o gustoći.

4 APROKSIMACIJA SLUČAJNE FAZE

Aproksimacija slučajnih faza (engl. *random phase approximation*, RPA) predstavlja jedan od najvažnijih teorijskih pristupa u opisu kolektivnih pobuđenja višestrukih sustava, posebice u nuklearnoj fizici i fizici kondenzirane tvari. Dok Hartreejeva ili Hartree-Fockova metoda uspješno opisuje osnovno stanje sustava kroz usrednjeni potencijal, RPA ide korak dalje tretirajući kvantnomehanički sustav kao dinamički medij sposoban za koherentne oscilacije.

4.1 Standardna RPA

U ovom potpoglavlju razmatra se teorijski okvir aproksimacije slučajnih faza, koja predstavlja standardni mikroskopski pristup za opis koherentnih kolektivnih pobuđenja u nuklearnim sustavima. RPA se može interpretirati kao linearni odziv sustava na vanjsko polje ili kao metoda malih oscilacija oko ravnotežnog stanja definiranog na razini srednjeg polja [74]. U relativističkom kontekstu (RRPA), ova metoda omogućuje konzistentan opis dinamike jezgre koristeći isti funkcional gustoće ili lagrangijan koji također određuje svojstva osnovnog stanja.

Jednadžbe RPA mogu se izvesti iz nekoliko formalnih pristupa, uključujući metodu Greenovih funkcija [210], teoriju odziva [211] ili jednadžbe gibanja [73, 74, 77, 212], no najtransparentniji fizikalni uvid pruža vremenski ovisni varijacijski princip [101] primijenjen na relativistički Hamiltonijan [213]. Posljednji pristup bit će obrađen u idućih nekoliko potpoglavlja kroz Thulessov teorem, odnosno njegovo proširenje [214, 215], te razvoj samosuglasne relativističke druge aproksimacije slučajnih faza u okviru teorije energijskog funkcionala gustoće. Međutim, najprije će se razmotriti standardne RPA jednadžbe dobivene putem jednadžbi gibanja u nerelativističkom i relativističkom obliku.

4.1.1 Nerelativistički oblik

U Hartree–Fockovom (HF) pristupu osnovno stanje mnogočestičnog sustava opisuje se Slaterovom determinantom izgrađenom od jednočestičnih orbitala (vidjeti poglavlje 4.2). Ukupna energija sustava može se zapisati kao funkcional jednočestične matrice gustoće $\hat{\rho}$, pri čemu u općenitom slučaju efektivno međudjelovanje može eksplicitno ovisiti o gustoći. Tada je opći oblik energijskog funkcionala dan izrazom [74]:

$$E[\rho] = \sum_{ab} t_{ab} \rho_{ba} + \frac{1}{2} \sum_{abcd} \rho_{ca} \bar{v}_{abcd}[\rho] \rho_{db}, \quad (4.1)$$

gdje t_{ab} označava jednočestične (kinetičke) matrične elemente, a $\bar{v}_{abcd}[\rho]$ antisimetrizirane dvočestične matrične elemente koji ovise o gustoći [74]. Energija kvantnog sustava mijenja se nakon male promjene gustoće na sljedeći način,

$$E[\hat{\rho} + \delta\hat{\rho}] = \sum_{ab} t_{ab} (\hat{\rho}_{ba} + \delta\hat{\rho}_{ba}) + \frac{1}{2} \sum_{abcd} (\hat{\rho}_{ca} + \delta\hat{\rho}_{ca}) \bar{v}_{abcd}[\hat{\rho} + \delta\hat{\rho}] (\hat{\rho}_{db} + \delta\hat{\rho}_{db}), \quad (4.2)$$

odakle prva varijacija energijskog funkcionala po matrici gustoće vodi na izraz,

$$\delta E = \sum_{ab} h_{ab} \delta\rho_{ba}, \quad (4.3)$$

iz kojeg slijedi jednočestični hamiltonijan,

$$h_{ab} = t_{ab} + \sum_{cd} \bar{v}_{acbd}[\rho] \rho_{dc} + \frac{1}{2} \sum_{cdef} \rho_{ec} \frac{\partial \bar{v}_{cdef}[\rho]}{\partial \rho_{ba}} \rho_{fd}. \quad (4.4)$$

RPA jednadžbe mogu se izvesti kao linearni odziv kvantnog sustava na male vremenski ovisne perturbacije. Polazi se od vremenski ovisne matrice gustoće $\rho(t)$, koja evoluira u vremenu prema jednadžbi gibanja [74]:

$$i\hbar\partial_t\hat{\rho}(t) = [\hat{h}(\hat{\rho}) + \hat{F}(t), \hat{\rho}(t)], \quad (4.5)$$

uz pretpostavku vanjske smetnje oscilatornog oblika,

$$\hat{F}(t) = \hat{F}e^{-i\omega t} + \text{h.c.} \quad (4.6)$$

Dalje se razvijanjem gustoće $\hat{\rho}(t)$ dolazi do linearnog člana:

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}^{(0)} + \delta\hat{\rho}(t). \quad (4.7)$$

S obzirom na to da je $\partial_t\hat{\rho}^{(0)} = 0$, na lijevoj strani jednadžbe (4.5) preživljava $\delta\hat{\rho}(t)$ pa se navedena jednadžba dalje svodi na oblik,

$$i\hbar\partial_t\delta\hat{\rho} = [\hat{h}^{(0)}, \delta\hat{\rho}] + \left[\frac{\partial \hat{h}}{\partial \rho} \delta\rho, \hat{\rho}^{(0)} \right] + [\hat{f}, \hat{\rho}^{(0)}], \quad (4.8)$$

gdje je

$$\delta h_{ab} = \sum_{cd} V_{ab,cd}^{\text{res}} \delta\rho_{dc}. \quad (4.9)$$

gdje $V_{ab,cd}^{\text{res}}$ stoji za rezidualno međudjelovanje, koje ulazi u RPA jednadžbe, a dobiva se drugom varijacijom energijskog funkcionala po matrici gustoće:

$$V_{ph,h'p'}^{\text{res}} = \frac{\partial^2 E}{\partial \rho_{hp} \partial \rho_{p'h'}} = \frac{\partial h_{ph}}{\partial \rho_{p'h'}} \quad (4.10)$$

odnosno

$$V_{ph,h'p'}^{\text{res}} = \bar{v}_{ph'h'p'} + \sum_i \frac{\partial \bar{v}_{pihi}}{\partial \rho_{p'h'}} + \sum_i \frac{\partial \bar{v}_{h'ip'i}}{\partial \rho_{hp}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \bar{v}_{ijij}}{\partial \rho_{hp} \partial \rho_{p'h'}} \quad (4.11)$$

Ovdje indeksi i i j označavaju zauzeta jednočestična stanja na razini Hartree ili Hartree-Fockove aproksimacije. Prvi član predstavlja standardno rezidualno međudjelovanje između čestice i šupljine, dok preostali predstavljaju članove preraspodjele koji potječu od eksplicitne ovisnosti međudjelovanja o gustoći. U Hartree-Fockovoj bazi matrica gustoće je dijagonalna, pa su jedini neiščezavajući elementi perturbacije oblika $\delta \rho_{ph}$ i $\delta \rho_{hp}$. Stoga se uvodi sljedeći ansatz za vremensku ovisnost:

$$\begin{aligned} \delta \rho_{ph}(t) &= X_{ph} e^{-i\omega t} + Y_{ph}^* e^{i\omega t}, \\ \delta \rho_{hp}(t) &= Y_{ph} e^{-i\omega t} + X_{ph}^* e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Uvrštavanjem izraza (4.12) u jednadžbu (4.8) za lijevu stranu navedene jednadžbe dobiva se za ph i hp komponente

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \delta \rho_{ph}(t) &= \hbar\omega X_{ph} e^{-i\omega t} - \hbar\omega Y_{ph}^* e^{i\omega t}, \\ i\hbar \frac{d}{dt} \delta \rho_{hp}(t) &= \hbar\omega Y_{ph} e^{-i\omega t} - \hbar\omega X_{ph}^* e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Za ph elemente u prvom komutatoru u jednadžbi (4.8) dobiva se izraz:

$$[h^{(0)}, \delta \rho]_{ph} = \sum_k h_{pk}^{(0)} \delta \rho_{kh} - \sum_k \delta \rho_{pk} h_{kh}^{(0)}. \quad (4.14)$$

Budući da je $h^{(0)}$ dijagonalan u Hartree-Fockovoj bazi, ostaje

$$[h^{(0)}, \delta \rho]_{ph} = \varepsilon_p \delta \rho_{ph} - \delta \rho_{ph} \varepsilon_h = (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \delta \rho_{ph}, \quad (4.15)$$

odakle uvrštavanjem izraza (4.12) slijedi

$$[h^{(0)}, \delta \rho]_{ph} = (\varepsilon_p - \varepsilon_h) (X_{ph} e^{-i\omega t} + Y_{ph}^* e^{i\omega t}), \quad (4.16)$$

Analogno se za hp elemente prvog komutatora dobiva sljedeći izraz:

$$[h^{(0)}, \delta \rho]_{hp} = (\varepsilon_h - \varepsilon_p) \delta \rho_{hp} = -(\varepsilon_p - \varepsilon_h) (Y_{ph} e^{-i\omega t} + X_{ph}^* e^{i\omega t}). \quad (4.17)$$

Za ph elemente drugog komutatora dobiva se izraz:

$$[\delta h, \rho^{(0)}]_{ph} = \sum_k \delta h_{pk} \rho_{kh}^{(0)} - \sum_k \rho_{pk}^{(0)} \delta h_{kh}. \quad (4.18)$$

Kako je $\rho_{kh}^{(0)} \neq 0$ samo za zauzeta stanja i $\rho_{pk}^{(0)} = 0$, odakle

$$[\delta h, \rho^{(0)}]_{ph} = \delta h_{ph}. \quad (4.19)$$

Za hp elemente drugog komutatora analogno slijedi izraz:

$$[\delta h, \rho^{(0)}]_{hp} = \sum_k \delta h_{hk} \rho_{kp}^{(0)} - \sum_k \rho_{hk}^{(0)} \delta h_{kp} = -\delta h_{hp}. \quad (4.20)$$

Za ph komponentu u trećem komutatoru u jednadžbi (4.8) dobiva se sljedeći izraz:

$$[f, \rho^{(0)}]_{ph} = \sum_k f_{pk} \rho_{kh}^{(0)} - \sum_k \rho_{pk}^{(0)} f_{kh}. \quad (4.21)$$

Drugi član nestaje jer $\rho_{pk}^{(0)} = 0$, pa ostaje

$$[f, \rho^{(0)}]_{ph} = f_{ph} \quad (4.22)$$

Analogno za hp matrične elemente dobiva se izraz:

$$[f, \rho^{(0)}]_{hp} = -f_{hp}. \quad (4.23)$$

Za $\delta \rho_{ph}$ i $\delta \rho_{hp}$ linearizirane jednadžbe gibanja glase:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \delta \rho_{ph} &= (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \delta \rho_{ph} + \delta h_{ph} + f_{ph}, \\ i\hbar \frac{d}{dt} \delta \rho_{hp} &= (\varepsilon_h - \varepsilon_p) \delta \rho_{hp} - \delta h_{hp} - f_{hp}, \end{aligned} \quad (4.24)$$

gdje su

$$\begin{aligned} \delta h_{ph} &= \sum_{p'h'} V_{ph,p'h'}^{\text{res}} \left(Y_{p'h'} e^{-i\omega t} + X_{p'h'}^* e^{i\omega t} \right) + \sum_{p'h'} V_{ph,h'p'}^{\text{res}} \left(X_{p'h'} e^{-i\omega t} + Y_{p'h'}^* e^{i\omega t} \right), \\ \delta h_{hp} &= \sum_{p'h'} V_{hp,p'h'}^{\text{res}} \left(Y_{p'h'} e^{-i\omega t} + X_{p'h'}^* e^{i\omega t} \right) + \sum_{p'h'} V_{hp,h'p'}^{\text{res}} \left(X_{p'h'} e^{-i\omega t} + Y_{p'h'}^* e^{i\omega t} \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

i harmonijska smetnja raspisana po neiščezavajućim komponentama

$$\begin{aligned} f_{ph}(t) &= F_{ph} e^{-i\omega t} + F_{hp}^* e^{i\omega t}, \\ f_{hp}(t) &= F_{hp} e^{-i\omega t} + F_{ph}^* e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Uvrštavanjem izraza (4.13) i (4.25) dobiva se sustav jednačžbi

$$\begin{aligned}
\hbar\omega X_{ph}e^{-i\omega t} - \hbar\omega Y_{ph}^*e^{i\omega t} &= (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \left(X_{ph}e^{-i\omega t} + Y_{ph}^*e^{i\omega t} \right) + \left(F_{ph}e^{-i\omega t} + F_{hp}^*e^{i\omega t} \right) \\
&+ \sum_{p'h'} \left[V_{ph,h'p'}^{\text{res}} X_{p'h'} + V_{ph,p'h'}^{\text{res}} Y_{p'h'} \right] e^{-i\omega t} + \sum_{p'h'} \left[V_{ph,p'h'}^{\text{res}} X_{p'h'}^* + V_{ph,h'p'}^{\text{res}} Y_{p'h'}^* \right] e^{i\omega t}, \\
\hbar\omega Y_{ph}e^{-i\omega t} - \hbar\omega X_{ph}^*e^{i\omega t} &= -(\varepsilon_p - \varepsilon_h) \left(Y_{ph}e^{-i\omega t} + X_{ph}^*e^{i\omega t} \right) - \left(F_{hp}e^{-i\omega t} + F_{ph}^*e^{i\omega t} \right) \\
&- \sum_{p'h'} V_{hp,p'h'}^{\text{res}} \left(Y_{p'h'}e^{-i\omega t} + X_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) - \sum_{p'h'} V_{hp,h'p'}^{\text{res}} \left(X_{p'h'}e^{-i\omega t} + Y_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right).
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Uzimajući u obzir u prethodnoj jednačžbi samo članove uz $e^{-i\omega t}$ dolazi se do standardnih RPA jednačžbi u nerelativističkom obliku:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega X_{ph} &= (\varepsilon_p - \varepsilon_h) X_{ph} + \sum_{p'h'} V_{ph,h'p'}^{\text{res}} X_{p'h'} + \sum_{p'h'} V_{ph,p'h'}^{\text{res}} Y_{p'h'} + F_{ph}, \\
\hbar\omega Y_{ph} &= -(\varepsilon_p - \varepsilon_h) Y_{ph} - \sum_{p'h'} V_{hp,p'h'}^{\text{res}} Y_{p'h'} - \sum_{p'h'} V_{hp,h'p'}^{\text{res}} X_{p'h'} - F_{hp}.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Ekvivalentni sustav jednačžbi dobiva se uzimanjem članova uz $e^{i\omega t}$. Uvrštavanjem standardnih pokrata za matrice A i B , odnosno

$$A_{ph,p'h'} = (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \delta_{pp'} \delta_{hh'} + V_{ph,h'p'}^{\text{res}}, \quad B_{ph,p'h'} = V_{ph,p'h'}^{\text{res}}. \tag{4.29}$$

RPA jednačžbe dalje se mogu zapisati kao

$$\begin{aligned}
\sum_{p'h'} (A_{ph,p'h'} X_{p'h'} + B_{ph,p'h'} Y_{p'h'}) &= \hbar\omega X_{ph} - F_{ph}, \\
\sum_{p'h'} (B_{ph,p'h'}^* X_{p'h'} + A_{ph,p'h'}^* Y_{p'h'}) &= -\hbar\omega Y_{ph} - F_{hp}.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

odakle slijedi matrični zapis RPA jednačžbi [74]:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} - \hbar\omega \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -F \\ \bar{F} \end{pmatrix}. \tag{4.31}$$

Ovim se formalnim izvedom stiglo do prepoznatljive matrične strukture koja čini samu srž RPA teorije. Dobiveni zapis ne samo da elegantno sažima dinamiku koreliranog sustava, već postavlja čvrst temelj za daljnju analizu kolektivnih pobuđenja. U nastavku će se pokazati kako navedene jednačžbe izgledaju u svom relativističkom obliku.

4.1.2 Relativistički oblik

U relativističkom formalizmu u ref. [216] uvedena je samosuglasna formulacija RPA zasnovana na efektivnom lagrangijanu s mezon-nukleon vezanjima ovisnim o gustoći. Model je koristio relativističku Hartree aproksimaciju za osnovno stanje. Iako jednadžbe gibanja (izraz (4.5)) općenito vrijede i u relativističkom slučaju, prva razlika dolazi od toga što konfiguracijski prostor, uz parove čestica (p) i šupljina (h), uključuje i one oblika antičestica (α) i šupljina (h) pa neiščežavajući dijelovi $\delta\hat{\rho}(t)$ odgovaraju matričnim elementima $\delta\rho_{ph}$, $\delta\rho_{hp}$, $\delta\rho_{\alpha h}$ i $\delta\rho_{h\alpha}$. Ansatz (4.12), koji je vrijedio u nerelativističkom slučaju, proširuje se sljedećom vremenskom ovisnosti za perturbacije $\delta\rho_{\alpha h}$ i $\delta\rho_{h\alpha}$:

$$\delta\rho_{\alpha h}(t) = X_{\alpha h}e^{-i\omega t} + Y_{\alpha h}^*e^{i\omega t}, \quad \delta\rho_{h\alpha}(t) = Y_{\alpha h}e^{-i\omega t} + X_{\alpha h}^*e^{i\omega t}. \quad (4.32)$$

Iduća razlika dolazi od člana $\frac{\partial\hat{h}}{\partial\rho}\delta\rho$ u drugom komutatoru izraza (4.8) za koji se dobiva:

$$\frac{\partial\hat{h}}{\partial\rho}\delta\rho = \sum_{ph} \frac{\partial\hat{h}}{\partial\rho_{ph}}\delta\rho_{ph} + \frac{\partial\hat{h}}{\partial\rho_{hp}}\delta\rho_{hp} + \sum_{\alpha h} \frac{\partial\hat{h}}{\partial\rho_{\alpha h}}\delta\rho_{\alpha h} + \frac{\partial\hat{h}}{\partial\rho_{h\alpha}}\delta\rho_{h\alpha}, \quad (4.33)$$

odnosno po komponentama

$$\begin{aligned} \delta h_{ph} &= \sum_{p'h'} V_{ph,p'h'}^{\text{res}} \left(Y_{p'h'}e^{-i\omega t} + X_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{p'h'} V_{ph,h'p'}^{\text{res}} \left(X_{p'h'}e^{-i\omega t} + Y_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) \\ &\quad + \sum_{\beta h'} V_{ph,\beta h'}^{\text{res}} \left(Y_{\beta h'}e^{-i\omega t} + X_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{\beta h'} V_{ph,h'\beta}^{\text{res}} \left(X_{\beta h'}e^{-i\omega t} + Y_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right), \\ \delta h_{hp} &= \sum_{p'h'} V_{hp,p'h'}^{\text{res}} \left(Y_{p'h'}e^{-i\omega t} + X_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{p'h'} V_{hp,h'p'}^{\text{res}} \left(X_{p'h'}e^{-i\omega t} + Y_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) \\ &\quad + \sum_{\beta h'} V_{hp,\beta h'}^{\text{res}} \left(Y_{\beta h'}e^{-i\omega t} + X_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{\beta h'} V_{hp,h'\beta}^{\text{res}} \left(X_{\beta h'}e^{-i\omega t} + Y_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right), \\ \delta h_{\alpha h} &= \sum_{p'h'} V_{\alpha h,p'h'}^{\text{res}} \left(Y_{p'h'}e^{-i\omega t} + X_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{p'h'} V_{\alpha h,h'p'}^{\text{res}} \left(X_{p'h'}e^{-i\omega t} + Y_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) \\ &\quad + \sum_{\beta h'} V_{\alpha h,\beta h'}^{\text{res}} \left(Y_{\beta h'}e^{-i\omega t} + X_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{\beta h'} V_{\alpha h,h'\beta}^{\text{res}} \left(X_{\beta h'}e^{-i\omega t} + Y_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right), \\ \delta h_{h\alpha} &= \sum_{p'h'} V_{h\alpha,p'h'}^{\text{res}} \left(Y_{p'h'}e^{-i\omega t} + X_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{p'h'} V_{h\alpha,h'p'}^{\text{res}} \left(X_{p'h'}e^{-i\omega t} + Y_{p'h'}^*e^{i\omega t} \right) \\ &\quad + \sum_{\beta h'} V_{h\alpha,\beta h'}^{\text{res}} \left(Y_{\beta h'}e^{-i\omega t} + X_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right) + \sum_{\beta h'} V_{h\alpha,h'\beta}^{\text{res}} \left(X_{\beta h'}e^{-i\omega t} + Y_{\beta h'}^*e^{i\omega t} \right). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Jednočestični hamiltonijan h u relativističkom EDF formalizmu predstavlja Kohn–Shamov efektivni hamiltonijan, pri čemu se pripadne orbitale određuju rješavanjem Diracove jednadžbe sa samosuglasnim skalarnim i vektorskim poljima (vidjeti poglavlja 3.2–3.4). Harmonijsku

smetnju također je potrebno proširiti odgovarajućim α -h i h- α komponentama:

$$\begin{aligned} f_{\alpha h}(t) &= F_{\alpha h} e^{-i\omega t} + F_{h\alpha}^* e^{i\omega t}, \\ f_{h\alpha}(t) &= F_{h\alpha} e^{-i\omega t} + F_{\alpha h}^* e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Linearizirane jednadžbe gibanja slijede iz razvoja gustoće do prvog reda (izraz (4.7)), ali u proširenom konfiguracijskom prostoru, koji osim p-h sada mora uključivati i α -h konfiguracije, tako da su u relativističkom slučaju dane sljedećim izrazima:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \delta\rho_{ph} &= (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \delta\rho_{ph} + \delta h_{ph} + f_{ph}, & i\hbar \frac{d}{dt} \delta\rho_{\alpha h} &= (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_h) \delta\rho_{\alpha h} + \delta h_{\alpha h} + f_{\alpha h}, \\ i\hbar \frac{d}{dt} \delta\rho_{hp} &= (\varepsilon_h - \varepsilon_p) \delta\rho_{hp} - \delta h_{hp} - f_{hp}, & i\hbar \frac{d}{dt} \delta\rho_{h\alpha} &= (\varepsilon_h - \varepsilon_\alpha) \delta\rho_{h\alpha} - \delta h_{h\alpha} - f_{h\alpha}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

Uvrštavanjem izraza (4.12), (4.26), (4.32)–(4.35) u jednadžbe gibanja (4.36) dolazi se do sljedećeg sustava vezanih jednadžbi:

$$\begin{aligned} \hbar\omega X_{ph} &= (\varepsilon_p - \varepsilon_h) X_{ph} + \sum_{p'h'} V_{ph,h'p'}^{\text{res}} X_{p'h'} + \sum_{p'h'} V_{ph,p'h'}^{\text{res}} Y_{p'h'} \\ &\quad + \sum_{\beta h'} V_{ph,h'\beta}^{\text{res}} X_{\beta h'} + \sum_{\beta h'} V_{ph,\beta h'}^{\text{res}} Y_{\beta h'} + F_{ph}, \\ \hbar\omega Y_{ph} &= -(\varepsilon_p - \varepsilon_h) Y_{ph} - \sum_{p'h'} V_{hp,p'h'}^{\text{res}} Y_{p'h'} - \sum_{p'h'} V_{hp,h'p'}^{\text{res}} X_{p'h'} \\ &\quad - \sum_{\beta h'} V_{hp,\beta h'}^{\text{res}} Y_{\beta h'} - \sum_{\beta h'} V_{hp,h'\beta}^{\text{res}} X_{\beta h'} - F_{hp}, \\ \hbar\omega X_{\alpha h} &= (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_h) X_{\alpha h} + \sum_{p'h'} V_{\alpha h,h'p'}^{\text{res}} X_{p'h'} + \sum_{p'h'} V_{\alpha h,p'h'}^{\text{res}} Y_{p'h'} \\ &\quad + \sum_{\beta h'} V_{\alpha h,h'\beta}^{\text{res}} X_{\beta h'} + \sum_{\beta h'} V_{\alpha h,\beta h'}^{\text{res}} Y_{\beta h'} + F_{\alpha h}, \\ \hbar\omega Y_{\alpha h} &= -(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_h) Y_{\alpha h} - \sum_{p'h'} V_{h\alpha,p'h'}^{\text{res}} Y_{p'h'} - \sum_{p'h'} V_{h\alpha,h'p'}^{\text{res}} X_{p'h'} \\ &\quad - \sum_{\beta h'} V_{h\alpha,\beta h'}^{\text{res}} Y_{\beta h'} - \sum_{\beta h'} V_{h\alpha,h'\beta}^{\text{res}} X_{\beta h'} - F_{h\alpha}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Prethodni izraz predstavlja standardne RPA jednadžbe u relativističkom obliku u okviru DFT-a. Navedene jednadžbe moguće je dalje zapisati u matričnom obliku [216]:

$$\begin{pmatrix} A_{ph,ph} & A_{ph,\beta h} & B_{ph,ph} & B_{ph,\beta h} \\ A_{\alpha h,ph} & A_{\alpha h,\beta h} & B_{\alpha h,ph} & B_{\alpha h,\beta h} \\ -B_{ph,ph}^* & -B_{ph,\beta h}^* & -A_{ph,ph}^* & -A_{ph,\beta h}^* \\ -B_{\alpha h,ph}^* & -B_{\alpha h,\beta h}^* & -A_{\alpha h,ph}^* & -A_{\alpha h,\beta h}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{ph} \\ X_{\alpha h} \\ Y_{ph} \\ Y_{\alpha h} \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} X_{ph} \\ X_{\alpha h} \\ Y_{ph} \\ Y_{\alpha h} \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

uz uvođenje pokrata za αh - αh blok:

$$\begin{aligned} A_{\alpha h, \beta h'} &= (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_h) \delta_{\alpha\beta} \delta_{hh'} + V_{\alpha h, h'}^{\text{res}}, \\ B_{\alpha h, \beta h'} &= V_{\alpha h, \beta h'}^{\text{res}}, \end{aligned} \quad (4.39)$$

dok su pokrate za ph - ph blok navedene u izrazu (4.29). Za miješane blokove navodi se redom:

$$\begin{aligned} A_{ph, \beta h'} &= V_{ph, h'}^{\text{res}}, & A_{\alpha h, p' h'} &= V_{\alpha h, h' p'}^{\text{res}}, \\ B_{ph, \beta h'} &= V_{ph, \beta h'}^{\text{res}}, & B_{\alpha h, p' h'} &= V_{\alpha h, p' h'}^{\text{res}}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Na sličan se način adekvatnom zamjenom indeksa u izrazu (4.11) mogu dobiti izrazi za rezidualno međudjelovanje u αh - αh bloku, kao i u miješanim blokovima. Jedan od ključnih aspekata ove formulacije jest konzistentna primjena istoga nuklearnog funkcionala, odnosno pripadnog efektivnog međudjelovanja, kako u opisu osnovnog stanja, tako i u izračunu kolektivnih pobuđenja. Posebno važan dio formalizma je pravilno uključivanje članova preraspodjele u RRPA matrice, koji proizlaze iz ovisnosti vrhova međudjelovanja o gustoći i nužni su za očuvanje konzistentnosti teorije.

4.2 Thoulessov teorem

Poznato je da postoji određena sloboda u reprezentaciji Slaterove determinante koja opisuje kvantno-mehanički sustav u nekom stanju s obzirom na to da bilo koja linearna kombinacija valnih funkcija od kojih izgrađujemo determinantu vodi u konačnici na istu determinantu [214]. S druge strane, matrica gustoće jedinstveno određuje determinantu, ali mora zadovoljiti dodatne uvjete kako bi se doista radilo o matrici gustoće valne funkcije sustava koja je izgrađena iz determinante. Naime, riječ je o idempotentnosti $\rho^2 = \rho$ i $\text{Tr}(\rho) = N$, gdje je N ukupan broj čestica u sustavu¹².

4.2.1 Osnovni teorem

Thoulessov teorem kaže da postoji operator $e^{\hat{Z}}$ čiji je efekt transformacija fermionskog sustava iz osnovnog stanja, odnosno pripadne Slaterove determinante, u neko drugo (različito) stanje, odnosno bilo koju drugu neortogonalnu determinantu koja opisuje to stanje sustava¹³

¹²Neće svaka hermitska, pozitivno-definitna jednočestična matrica gustoće ρ s tragom $\text{Tr}(\rho) = N$ opisivati fizički prihvatljivo N -fermionsko kvantno stanje. Ovo je ujedno i sadržaj Colemanovog teorema, poznatog i kao teorem o N -reprezentabilnosti [217, 218]. Ako $\rho^2 \neq \rho$, tada se sustav ne može opisati jednom determinantom, već zahtijeva koreliranu (višedeterminantnu) valnu funkciju.

¹³Ključni uvjet u primjeni Thoulessova teorema jest da su početna i ciljana Slaterova determinanta međusobno neortogonalne, tj. mora vrijediti $\langle \Phi_0 | \Phi \rangle \neq 0$. U suprotnom slučaju, kada su $|\Phi\rangle$ i $|\Phi_0\rangle$ ortogonalne, nije

[214, 215]. Navedeno se može matematički iskazati:

$$|\Phi\rangle = e^{\hat{Z}}|\Phi_0\rangle, \quad (4.41)$$

ili analogno pomoću izraza:

$$|\Phi\rangle = \left[\exp \left(\sum_{i=1}^N \sum_{m=N+1}^{\infty} Z_{mi} a_m^\dagger a_i \right) \right] |\Phi_0\rangle. \quad (4.42)$$

Neka postoji Slaterova determinanta $|\Phi\rangle$ koja opisuje sustav od N istovrsnih fermiona. Izraženo u drugoj kvantizaciji operator stvaranja čestice $\hat{a}_i^\dagger$ stvara česticu opisanu valnom funkcijom φ_i , a operator $\hat{a}_i$ poništava česticu opisanu s φ_i . U okviru čestično-šupljinske slike (za detalje vidjeti npr. [74, 219]), takav opis odgovara linearnoj superpoziciji operatora koji stvaraju parove čestica i šupljina. Ako s $|\Phi_0\rangle$ označimo onu determinantu s konfiguracijom u kojoj imamo popunjeno prvih N energijskih nivoa:

$$|\Phi_0\rangle = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3^\dagger \dots \hat{a}_N^\dagger |0\rangle = \prod_{i=1}^N \hat{a}_i^\dagger |0\rangle, \quad (4.43)$$

gdje je $|0\rangle$ stanje "pravog" vakuuma. U pravilu je $|\Phi_0\rangle$ rezultat rješavanja Hartree-Fockovih (HF) jednadžbi. Thoulessov teorem tvrdi da je proizvoljnu N -čestičnu Slaterovu determinantu neortogonalnu s Φ_0 moguće zapisati pomoću izraza (4.41) i (4.42), pri čemu su rotacijski koeficijenti Z_{mi} jedinstveno određeni. Također, vrijedi i da je bilo koja valna funkcija dobivena izrazima (4.41) i (4.42) N -čestična Slaterova determinanta. Dokaz navedenog teorema moguće je pronaći u radovima [74, 210].

4.2.2 Relativističko proširenje teorema

Polazište relativističkog formalizma linearnog odziva unutar aproksimacije slučajnih faza temelji se na prikazu pobuđene valne funkcije kvantnomehaničkog sustava u obliku Slaterove determinante pomoću eksponencijalnog djelovanja operatora pobuđenja na referentno Hartree ili Hartree–Fockovo osnovno stanje. U relativističkom su okviru operatori pobuđenja definirani linearnom kombinacijom operatora stvaranja i poništenja koji generiraju čestično-šupljinske (p–h) konfiguracije unutar pozitivnog dijela energijskog spektra, kao i antičestično-šupljinske (α –h) konfiguracije koje uključuju stanja negativnih energija iz Diracova mora. Ova konstrukcija

moguće definirati operator eksponencijalnog oblika $e^{\hat{Z}}$ koji bi povezao ta dva stanja. Naime, $|\Phi\rangle$ tada ne pripada tzv. "eksponencijalnoj orbiti" valne funkcije $|\Phi_0\rangle$, što znači da se ne može dobiti iz $|\Phi_0\rangle$ primjenom operatora koji uključuje samo jednostavna čestično-šupljinska pobuđenja. Drugim riječima, navedeno vrijedi samo unutar povezane (neortogonalne) domene determinanti koje se mogu povezati jednostavnom orbitalnom rotacijom.

proizlazi iz relativističkog proširenja izvornog Thoulessova teorema [213],

$$|\Phi(t)\rangle = \exp\left(\sum_{ph} Z_{ph}(t) a_p^\dagger a_h + \sum_{\alpha h} Z_{\alpha h}(t) a_\alpha^\dagger a_h\right) |\Phi_0\rangle, \quad (4.44)$$

koji ostaje formalno valjan pod pretpostavkom da je referentno stanje $|\Phi_0\rangle$, koje je Slaterova determinanta, izgrađeno od rješenja Diracove jednadžbe s pozitivnom energijom. Nužnost eksplisnog uključivanja α -h konfiguracija u relativističkim modelima detaljno je razmotrena u radu [220, 221]. Operator $a_p^\dagger a_h$ pomiče nukleon iz zauzetog (šupljinskog) stanja h u nezauzeto energijski pozitivno (čestično) stanje p , dok operator $a_\alpha^\dagger a_h$ opisuje prijelaz u stanje negativne energije u Diracovom moru (antičestično stanje). Kompleksne amplitude $Z_{ph}(t)$ i $Z_{\alpha h}(t)$ sadrže vremensku evoluciju pripadnih pobuđenja te se u režimu linearnog odziva pretpostavljaju dovoljno malima [213].

Ovakva parametrizacija omogućuje varijacijski opis dinamike sustava unutar mnogostrukosti Slaterovih determinanata koje su s osnovnim stanjem $|\Phi_0\rangle$ povezani jednostrukim p - h ili α - h pobuđenjima. Posljedično, ansatz (4.44) čini temelj vremenski ovisnog relativističkog Hartreeova (RH) ili Hartree-Fockova (RHF) pristupa te, nakon linearizacije jednadžbi gibanja, izravno vodi do relativističke aproksimacije slučajne faze (RRPA). Formalna struktura ovog pristupa bliska je nerelativističkom slučaju, uz bitnu razliku da operatori stvaranja i anihilacije djeluju u Fockovu prostoru izgrađenom od Diracovih spinora te zadovoljavaju standardne fermionske antikomutacijske relacije [205, 219].

Kako bi se opisalo vezanje jednostavnih pobuđenja s kompleksnijim konfiguracijama iznad $1p$ - $1h$ i 1α - $1h$ razine, potrebno je proširiti Thoulessov operator uključivanjem višerazinskih korelacija. Konkretno, pobuđena Slaterova determinanta mora obuhvatiti barem $2p$ - $2h$ konfiguracije uz $1p$ - $1h$ i 1α - $1h$ komponente. Time se dobiva prošireni operator pobuđenja oblika [213]

$$\hat{Z}(t) = \sum_{ph} Z_{ph}^{(1)}(t) a_p^\dagger a_h + \sum_{\alpha h} Z_{\alpha h}^{(1)}(t) a_\alpha^\dagger a_h + \frac{1}{4} \sum_{pp'hh'} Z_{pp'hh'}^{(2)}(t) a_p^\dagger a_{p'}^\dagger a_h a_{h'}, \quad (4.45)$$

gdje $Z_{ph}^{(1)}(t)$, $Z_{\alpha h}^{(1)}(t)$ i $Z_{pp'hh'}^{(2)}(t)$ predstavljaju vremenski ovisne amplitude koje odgovaraju $1p$ - $1h$, 1α - $1h$ i $2p$ - $2h$ pobuđenjima. Faktor $1/4$ kompenzira dvostruko brojanje koje proizlazi iz antisimetrije koreliranih dvočestično-dvošupljinskih konfiguracija. U skladu s tim, amplitude $Z_{pp'hh'}^{(2)}$ definirane su kao antisimetrične na zamjenu čestičnih ili šupljinskih indeksa [213],

$$Z_{pp'hh'}^{(2)} = -Z_{p'phh'}^{(2)} = -Z_{pp'h'h'}^{(2)}, \quad (4.46)$$

čime se osigurava jednoznačnost konfiguracijskog prostora i ispravna normalizacija mnogočestične valne funkcije [101].

Uvrštavanjem izraza (4.45) u ansatz (4.41) dolazi do razapinjanja varijacijskog prostora koji

obuhvaća ne samo Slaterove determinante koje se od referentnog stanja razlikuju za jedno 1p–1h ili 1 α –1h pobuđenje, već i one dobivene uključivanjem 2p–2h konfiguracija. Takvo proširenje nužno je za dosljednu izvedbu SRPA u relativističkom pristupu, osobito pri opisu fragmentacije kolektivnih modova i njihova vezanja s konfiguracijama višeg reda (2p–2h).

4.3 Vremenski ovisni varijacijski princip

Kako bi se izvela vremenska evolucija amplituda pobuđenja $Z_{ph}^{(1)}(t)$, $Z_{\alpha h}^{(1)}(t)$ i $Z_{pp'hh'}^{(2)}(t)$, primjenjuje se vremenski ovisni varijacijski princip. Pritom se uzima simetrizirani oblik Dirac–Frenkelova varijacijskog pristupa, pri čemu se zahtijeva da sljedeći funkcional akcije bude stacionaran [213]:

$$\mathcal{S}[Z^{(1)}, Z^{(2)}, Z^{(1)*}, Z^{(2)*}] = \frac{1}{2} \int dt \left(\langle \Phi(t) | i\hbar \partial_t - \hat{H} | \Phi(t) \rangle + \langle \Phi(t) | -i\hbar \overleftarrow{\partial}_t - \hat{H} | \Phi(t) \rangle \right). \quad (4.47)$$

Uvjet stacionarnosti nameće se na funkcional akcije $\mathcal{S}[Z^{(1)}, Z^{(2)}, Z^{(1)*}, Z^{(2)*}]$, definiran jednadžbom (4.47), izvođenjem neovisnih varijacija po amplitudama pobuđenja $Z^{(1)}$, $Z^{(2)}$ te njihove kompleksno konjugirane veličine $Z^{(1)*}$ i $Z^{(2)*}$. Probna valna funkcija definirana je izrazom (4.41), pri čemu je operator pobuđenja $\hat{Z}(t)$ zadan jednadžbom (4.45) i uključuje konfiguracije tipa 1p–1h, 1 α –1h i 2p–2h. Relativistička gustoća hamiltonijana sustava $\hat{\mathcal{H}}$ sustavno se dobiva provedbom Legendreove transformacije gustoće lagrangijana pridruženog kvantno-mehaničkom sustavu (vidjeti izraz (3.23)). Gustoća lagrangijana, koja uključuje interakciju s kontaktnim međudjelovanjem, detaljno je opisana u poglavlju 3.4.

U granici oscilacija malih amplituda eksponencijalni operator razvija se do drugog reda, odnosno

$$|\Phi(t)\rangle = \left(1 + \hat{Z}(t) + \frac{1}{2} \hat{Z}^2(t) \right) |\Phi_0\rangle + O(\hat{Z}^3), \quad (4.48)$$

čime se osigurava dosljedan opis dinamike sustava. Konfiguracije tipa 1p–1 α –2h i 2 α –2h nisu uključene u ovaj rad, s ciljem ograničavanja dimenzije RSRPA matrice na računski prihvatljiv opseg. Razdvajanje statičkih i dinamičkih dijelova amplituda $Z_{ph}^{(1)}(t)$, $Z_{\alpha h}^{(1)}(t)$ i $Z_{pp'hh'}^{(2)}(t)$, analogno postupku iz [101], vodi do relacija [213]

$$\begin{aligned} Z_{ph}^{(1)}(t) &= C_{ph}^{(1)} + \chi_{ph}^{(1)}(t), \\ Z_{\alpha h}^{(1)}(t) &= C_{\alpha h}^{(1)} + \chi_{\alpha h}^{(1)}(t), \\ Z_{pp'hh'}^{(2)}(t) &= C_{pp'hh'}^{(2)} + \chi_{pp'hh'}^{(2)}(t), \quad \text{i c. c.} \end{aligned} \quad (4.49)$$

U Hartreeovoj ili Hartree–Fockovoj aproksimaciji statičke komponente amplituda, označene s $C_{ph}^{(1)}$ i $C_{\alpha h}^{(1)}$ iščezavaju kao izravna posljedica Brillouinova teorema, prema kojem Hamiltonijan ne spaja nekorelirano osnovno stanje s čestično–šupljinskim pobuđenjima [77, 210]. S druge

strane, amplitude $C_{pp'hh'}^{(2)}$ se u okviru spomenutih teorija u pravilu zanemaruju. Stoga osnovno stanje jezgre na razini srednjeg polja ostaje neizmijenjeno navedenim konfiguracijama, a u odzivu sustava sudjeluju isključivo dinamički dijelovi amplituda $\chi(t)$ [101].

Uvrštavanjem razvoja (4.48) u varijacijski princip (4.47), uz nametanje uvjeta stacionarnosti s obzirom na sve neovisne varijacije, dobiva se sustav vezanih linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda za $\chi^{(1)}(t)$ i $\chi^{(2)}(t)$ [213]:

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{\chi}_1(t) &= A_{1,1}\chi_1(t) + \dots + A_{1,n}\chi_n(t) + B_{1,1}\chi_1^*(t) + \dots + B_{1,n}\chi_n^*(t) \\
i\hbar\dot{\chi}_2(t) &= A_{2,1}\chi_1(t) + \dots + A_{2,n}\chi_n(t) + B_{2,1}\chi_1^*(t) + \dots + B_{2,n}\chi_n^*(t) \\
&\vdots \\
i\hbar\dot{\chi}_n(t) &= A_{n,1}\chi_1(t) + \dots + A_{n,n}\chi_n(t) + B_{n,1}\chi_1^*(t) + \dots + B_{n,n}\chi_n^*(t) \\
-i\hbar\dot{\chi}_1^*(t) &= B_{1,1}^*\chi_1(t) + \dots + B_{1,n}^*\chi_n(t) + A_{1,1}^*\chi_1^*(t) + \dots + A_{1,n}^*\chi_n^*(t) \\
-i\hbar\dot{\chi}_2^*(t) &= B_{2,1}^*\chi_1(t) + \dots + B_{2,n}^*\chi_n(t) + A_{2,1}^*\chi_1^*(t) + \dots + A_{2,n}^*\chi_n^*(t) \\
&\vdots \\
-i\hbar\dot{\chi}_n^*(t) &= B_{n,1}^*\chi_1(t) + \dots + B_{n,n}^*\chi_n(t) + A_{n,1}^*\chi_1^*(t) + \dots + A_{n,n}^*\chi_n^*(t),
\end{aligned} \tag{4.50}$$

pri čemu je korištena kompaktna notacija u kojoj indeks n poprima vrijednosti od 1 do N_{ph} za 1p–1h amplitude, od $N_{ph} + 1$ do $N_{ph} + N_{\alpha h}$ za 1α –1h amplitude, te od $N_{ph} + N_{\alpha h} + 1$ do N_{tot} za 2p–2h amplitude. Ukupan broj konfiguracija zadovoljava

$$N_{ph} + N_{\alpha h} + N_{2p2h} = N_{\text{tot}}. \tag{4.51}$$

Pretpostavljajući harmonijsku vremensku ovisnost dinamičkih dijelova [213],

$$\begin{aligned}
\chi_{ph}^{(1)}(t) &= X_{ph}^{(1)}e^{-i\omega t} + Y_{ph}^{(1)*}e^{+i\omega t}, \\
\chi_{\alpha h}^{(1)}(t) &= X_{\alpha h}^{(1)}e^{-i\omega t} + Y_{\alpha h}^{(1)*}e^{+i\omega t}, \\
\chi_{pp'hh'}^{(2)}(t) &= X_{pp'hh'}^{(2)}e^{-i\omega t} + Y_{pp'hh'}^{(2)*}e^{+i\omega t}, \quad \text{i c.c.}
\end{aligned} \tag{4.52}$$

jednadžbe gibanja mogu se zapisati u matričnom obliku koji odgovara drugoj aproksimaciji slučajne faze (SRPA):

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}, \tag{4.53}$$

gdje je

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad \text{i} \quad B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}. \tag{4.54}$$

Ova struktura matrica slijedi standardnu notaciju uvedenu u teoriji RPA i njezinim proširenjima [73]. Podmatrice A_{11} i B_{11} predstavljaju standardne RPA doprinose od 1p–1h i 1α –1h konfiguracija, uključujući i miješane blokove, dok podmatrice A_{12} i A_{21} opisuju vezanje 1p–1h

i 1α – $1h$ s $2p$ – $2h$ konfiguracijama te su odgovorne za fragmentaciju i prigušenje kolektivnih modova iznad RPA razine. Blok A_{22} sadrži međudjelovanje $2p$ – $2h$ konfiguracija i ima ključnu ulogu u daljnjem oblikovanju raspodjele spektra pobuđenja. Eksplicitni oblici matričnih elemenata ovise o izboru EDF-a, pri čemu dimenzija SRPA matrice brzo raste s brojem uključenih $2p$ – $2h$ konfiguracija, što nužno zahtijeva primjenu učinkovitih računarskih strategija.

4.4 Relativistička matrica gustoće

Koristeći činjenicu da postoji veza između osnovnog stanja i proizvoljnog pobuđenog stanja jezgre putem izraza (4.41), moguće je zapisati jednočestičnu matricu gustoće u obliku [222]

$$\begin{aligned}\rho_{ab} &\simeq \langle \Phi_0 | e^{\hat{Z}^\dagger} a_b^\dagger a_a e^{\hat{Z}} | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \left(1 + \hat{Z}^\dagger + \frac{1}{2}(\hat{Z}^\dagger)^2 + \dots \right) a_b^\dagger a_a \left(1 + \hat{Z} + \frac{1}{2}\hat{Z}^2 + \dots \right) | \Phi_0 \rangle.\end{aligned}\quad (4.55)$$

Razvijanjem po doprinosima Thoulessova operatora $\hat{Z}$ do drugog reda, jednočestična matrica gustoće poprima oblik

$$\begin{aligned}\rho_{ab} &= \langle \Phi_0 | a_b^\dagger a_a | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{Z}^\dagger a_b^\dagger a_a + a_b^\dagger a_a \hat{Z} | \Phi_0 \rangle \\ &\quad + \langle \Phi_0 | \frac{1}{2}(\hat{Z}^\dagger)^2 a_b^\dagger a_a + \hat{Z}^\dagger a_b^\dagger a_a \hat{Z} + \frac{1}{2}a_b^\dagger a_a \hat{Z}^2 | \Phi_0 \rangle.\end{aligned}\quad (4.56)$$

Prvi član predstavlja nulti red matrice gustoće, odnosno $\rho_{ab}^{(0)}$, koja je dana izrazom

$$\rho_{ab}^{(0)} = \delta_{ab} \theta(\epsilon_F - \epsilon_a) \quad \Rightarrow \quad \rho_{hh'}^{(0)} = \delta_{hh'}, \quad (4.57)$$

gdje je θ Heavisideova step-funkcija funkcija koja označava potpuno zauzeta šupljinska stanja ispod Fermijeve energije ϵ_F te prazna čestična stanja iznad nje. Očito je da u nultom redu doprinose isključivo dijagonalni elementi ispod Fermijeve razine, dok svi ostali doprinosi koji uključuju p – h , α – h , kao i p – p , p – α i α – α parove, identično iščezavaju.

Linearni doprinos Thoulessova operatora elementima jednočestične matrice gustoće odgovara drugom članu u izrazu (4.56), odnosno pripadnom bra–ket zapisu [213]

$$\begin{aligned}\rho_{ab}^{(1,1)} &= \sum_{mi} \langle \Phi_0 | Z_{mi}^{(1)*} a_i^\dagger a_m a_b^\dagger a_a + a_b^\dagger a_a Z_{mi}^{(1)} a_m^\dagger a_i | \Phi_0 \rangle, \\ \rho_{ab}^{(1,2)} &= \frac{1}{2} \sum_{mni} \langle \Phi_0 | Z_{mni}^{(2)*} a_i^\dagger a_j^\dagger a_n a_m a_b^\dagger a_a + a_b^\dagger a_a Z_{mni}^{(2)} a_m^\dagger a_n^\dagger a_j a_i | \Phi_0 \rangle.\end{aligned}\quad (4.58)$$

Iz navedenih izraza slijedi

$$\begin{aligned}\delta\rho_{hp}^{(1)} &= Z_{ph}^{(1)*}, & \delta\rho_{h\alpha}^{(1)} &= Z_{\alpha h}^{(1)*}, \\ \delta\rho_{ph}^{(1)} &= Z_{ph}^{(1)}, & \delta\rho_{\alpha h}^{(1)} &= Z_{\alpha h}^{(1)}.\end{aligned}\quad (4.59)$$

Doprinos konfiguracija tipa 2p–2h (drugi bra–ket u izrazu (4.58)) iščezava, budući da se nakon kanonske transformacije operatora uvijek pojavljuju barem dva operatora stvaranja čestica (ili šupljina), od kojih se barem jedan ne može upariti s odgovarajućim operatorom anihilacije. Drugim riječima, 2p–2h konfiguracije ne doprinose u prvom redu razvoju matrice gustoće $\rho_{ab}^{(1)}$. Stoga vrijedi

$$\begin{aligned}\delta\rho_{pp'}^{(1)} &= \delta\rho_{\alpha p'}^{(1)} = \delta\rho_{p\alpha'}^{(1)} = \delta\rho_{\alpha\alpha'}^{(1)} = 0, \\ \delta\rho_{hh'}^{(1)} &= 0.\end{aligned}\quad (4.60)$$

Nadalje, važno je istaknuti jednoznačnu korespondenciju između perturbacija matrice gustoće prvog reda $\delta\rho^{(1)}$ i amplituda koje opisuju čestično–šupljinske (p–h) i antičestično–šupljinske (α –h) konfiguracije (izraz (4.59)). Upravo ta relacija služi kao formalni most između pristupa opisanog u poglavlju 4.1.2 i formalizma koji se razmatra u ovom dijelu rada. Time se potvrđuje da su oba pristupa, iako polaze od različitih teorijskih osnova, u konačnici fizikalno ekvivalentna.

Kvadratni doprinos u $\hat{Z}$ može se izraziti bra–ket zapisom [222]

$$\langle\Phi_0|\frac{1}{2}a_b^\dagger a_a \hat{Z}^2 + \hat{Z}^\dagger a_b^\dagger a_a \hat{Z} + \frac{1}{2}(\hat{Z}^\dagger)^2 a_b^\dagger a_a |\Phi_0\rangle. \quad (4.61)$$

Jedini neiščezavajući doprinos potječe iz drugog člana u izrazu (4.61), iz kojeg slijede doprinosi drugog reda matrice gustoće unutar prostora $\{1p-1h\} \oplus \{1\alpha-1h\} \oplus \{2p-2h\}$ [213]:

$$\begin{aligned}\delta\rho_{ph}^{(2)} &= \sum_{mi} Z_{mi}^{(1)*} Z_{mpih}^{(2)}, & \delta\rho_{hp}^{(2)} &= \sum_{mi} Z_{mi}^{(1)} Z_{mpih}^{(2)*}, \\ \delta\rho_{pp'}^{(2)} &= \sum_i Z_{pi}^{(1)*} Z_{p'i}^{(1)} + \frac{1}{2} \sum_{m,i \neq j} Z_{mpi}^{(2)*} Z_{mp'ij}^{(2)}, \\ \delta\rho_{\alpha\alpha'}^{(2)} &= \sum_i Z_{\alpha i}^{(1)*} Z_{\alpha' i}^{(1)}, & \delta\rho_{\alpha h'}^{(2)} &= \delta\rho_{h\alpha'}^{(2)} = 0, \\ \delta\rho_{\alpha p'}^{(2)} &= \sum_i Z_{\alpha i}^{(1)*} Z_{p' i}^{(1)}, & \delta\rho_{p\alpha'}^{(2)} &= \sum_i Z_{pi}^{(1)*} Z_{\alpha' i}^{(1)}, \\ \delta\rho_{hh'}^{(2)} &= - \sum_m Z_{mh}^{(1)*} Z_{mh'}^{(1)} - \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \sum_j Z_{mnh}^{(2)*} Z_{mnh'j}^{(2)}.\end{aligned}\quad (4.62)$$

Na razini standardne RPA ne postoji njihov doprinos jer se formalizam temelji isključivo na harmonijskoj aproksimaciji linearnog odziva. U tom pristupu, sustav se opisuje samo perturbacijama prvog reda ($\delta\rho^{(1)}$), dok se članovi drugog reda i korelacije koje uključuju 2p–2h konfiguracije (opisane amplitudama $Z^{(2)}$) sustavno zanemaruju.

4.5 Opći izrazi za elemente RSRPA matrice

Elementi RSRPA matrice u okviru DFT-a izvode se iz druge derivacije energije sustava u proizvoljnom stanju s obzirom na amplitude $Z_{ph}^{(1)}(t)$, $Z_{\alpha h}^{(1)}(t)$, $Z_{pp'hh'}^{(2)}(t)$ i njihove kompleksno konjugirane veličine. U relativističkom okviru sljedeća je izvedba općenita te vrijedi neovisno o tome razmatra li se efektivno međudjelovanje temeljeno na izmjeni mezona ili kontaktnim međudjelovanjem konstruiranim iz gustoća i struja bilinearnih u Diracovom spinorskom polju. U nastavku se navode eksplicitni izrazi za blokove RSRPA matrice A_{11} , A_{12} i A_{22} koji, s obzirom na doprinos konfiguracija, imaju sljedeći oblik [213, 223, 224]:

$$A_{11} = \begin{pmatrix} A_{ph;p'h'} & A_{ph;\alpha'h'} \\ A_{\alpha h;p'h'} & A_{\alpha h;\alpha'h'} \end{pmatrix}, \quad A_{12} = \begin{pmatrix} A_{ph;p'_1p'_2h'_1h'_2} \\ A_{\alpha h;p'_1p'_2h'_1h'_2} \end{pmatrix}, \quad A_{22} = A_{p_1p_2h_1h_2;p'_1p'_2h'_1h'_2}. \quad (4.63)$$

Svi doprinosi A_{11} , uključujući i članove preraspodjele, te direktni doprinosi A_{12} i A_{22} matričnih elemenata proizlaze iz članova drugog reda u razvoju očekivane vrijednosti hamiltonijana sustava u proizvoljnom vremenski ovisnom stanju $\Phi(t)$, koje je konstruirano djelovanjem proširenog Thoulessova operatora $\hat{Z}$ na referentno stanje Φ_0 , odnosno [101, 222]:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Phi \rangle^{(2)} \simeq & \sum_{mni} Z_{mi}^* Z_{ni} \lambda_{mn} [\rho] - \sum_{mij} Z_{mi}^* Z_{mj} \lambda_{ji} [\rho] \\ & + \sum_{mni} \hat{Z}_{mni}^* Z_{mi} \lambda_{nj} [\rho] + \sum_{mni} Z_{mi}^* \hat{Z}_{mni} \lambda_{jn} [\rho] \\ & + \sum_{mnp(i<j)} \hat{Z}_{mni}^* \hat{Z}_{mpij} \lambda_{np} [\rho] - \sum_{(m<n)ijk} \hat{Z}_{mni}^* \hat{Z}_{mnik} \lambda_{kj} [\rho] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{mni} Z_{mi}^* Z_{nj}^* \bar{v}_{mni} [\rho] + \frac{1}{2} \sum_{mni} Z_{mi} Z_{nj} \bar{v}_{ijn} [\rho] + \sum_{mni} Z_{mi}^* Z_{nj} \bar{v}_{mjn} [\rho] \\ & - \sum_{mni(j<k)} Z_{mi}^* \hat{Z}_{mnjk} \bar{v}_{jkin} [\rho] + \sum_{m(n<p)ij} Z_{mi}^* \hat{Z}_{npij} \bar{v}_{mjnp} [\rho] \\ & - \sum_{mni(j<k)} \hat{Z}_{mnjk}^* Z_{mi} \bar{v}_{injk} [\rho] + \sum_{m(n<p)ij} \hat{Z}_{npij}^* Z_{mi} \bar{v}_{nmpj} [\rho] \\ & + \sum_{(m<n)(i<j)(o<p)} \hat{Z}_{mni}^* \hat{Z}_{opij} \bar{v}_{mnop} [\rho] + \sum_{(m<n)(i<j)(k<l)} \hat{Z}_{mni}^* \hat{Z}_{mnkl} \bar{v}_{klji} [\rho] \\ & - \sum_{mnpijk} \hat{Z}_{mni}^* \hat{Z}_{npkj} \bar{v}_{mkip} [\rho] + \alpha h \text{ i miješani blokovi} \\ & + \text{doprinosi nepovezanih dijagrama,} \end{aligned} \quad (4.64)$$

gdje je polje

$$\lambda_{ab} = t_{ab} + \sum_k \bar{v}_{akbk}. \quad (4.65)$$

Na razini Hartree ili Hartree-Fockove aproksimacije $\lambda_{mn} = \epsilon_m \delta_{mn}$, $\lambda_{\alpha\beta} = \epsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta}$ i $\lambda_{ij} = \epsilon_i \delta_{ij}$, dok sve ostale kombinacije, odnosno λ_{mi} i $\lambda_{\alpha i}$, iščezavaju. U drugom redu razvoja operatora $\hat{Z}$

pojavljaju se, uz povezane (engl. *uncutted* ili *linked*), i nepovezani (engl. *cutted* ili *unlinked*) doprinosi [219, 225]. Budući da se fizički relevantna veličina računa kao normirano očekivanje, odnosno $\langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$, svi nepovezani doprinosi u drugom i višim redovima točno se poništavaju s odgovarajućim članovima koji potječu iz razvoja norme $\langle \Psi | \Psi \rangle$. Stoga je u skladu s teoremom o povezanosti dovoljno zadržati samo povezane dijagrame, dok se nepovezani doprinosi u nastavku zanemaruju [219, 225, 226].

Blok A_{11} odgovara standardnoj (R)TDA matrici, odnosno podmatrici A u (R)RPA formalizmu, te uključuje pobuđenja tipa čestica–šupljina (p – h). Ovi se elementi dobivaju iz izraza [213, 224]

$$[A_{11}]_{ph;p'h'} = \frac{\partial^2 \langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle}{\partial Z_{p'h'} \partial Z_{ph}^*} \bigg|_{Z_{ph}, Z_{p_1 p_2 h_1 h_2} \text{ i c.c.} = 0} . \quad (4.66)$$

Pritom se dvočestična rezidualna interakcija $\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}$ razvija do drugog reda po gustoći [222]

$$\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} = \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}[\rho_0] + \sum_{ab} \frac{\partial \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}}{\partial \rho_{ab}} \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}} d\rho_{ab} + \frac{1}{2} \sum_{abcd} \frac{\partial^2 \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}}{\partial \rho_{ab} \partial \rho_{cd}} \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}} d\rho_{ab} d\rho_{cd}, \quad (4.67)$$

te vrijedi

$$d\rho_{ab} = \delta\rho_{ab}^{(1)} + \delta\rho_{ab}^{(2)}. \quad (4.68)$$

Indeksi a, b, c, d te $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ u izrazima (4.67) i (4.68) općenito označavaju čestična, šupljinska ili antičestična stanja. Izračun očekivane vrijednosti hamiltonijana, odnosno $\langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle$, provodi se primjenom Wickovih kontrakcija, koje omogućuju sustavno pojednostavljivanje produkata operatora stvaranja i poništenja. U tu svrhu razvijen je algoritam i računalni kod FWC-QMBFS [227]¹⁴. Uvrštavanjem (4.67) i (4.68) u izraz (4.66) dobiva se

$$\begin{aligned} [A_{11}]_{ph;p'h'} = & (\epsilon_p - \epsilon_h) \delta_{pp'} \delta_{hh'} + \bar{v}_{ph'hp'} + \sum_j \frac{\partial \bar{v}_{pjhj}[\rho]}{\partial \rho_{p'h'}} \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}} \\ & + \sum_j \frac{\partial \bar{v}_{h'jp'j}[\rho]}{\partial \rho_{hp}} \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \bar{v}_{ijij}[\rho]}{\partial \rho_{hp} \partial \rho_{p'h'}} \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

gdje ϵ_i označavaju jednočestične Diracove energije. Prvi član u izrazu (4.69) odgovara razlici neperturbiranih energijskih nivoa para čestica–šupljina, drugi standardnom dvočestičnom rezidualnom međudjelovanju, dok preostali članovi predstavljaju članove preraspodjele (engl. *rearrangement terms*) i postoje u okviru DFT-a gdje su vezanja eksplicitno ovisna o gustoći, kao što je to npr. u slučaju DD-PCX funkcionala. Jedan od podblokova matrice A_{11} , koji opisuju vezanje između konfiguracija $1p$ – $1h$ i 1α – $1h$, dobiva se varijacijom funkcionala akcije

¹⁴U radu [227] analizirana su svojstva potpunih Wickovih kontrakcija kroz teoriju grafova i grupa, uz dokaz izomorfizma između strukture grafova i geometrijskih objekata [227]. Na temelju uočenih simetrija razvijen je učinkovit algoritam za izračun očekivanih vrijednosti složenih operatora.

s obzirom na $Z_{p'h'}$ i $Z_{\alpha h}^*$, što vodi do izraza

$$[A_{11}]_{\alpha h, p'h'} = \bar{v}_{\alpha h' h p'} + \sum_j \frac{\partial \bar{v}_{\alpha j h j}[\rho]}{\partial \rho_{p'h'}} \Big|_{\rho=\rho^{(0)}} + \sum_j \frac{\partial \bar{v}_{h' j p' j}[\rho]}{\partial \rho_{h\alpha}} \Big|_{\rho=\rho^{(0)}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \bar{v}_{ijij}[\rho]}{\partial \rho_{h\alpha} \partial \rho_{p'h'}} \Big|_{\rho=\rho^{(0)}}. \quad (4.70)$$

Slično kao i ranije, prvi član odgovara standardnom doprinosu rezidualnog međudjelovanja, dok preostala tri člana u izrazu (4.70) predstavljaju članove preraspodjele. Izrazi (4.69) i (4.70) odgovaraju A matričnim elementima koji su proizašli iz standardnih RRPA jednadžbi izvedenih primjenom metode jednadžbi gibanja u okviru teorije linearnog odziva (vidjeti poglavlje 4.1.2), čime se ujedno naglašava ekvivalentnost oba formalna pristupa. Analogni izrazi dobivaju se i za preostale podblokove matrice A_{11} odgovarajućom zamjenom indeksa.

Blok A_{12} opisuje vezanje između $1p-1h$, odnosno $1\alpha-1h$ i $2p-2h$ konfiguracija. Za prvi slučaj, koji se dobiva varijacijom $\langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle$ s obzirom na Z_{ph}^* i $\hat{Z}_{p_1 p_2 h_1 h_2}$, vrijedi [213]

$$[A_{12}]_{ph; p_1 p_2 h_1 h_2} = \mathcal{A}(h_1, h_2) \delta_{hh_1} \bar{v}_{ph_2 p_1 p_2} [\rho^{(0)}] - \mathcal{A}(p_1, p_2) \delta_{pp_1} \bar{v}_{h_1 h_2 h p_2} [\rho^{(0)}] + \frac{\partial \bar{v}_{h_1 h_2 p_1 p_2} [\rho]}{\partial \rho_{hp}} \Big|_{\rho=\rho^{(0)}}. \quad (4.71)$$

Analogno, za vezanje $1\alpha-1h$ i $2p-2h$ konfiguracija, dobiva se sljedeći izraz:

$$[A_{12}]_{\alpha h; p_1 p_2 h_1 h_2} = \mathcal{A}(h_1, h_2) \delta_{hh_1} \bar{v}_{\alpha h_2 p_1 p_2} [\rho^{(0)}] + \frac{\partial \bar{v}_{h_1 h_2 p_1 p_2} [\rho]}{\partial \rho_{h\alpha}} \Big|_{\rho=\rho^{(0)}}. \quad (4.72)$$

Dok prvi i drugi član u izrazu (4.71), zajedno s prvim članom izraza (4.72), čine standardni doprinos dvočestičnom rezidualnom međudjelovanju, preostali članovi, treći u (4.71) te drugi u (4.72), predstavljaju doprinose preraspodjele svojstvene formalizmu DFT-a, te je za njihov izračun potrebno uzeti u obzir i prvi red razvoja Thoulessova operatora u izračunu očekivane vrijednosti hamiltonija međudjelovanja, odnosno [101, 222]

$$\begin{aligned} \langle \Phi | V | \Phi \rangle^{(1)} &= \sum_{mij} Z_{mi}^* \bar{v}_{mji} + \frac{1}{4} \sum_{mni} \hat{Z}_{mni}^* \bar{v}_{mni} \\ &\quad \sum_{mij} \bar{v}_{ijm} Z_{mi} + \frac{1}{4} \sum_{mni} \bar{v}_{ijn} \hat{Z}_{mni}. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Pritom je operator antisimetrizacije definiran kao $\mathcal{A}(a, b) = 1 - P(a, b)$, gdje je P operator permutacije indeksa a i b koji uključuju skup kvantnih brojeva.

Blok A_{22} sadrži matrične elemente između $2p-2h$ konfiguracija, a slijedi iz varijacije očekivane vrijednosti hamiltonijana $\hat{H}$ po amplitudama $Z_{p_1 p_2 h_1 h_2}^*$ i $Z_{p'_1 p'_2 h'_1 h'_2}$, te se može zapisati kao

[213]

$$\begin{aligned}
[A_{22}]_{p_1 p_2 h_1 h_2; p'_1 p'_2 h'_1 h'_2} = & \delta_{p_1 p'_1} \delta_{p_2 p'_2} \delta_{h_1 h'_1} \delta_{h_2 h'_2} (\epsilon_{p_1} + \epsilon_{p_2} - \epsilon_{h_1} - \epsilon_{h_2}) \\
& + \mathcal{A}(h_1, h_2) \delta_{h_1 h'_1} \delta_{h_2 h'_2} \bar{v}_{p_1 p_2 p'_1 p'_2} + \mathcal{A}(p_1, p_2) \delta_{p_1 p'_1} \delta_{p_2 p'_2} \bar{v}_{h'_1 h'_2 h_1 h_2} \\
& + \mathcal{A}(p_1, p_2) \mathcal{A}(h_1, h_2) \mathcal{A}(p'_1, p'_2) \mathcal{A}(h'_1, h'_2) \delta_{p_1 p'_1} \delta_{h_2 h'_2} \bar{v}_{p_2 h'_1 p'_2 h_1} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{hh'} \mathcal{A}(p_1, p_2) \mathcal{A}(p'_1, p'_2) \left. \frac{\partial \bar{v}_{hh'hh'}[\rho]}{\partial \rho_{p'_2 p_2}} \right|_{\rho=\rho^{(0)}} \delta_{p_1 p'_1} \delta_{h_1 h'_1} \delta_{h_2 h'_2} \\
& - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \mathcal{A}(h_1, h_2) \mathcal{A}(h'_1, h'_2) \left. \frac{\partial \bar{v}_{hh'hh'}[\rho]}{\partial \rho_{h_1 h'_1}} \right|_{\rho=\rho^{(0)}} \delta_{p_1 p'_1} \delta_{p_2 p'_2} \delta_{h_2 h'_2}.
\end{aligned} \tag{4.74}$$

Prvi član u izrazu (4.74) predstavlja razliku neperturbiranih energija dviju čestica i dviju šupljina. Iduća tri člana u izrazu (4.74) redom predstavljaju antisimetrizirani standardni doprinos rezidualnog međudjelovanja između čestica, šupljina i parova čestica-šupljina. Posljednja dva člana predstavljaju antisimetrizirane doprinose članova preraspodjele i postoje isključivo u okviru DFT-a. Zanemarivanjem međudjelovanja između 2p–2h konfiguracija matrica A_{22} poprima dijagonalni oblik, čime se definira dijagonalna RSRPA aproksimacija [146, 223]:

$$[A_{22}^{\text{diag}}]_{p_1 p_2 h_1 h_2; p'_1 p'_2 h'_1 h'_2} = \delta_{p_1 p'_1} \delta_{h_1 h'_1} \delta_{p_2 p'_2} \delta_{h_2 h'_2} (\epsilon_{p_1} + \epsilon_{p_2} - \epsilon_{h_1} - \epsilon_{h_2}), \tag{4.75}$$

u nastavku označena kao RSRPA(d).

Slično kao i kod matrice A , elementi korelacijske matrice B organizirani su u blokove koji povezuju različite p–h i 2p–2h konfiguracije [213]:

$$B_{11} = \begin{pmatrix} B_{ph\overline{p'h'};0} & B_{pha'\overline{h'};0} \\ B_{\alpha hp\overline{h'};0} & B_{\alpha ha'\overline{h'};0} \end{pmatrix}, \quad B_{12} = \begin{pmatrix} B_{ph\overline{p'_1 p'_2 h'_1 h'_2};0} \\ B_{\alpha hp\overline{p'_1 p'_2 h'_1 h'_2};0} \end{pmatrix}, \quad B_{22} = 0. \tag{4.76}$$

U okviru proširenog Thoulessova teorema koji vodi na RSRPA jednadžbe, osnovno stanje predstavlja nekorelirani Hartreejevim ili Hartree–Fockovim vakuumom, stoga B_{22} nužno iščezava. Drugim riječima, za neiščezavajuće kontrakcije dvaju anihilacijskih 2p–2h operatora nužno je da osnovno stanje mora biti korelirano, odnosno sadržavati 2p–2h komponente, što ovdje nije slučaj. Stanja označena simbolima $\overline{p_1 h_1}$ i $\overline{p_1 p_2 h_1 h_2}$ predstavljaju R -konjugirane p–h i 2p–2h konfiguracije definirane posredstvom simetrije obrata vremena [73]. U sferičnom slučaju, navedena simetrija implicira da se konjugirane konfiguracije razlikuju isključivo u predznaku kvantnog broja projekcije ukupnog angularnog momenta, dok svi ostali kvantni brojevi ostaju nepromijenjeni [73, 213]. Blok B_{11} unutar DFT formalizma obuhvaća korelacije unutar 1p–1h

konfiguracijskog potprostora [213, 223]:

$$\begin{aligned} [B_{11}^*]_{0;p_1 h_1 p_2 h_2} &= \frac{1}{2} \sum_{hh'} \left[\frac{\partial^2 \bar{v}_{hh'hh'}[\rho]}{\partial \rho_{p_1 h_1} \partial \rho_{p_2 h_2}} \right] \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}} + \sum_h \left[\frac{\partial \bar{v}_{h_1 h p_1 h}[\rho]}{\partial \rho_{p_2 h_2}} \right] \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}} \\ &+ \sum_h \left[\frac{\partial \bar{v}_{h_2 h p_2 h}[\rho]}{\partial \rho_{p_1 h_1}} \right] \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}} + \bar{v}_{h_2 h_1 p_2 p_1}[\rho_0] \end{aligned} \quad (4.77)$$

S druge strane, nedijagonalni blokovi B_{12} i B_{21} pojavljuju se isključivo u okviru DFT pristupa, budući da su generirani isključivo doprinosom člana preraspodjele [213]:

$$[B_{12}^*]_{0;ph p_1 p_2 h_1 h_2} = \left[\frac{\partial \bar{v}_{p_1 p_2 h_1 h_2}[\rho]}{\partial \rho_{ph}} \right] \bigg|_{\rho=\rho^{(0)}}. \quad (4.78)$$

Do ove točke izvodi vrijede za obje klase relativističkih funkcionala energije gustoće, odnosno za kontaktne modele, ali i za modele s izmjenom mezona, te neovisno o tome je li osnovno stanje dobiveno u relativističkoj Hartree ili Hartree–Fock aproksimaciji, uz uvjet da je rezidualna interakcija dosljedno izvedena iz temeljne gustoće lagrangijana. U nastavku su dani eksplicitni izrazi matričnih elemenata za kontaktni oblik međudjelovanja, dok je detaljni izvod matričnih elemenata A_{11}^J , B_{11}^J , A_{12}^J i A_{22}^J unutar SRPA formalizma dan u potpoglavlju 4.7.

4.6 Eksplicitni izrazi matričnih elemenata za DD-PC1 i DD-PCX funkcionala

U slučaju relativističkih kontaktnih funkcionala s DD-PC1 i DD-PCX parametrizacijama vrh četverofermionskog međudjelovanja ovisi isključivo o vektorskoj (barionskoj) gustoći. U pristupima koji koriste dvočestično kontaktno međudjelovanje (RRPA ili RSRPA), ono se za specifični kanal međudjelovanja može zapisati u sljedećem obliku:

$$\begin{aligned} v_{abcd}^{ch} &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \left[\bar{\psi}_a(\mathbf{r}_1) \sqrt{\alpha_{ch}(\rho_V(\mathbf{r}_1))} \Gamma^{ch}(1) \psi_c(\mathbf{r}_1) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &\times \left[\bar{\psi}_b(\mathbf{r}_2) \sqrt{\alpha_{ch}(\rho_V(\mathbf{r}_2))} \Gamma_{ch}(2) \psi_d(\mathbf{r}_2) \right], \end{aligned} \quad (4.79)$$

Vrste bilinearnih struktura (Γ) [196] pomoću kojih se može izgraditi međudjelovanje, odnosno pojedine gustoće i četverostruje, prikazane su u tablici 4.1. Pritom će u ovom potpoglavlju biti fokus samo na čestično-šupljinskim kanalima koji postoje unutar navedenih parametrizacija (vidjeti poglavlja 3.4.1 i 3.4.2).

Postavljanjem vrhova međudjelovanja bilinearnih struktura na $\tilde{\Gamma}^{(1,2)} = \sqrt{\alpha_S[\rho_V]} \mathbb{1}^{(1,2)}$ u dvočestičnim matričnim elementima $\bar{v}_{abcd}$, za skalarni matrični element A_{11} (vidjeti izraz (4.69)),

Tablica 4.1: Osnovni Diracovi bilineari i njihovi pripadni operatori.

Vrsta bilineara	Diracova struktura Γ_i
Skalarni	$\mathbb{1}$
Pseudoskalarni	γ_5
Vektorski	γ^μ
Pseudovektorski	$\gamma^\mu \gamma_5$
Tenzorski	$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]$

koji eksplicitno uključuje efekte preraspodjele prvog i drugog reda, dobiva se izraz:

$$\begin{aligned}
A_{mi,nj}^{11S} = & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left[\psi_m^\dagger(1) \gamma_{(1)}^0 \psi_i(1) \right] \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[\psi_j^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_n(2) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left\{ \left[\psi_m^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_n(2) \right] \right. \\
& + \left. \left[\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_j^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_n(2) \right] \right\} \frac{d\alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{d\rho_V(\mathbf{r}_1)} \Big|_{\rho_V=\rho_{V_0}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho_{S_0}(\mathbf{r}_1) \\
& + \frac{1}{2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \rho_{S_0}^2(\mathbf{r}_1) \left[\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1) \right] \frac{d^2\alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{d^2\rho_V(\mathbf{r}_1)} \Big|_{\rho_V=\rho_{V_0}} \\
& \times \left[\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_n(2) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \tag{4.80}
\end{aligned}$$

U navedenoj notaciji ovisnost Diracovih spinora ψ o skupu koordinata 1 i 2 odnosi se na prostornu $\mathbf{r}$, spinsku $\mathbf{s}$ i izospinsku koordinatu $\mathbf{t}$, dok je Diracov konjugat definiran kao [196]:

$$\bar{\psi}_a = \psi_a^\dagger \gamma_0. \tag{4.81}$$

Indeks a odnosi se na skup kvantnih brojeva [199]:

$$a = (n, s, l, j, m, t), \tag{4.82}$$

a γ matrice definirane su kao

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \tag{4.83}$$

i

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4.84}$$

Prvi član unutar vitičastih zagrada u izrazu (4.80) predstavlja direktni skalarni doprinos, dok preostali članovi predstavljaju doprinos preraspodjele zbog eksplicitne ovisnosti jakosti vezanja o barionskoj gustoći ρ_V . Nakon provedbe varijacijskog postupka sve gustoće (i struje), kao i jakosti četverofermionskog vezanja s pripadnom prvom i drugom dervacijom po gustoći moraju

se izvrijedniti na razini osnovnog stanja. Drugim riječima, ρ_{V_0} i ρ_{S_0} odnose se na vektorsku i skalarnu gustoću sustava u osnovnom stanju, dok Diracova delta funkcija $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ označava lokalni karakter međudjelovanja, što je svojstveno modelima s kontaktnim međudjelovanjem (engl. *point-coupling*). Skalarni doprinos ostalih blokova matrice A_{11} koji uključuju α -h i miješane parove dobiva se na analogan način.

Izoskalarni vektorski kanal ima nešto složeniji oblik, iako kao i slučaju skalarnog doprinosa A_{11}^S , slijedi direktno iz izraza (4.69), samo uz uvrštavanje $\tilde{\Gamma}^{(1,2)} = \sqrt{\alpha_V[\rho_V]} \gamma^{\mu(1,2)}$, odnosno

$$\begin{aligned}
A_{mi,nj}^{11V} = & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left\{ [\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1)] [\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_n(2)] \right. \\
& - [\psi_m^\dagger(1) \alpha_1 \psi_i(1)] [\psi_j^\dagger(2) \alpha_2 \psi_n(2)] \left. \right\} \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + 2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 [\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1)] [\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_n(2)] \left. \frac{d\alpha_V[\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{d\rho_V(\mathbf{r}_1)} \right|_{\rho_V=\rho_{V_0}} \\
& \times \rho_{V_0}(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \int d^3r_1 \int d^3r_2 [\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1)] [\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_n(2)] \\
& \times \frac{1}{2} \rho_{V_0}^2(\mathbf{r}_1) \left. \frac{d^2\alpha_V(\rho(\mathbf{r}))}{d\rho_V^2(\mathbf{r}_1)} \right|_{\rho_V=\rho_{V_0}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \tag{4.85}
\end{aligned}$$

gdje je $\alpha = \gamma_0 \gamma^i$, za $i = 1, 2$ i 3 [196]. Prvi član u prvom integralu u izrazu (4.85) sadrži vremenoliki, a drugi prostornoliki doprinos, dok preostali članovi postoje isključivo u okviru DFT-a i predstavljaju članove preraspodjele, slično kao i kod skalarnog vezanja. Važno je uočiti razliku u odnosu na skalarno vezanje koja se očituje u Lorentzovoj strukturi bilineara. Naime, dok članovi preraspodjele u vektorskom kanalu sadrže isključivo vremenolike komponente ($\Gamma = \gamma^0$), direktni dio međudjelovanja obuhvaća širu strukturu γ matrica, odnosno γ^μ , za $\mu = 0, 1, 2$ i 3 (vidjeti tablicu 4.1 i definiciju gama matrica (4.83)).

Slučaj izovektorskog vektorskog kanala specifičan je po tome što vrh međudjelovanja, uz Diracovu strukturu, uključuje i izospinski operator $\vec{\tau}$ [146], čime se u obzir uzima ovisnost o asimetriji protonske i neutronske gustoće. Uvrštavanjem vrhova oblika $\tilde{\Gamma}^{(1,2)} = \sqrt{\alpha_{TV}[\rho_V]} (\gamma^\mu \vec{\tau})^{(1,2)}$ u opći izraz (4.69) dobiva se:

$$\begin{aligned}
A_{mi,nj}^{11TV} = & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left\{ [\psi_m^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_i(1)] \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] [\psi_j^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_n(2)] \right. \\
& - [\psi_m^\dagger(1) (\alpha \vec{\tau})^{(1)} \psi_i(1)] \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] [\psi_j^\dagger(2) (\alpha \vec{\tau})^{(2)} \psi_n(2)] \left. \right\} \\
& + \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left\{ [\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \tau_3^{(1)} \psi_i(1)] [\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_n(2)] + [\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1)] \right. \\
& \left. [\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \tau_3^{(2)} \psi_n(2)] \right\} \rho_{TV_0}(\mathbf{r}_1) \left. \frac{d\alpha_{TV}[\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{d\rho_V(\mathbf{r}_1)} \right|_{\rho_V=\rho_{V_0}} \\
& + \frac{1}{2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 [\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1)] \left. \frac{d^2\alpha_{TV}[\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{d\rho_V^2(\mathbf{r}_1)} \right|_{\rho_V=\rho_{V_0}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho_{TV_0}^2(\mathbf{r}_1)
\end{aligned}$$

$$\times \left[\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_n(2) \right]. \quad (4.86)$$

Slično, kao i u slučaju izoskalarnog vektorskog vezanja, prvi član u prvom dvostrukom prostornom integralu odgovara vremenolikom, a drugi prostornolikom doprinosu, dok se svi preostali integrali odnose na članove preraspodjele. Analognim postupkom dalje se računaju derivativni članovi (vidjeti rad [123]) i kulonski doprinos (slično vektorskom doprinosu), koji su znatno jednostavniji budući da sadrže samo konstantu vezanja bez funkcionalne ovisnosti o gustoći. Pored spomenutog, primjeri izračuna drugih mogućih čestično-šupljinskih kanala, koji nisu obuhvaćeni navedenim parametrizacijama kontaktnog međudjelovanja, poput pseudoskalarnog, pseudovektorskog i tenzorskog doprinosa matricama A_{11} i B_{11} unutar proton-neutronske proširenja R(Q)RPA (PN-R(Q)RPA), nalaze se u radovima [46, 228].

Uvrštavanjem vršne ovisnosti $\tilde{\Gamma}^{(1)} = \sqrt{\alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_1)]} \mathbb{1}^{(1)}$ i $\tilde{\Gamma}^{(2)} = \sqrt{\alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_2)]} \mathbb{1}^{(2)}$ u Lorentzove bilineare (vidjeti tablicu 4.1), za skalarni doprinos matričnom elementu A_{12} (izraz (4.71)), dobiva se sljedeći izraz:

$$\begin{aligned} A_{mi,pqkl}^{12,S} = & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{ik} \left[\psi_m^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_q(2) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ & - \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{il} \left[\psi_m^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_k^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_q(2) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ & - \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mp} \left[\psi_k^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_q(2) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ & + \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mq} \left[\psi_k^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_p(2) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ & + \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left[\psi_k^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_q(2) \right] \left. \frac{\partial \alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{im}} \right|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \\ & \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (4.87)$$

gdje je

$$\frac{\partial \alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{im}} = \frac{d\alpha_S}{d\rho_V} \frac{\partial \rho_V(\mathbf{r}_1)}{\partial \rho_{im}}, \quad \frac{\partial \rho_V(\mathbf{r}_1)}{\partial \rho_{im}} = \bar{\psi}_m(\mathbf{r}_1) \gamma^0 \psi_i(\mathbf{r}_1). \quad (4.88)$$

Ovdje je $d\alpha_S/d\rho_V$ derivacija funkcije vezanja po vektorskoj (barionskoj) gustoći. Prva četiri dvostruka integrala u izrazu (4.87) po prostornim koordinatama u prethodnom izrazu predstavljaju direktan doprinos, dok posljednji odgovara članu preraspodjele koji postoji jedino za funkcionalne s vezanjima ovisnim o gustoći. Direktni doprinosi, s obzirom na djelovanje Kronecker delta funkcija, fizikalno predstavljaju procese u kojima se jedna čestica ili šupljina aktivno raspršuje, dok njezin par, nastao iz 2p–2h konfiguracije, ostaje u istom kvantnom stanju. Član preraspodjele pokazuje kako prijelazna gustoća lokalno mijenja snagu skalarnog međudjelovanja.

Vektorski doprinos dobiva se uvrštavanjem vršne ovisnosti $\tilde{\Gamma}^{(1)} = \sqrt{\alpha_V [\rho_V(\mathbf{r}_1)]} \gamma^{\mu(1)}$ i

$\Gamma^{(2)} = \sqrt{\alpha_V [\rho_V(\mathbf{r}_2)]} \gamma_\mu^{(2)}$ u Lorentzove bilineare, odnosno

$$\begin{aligned}
A_{mi,pqkl}^{12V} = & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{ik} \left\{ \left[\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_m^\dagger(1) \alpha^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \alpha^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& - \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{il} \left\{ \left[\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_k^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_m^\dagger(1) \alpha^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_k^\dagger(2) \alpha^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& - \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mp} \left\{ \left[\psi_k^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_k^\dagger(1) \alpha^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \alpha^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mq} \left\{ \left[\psi_k^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_p(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_k^\dagger(1) \alpha^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \alpha^{(2)} \psi_p(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{\partial \alpha_V [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{im}} \Big|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left\{ \left[\psi_k^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_k^\dagger(1) \alpha^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) \alpha^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \tag{4.89}
\end{aligned}$$

Slično kao u prethodnom skalarnom slučaju, prva četiri dvostruka prostorna integrala u prethodnom izrazu sadrže vremenoliku i prostornoliku komponentu. Član preraspodjele sadrži

$$\frac{\partial \alpha_V [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{im}} = \frac{d \alpha_V}{d \rho_V} \frac{\partial \rho_V(\mathbf{r}_1)}{\partial \rho_{im}}, \tag{4.90}$$

te je nešto složenije Lorentzove bilinearne strukture nego ranije, ali ima slično značenje kao i kod skalarnog slučaja. Analognim postupkom dobiva se doprinos izovektorskog vektorskog kanala uz zamjenu vršnih funkcija s $\tilde{\Gamma}^{(1)} = \sqrt{\alpha_{TV} [\rho_V(\mathbf{r}_1)]} \gamma^{\mu(1)} \tilde{\tau}^{(1)}$ i $\Gamma^{(2)} = \sqrt{\alpha_{TV} [\rho_V(\mathbf{r}_2)]} \gamma_\mu^{(2)} \tilde{\tau}^{(2)}$, odnosno

$$\begin{aligned}
A_{mi,pqkl}^{12TV} = & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{ik} \left\{ \left[\psi_m^\dagger(1) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_m^\dagger(1) (\alpha \tilde{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\alpha \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& - \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{il} \left\{ \left[\psi_m^\dagger(1) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_k^\dagger(2) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_m^\dagger(1) (\alpha \tilde{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_k^\dagger(2) (\alpha \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& - \int d^3r_1 \int d^3r_2 \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mp} \left\{ \left[\psi_k^\dagger(1) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_k^\dagger(1) (\alpha \tilde{\tau})^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\alpha \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{\partial \alpha_{TV} [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{im}} \Big|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left\{ \left[\psi_k^\dagger(1) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\mathbb{1} \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_k^\dagger(1) (\alpha \tilde{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\alpha \tilde{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left[\psi_k^\dagger(1) (\boldsymbol{\alpha} \vec{\tau})^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\boldsymbol{\alpha} \vec{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \Big\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mq} \left\{ \left[\psi_k^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_p(2) \right] \right. \\
& - \left. \left[\psi_k^\dagger(1) (\boldsymbol{\alpha} \vec{\tau})^{(1)} \psi_i(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\boldsymbol{\alpha} \vec{\tau})^{(2)} \psi_p(2) \right] \right\} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{\partial \alpha_{TV} [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{im}} \Big|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \left\{ \left[\psi_k^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \right. \\
& \times \left. \left[\psi_l^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] - \left[\psi_k^\dagger(1) (\boldsymbol{\alpha} \vec{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_l^\dagger(2) (\boldsymbol{\alpha} \vec{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right] \right\}, \quad (4.91)
\end{aligned}$$

gdje je

$$\frac{\partial \alpha_{TV} [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{im}} = \frac{d \alpha_{TV}}{d \rho_V} \frac{\partial \rho_V(\mathbf{r}_1)}{\partial \rho_{im}}, \quad (4.92)$$

Najsloženiji oblik ima A_{22} matrični element (izraz (4.74)), odakle se za izoskalarni skalarni kanal dobiva sljedeći izraz:

$$\begin{aligned}
A_{mnij,pqkl}^{22 S} &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[\psi_m^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_p(1) \right] \left[\psi_n^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_q(2) \right] \\
&\times (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{jk} \delta_{il}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[\psi_k^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_i(1) \right] \\
&\times \left[\psi_j^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_l(2) \right] (\delta_{mp} \delta_{nq} - \delta_{np} \delta_{mq}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
&+ \left\{ \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_S [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mp} \delta_{jl} \left[\psi_n^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_q(1) \right] \left[\psi_k^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_i(2) \right] \right. \\
&\times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \text{sve preostale permutacije čestica i šupljina} \Big\} \\
&+ \left\{ \frac{1}{2} \sum_{hh'} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{\partial \alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{nq}} \Big|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left[\psi_h^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_h(1) \right] \right. \\
&\left[\psi_{h'}^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_{h'}(2) \right] \delta_{mp} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \text{sve preostale permutacije čestica} \Big\} \\
&- \left\{ \frac{1}{2} \sum_{hh'} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{\partial \alpha_S [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{ik}} \Big|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left[\psi_h^\dagger(1) \gamma_0^{(1)} \psi_h(1) \right] \right. \\
&\times \left. \left[\psi_{h'}^\dagger(2) \gamma_0^{(2)} \psi_{h'}(2) \right] \delta_{mp} \delta_{nq} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \text{sve preostale permutacije šupljina} \Big\}. \quad (4.93)
\end{aligned}$$

Izrazi u posljednje dvije vitičaste zagrade pripadaju članovima preraspodjele koji se pojavljuju unutar DFT-a s vezanjima ovisnim o gustoći i nužni su za opis niskoenergijskog dijela spektra pobuđenja ($E \lesssim 20$ MeV). Izoskalarni vektorski doprinos matričnom elementu dobiva se analognim postupkom:

$$A_{mnij,pqkl}^{22 V} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[- \left(\psi_m^\dagger(1) \boldsymbol{\alpha}_1 \psi_p(1) \right) \left(\psi_n^\dagger(2) \boldsymbol{\alpha}_2 \psi_q(2) \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\psi_m^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_p(1) \right) \left(\psi_n^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_q(2) \right) \left[(\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{jk} \delta_{il}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right. \\
& + \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[- \left(\psi_k^\dagger(1) \alpha_1 \psi_i(1) \right) \left(\psi_j^\dagger(2) \alpha_2 \psi_l(2) \right) \right. \\
& + \left. \left(\psi_k^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_i(1) \right) \left(\psi_j^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_l(2) \right) \right] (\delta_{mp} \delta_{nq} - \delta_{np} \delta_{mq}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \left\{ \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_V [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \delta_{mp} \delta_{jl} \left[- \left(\psi_n^\dagger(1) \alpha_1 \psi_q(1) \right) \left(\psi_k^\dagger(2) \alpha_2 \psi_i(2) \right) \right. \right. \\
& + \left. \left(\psi_n^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_q(1) \right) \left(\psi_k^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_i(2) \right) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \left. \begin{array}{l} \text{sve preostale permutacije} \\ \text{čestica i šupljina} \end{array} \right\} \\
& + \left\{ \frac{1}{2} \sum_{hh'} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{\partial \alpha_V [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{nq}} \right|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left[- \left(\psi_h^\dagger(1) \alpha_1 \psi_h(1) \right) \right. \\
& \times \left(\psi_{h'}^\dagger(2) \alpha_2 \psi_{h'(2)} \right) + \left(\psi_h^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_h(1) \right) \left(\psi_{h'}^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_{h'(2)} \right) \left. \right] \delta_{mp} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \text{sve preostale permutacije čestica} \left. \right\} \\
& - \left\{ \frac{1}{2} \sum_{hh'} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{\partial \alpha_V [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{ik}} \right|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left[- \left(\psi_h^\dagger(1) \alpha_1 \psi_h(1) \right) \right. \\
& \times \left(\psi_{h'}^\dagger(2) \alpha_2 \psi_{h'(2)} \right) + \left(\psi_h^\dagger(1) \mathbb{1}^{(1)} \psi_h(1) \right) \left(\psi_{h'}^\dagger(2) \mathbb{1}^{(2)} \psi_{h'(2)} \right) \left. \right] \delta_{mp} \delta_{nq} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \text{sve preostale permutacije šupljina} \left. \right\}. \tag{4.94}
\end{aligned}$$

Dodavanjem izospinske ovisnosti u vrhove međudjelovanja, dalje se lako dobiva izovektorski vektorski doprinos A_{22} matričnih elemenata:

$$\begin{aligned}
A_{mnij,pqkl}^{22 TV} & = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[- \left(\psi_m^\dagger(1) (\alpha \vec{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right) \left(\psi_n^\dagger(2) (\alpha \vec{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right) \right. \\
& + \left(\psi_m^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_p(1) \right) \left(\psi_n^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_q(2) \right) \left. \right] (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{jk} \delta_{il}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[- \left(\psi_k^\dagger(1) (\alpha \vec{\tau})^{(1)} \psi_i(1) \right) \left(\psi_j^\dagger(2) (\alpha \vec{\tau})^{(2)} \psi_l(2) \right) \right. \\
& + \left(\psi_k^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_i(1) \right) \left(\psi_j^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_l(2) \right) \left. \right] (\delta_{mp} \delta_{nq} - \delta_{np} \delta_{mq}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \left\{ \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \alpha_{TV} [\rho_{V_0}(\mathbf{r}_1)] \left[- \left(\psi_n^\dagger(1) (\alpha \vec{\tau})^{(1)} \psi_q(1) \right) \left(\psi_k^\dagger(2) (\alpha \vec{\tau})^{(2)} \psi_i(2) \right) \right. \right. \\
& + \left(\psi_n^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_q(1) \right) \left(\psi_k^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_i(2) \right) \left. \right] \delta_{mp} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
& + \text{sve preostale permutacije čestica i šupljina} \left. \right\} \\
& + \left\{ \frac{1}{2} \sum_{hh'} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{\partial \alpha_{TV} [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{nq}} \right|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left[- \left(\psi_h^\dagger(1) (\alpha \vec{\tau})^{(1)} \psi_h(1) \right) \right. \\
& \times \left(\psi_{h'}^\dagger(2) (\alpha \vec{\tau})^{(2)} \psi_{h'(2)} \right) + \left(\psi_h^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_h(1) \right) \left(\psi_{h'}^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_{h'(2)} \right) \left. \right] \\
& \times \delta_{mp} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \text{sve preostale permutacije čestica} \left. \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \frac{1}{2} \sum_{hh'} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{\partial \alpha_{TV} [\rho_V(\mathbf{r}_1)]}{\partial \rho_{ik}} \Big|_{\rho_V = \rho_{V_0}} \left[- \left(\psi_h^\dagger(1) (\alpha \vec{\tau})^{(1)} \psi_h(1) \right) \right. \right. \\
& \times \left(\psi_{h'}^\dagger(2) (\alpha \vec{\tau})^{(2)} \psi_{h'}(2) \right) + \left(\psi_h^\dagger(1) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(1)} \psi_h(1) \right) \left(\psi_{h'}^\dagger(2) (\mathbb{1} \vec{\tau})^{(2)} \psi_{h'}(2) \right) \Big] \\
& \left. \times \delta_{mp} \delta_{nq} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \text{sve preostale permutacije šupljina} \right\}. \quad (4.95)
\end{aligned}$$

Doprinosi svih ostalih kanala A_{22} matričnom elementu dobivaju se analognim postupkom uz zamjenu vršnih funkcija, uključujući kulonske i derivativne članove, koji su nešto jednostavniji jer vrhovi međudjelovanja nemaju funkcionalnu ovisnosti o gustoći. Odgovarajući matrični elementi B_{11} i B_{12} određuju se potpuno analogno iz izraza (4.77) i (4.78) te se zbog preglednosti ovdje ne navode eksplicitno.

4.7 Vezani matrični elementi

Standardni matrični element A_{11} , koji se pojavljuje u najnižem redu RPA teorije, povezuje međusobno 1p–1h konfiguracije, a u jj -vezanju dan je izrazom:

$$A_{ph;p'h'}^{11 J} = (\epsilon_p - \epsilon_h) \delta_{pp'} \delta_{hh'} + \langle (ph^{-1}) J | H^{(2)} | (p'h'^{-1}) J \rangle. \quad (4.96)$$

U jj -vezanju svaka čestica ima ukupni angularni moment $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$. U tom slučaju, 1p–1h konfiguracije se označavaju kao prijelazi između stanja različitih j -vrijednosti, pri čemu su ti prijelazi dobro definirani jer svaki par stanja ima jasno određen ukupni angularni moment J i paritet [229, 230]. Nakon provedene Pandya transformacije [231] prethodni se izraz svodi na [111]:

$$\begin{aligned}
A_{ph;p'h'}^{11 J} &= (\epsilon_p - \epsilon_h) \delta_{pp'} \delta_{hh'} + \sum_{J'} (-1)^{j_p' + j_h + J'} (2J' + 1) \begin{Bmatrix} j_h' & j_p & J' \\ j_h & j_p' & J \end{Bmatrix} \\
&\times \langle (ph') J' | H^{(2)} | (hp') J' \rangle. \quad (4.97)
\end{aligned}$$

Za razliku od matričnih elemenata matrice A , matrični elementi matrice B opisuju korelacije između 1p–1h parova. U vezanom obliku matrični element B dan je izrazom [73]:

$$B_{ph;p'h'}^{11 J} = \langle (ph^{-1}) J; \overline{(p'h'^{-1}) J} | H^{(2)} | HF \rangle. \quad (4.98)$$

Jednočestični doprinosi u matričnim elementima određeni su razlikama jednočestičnih energija čestica i šupljina, ϵ_p i ϵ_h , koje se uobičajeno dobivaju primjenom Hartreejeve ili Hartree–Fockove aproksimacije u izračunu osnovnog stanja jezgre [74]. Vezano stanje na ukupni kutni moment J u *bra* vektoru ne posjeduje svojstva ireducibilnog sfernog tenzora, dok *ket* vektor, koji predstavlja osnovno stanje sustava, ta svojstva ima. Stoga se jedno od vezanih 1p–1h stanja, primjerice

$\langle (p'h'^{-1})J'M' |$, može transformirati u sferni tenzor uvođenjem $\mathcal{R}$ -konjugiranog stanja [73]:

$$\overline{\langle (p'h'^{-1})J'M' |} = \langle (p'h'^{-1})J' - M' | (-1)^{J-M}. \quad (4.99)$$

Zapisano pomoću Pandya transformacije matrični element B u svom vezanom obliku postaje [231]:

$$\begin{aligned} \langle (ph^{-1})J; (p'h'^{-1})J | H^{(2)} | HF \rangle &= (-1)^{j'_p + j_h + J} \sum_{J'} (-1)^{J'} \left\{ \begin{matrix} j'_h & j'_p & J' \\ j_p & j_h & J \end{matrix} \right\} \\ &\langle (p \ p')J' | H^{(2)} | (h \ h')J' \rangle. \end{aligned} \quad (4.100)$$

Navedena transformacija je osobito korisna u proširenim RPA pristupima jer neovisno o vrsti konfiguracija i njihovom vezanju, dvočestični matrični element tretira na jednak način, kao raspršenje čestičnih stanja [231].

Pretpostavlja se poredak indeksa $p_1 < p_2$ i $h_1 < h_2$ kako bi se izbjeglo višestruko prebrojavanje. Operator $P(a, b)$ označava zamjenu kvantnih brojeva dviju čestica te osigurava da matrični elementi imaju ispravnu antisimetričnu strukturu pri permutaciji identičnih fermiona.. Vezani oblik matričnih elemenata dan je izrazom [111]:

$$\begin{aligned} A_{ph; (p_1 p_2) J_p (h_1 h_2) J_h}^{12 J} &= - \left[1 - (-1)^{j_{p_1} + j_{p_2} - J_p} P(p_1, p_2) \right] (-1)^{j_{p_1} + j_{p_2} + J + J_h} (1 + \delta_{p_1 p_2})^{-1/2} \\ &\quad \widehat{J}_p \widehat{J}_h \delta_{p_1 p} \left\{ \begin{matrix} j_{p_2} & j_{p_1} & J_p \\ J & J_h & j_h \end{matrix} \right\} \langle (h_1 h_2) J_h | H^{(2)} | (h p_2) J_h \rangle \\ &+ \left[1 - (-1)^{j_{h_1} + j_{h_2} - J_h} P(h_1, h_2) \right] (1 + \delta_{h_1 h_2})^{-1/2} (-1)^{j_{h_2} + j_p + J_h + J} \\ &\quad \widehat{J}_p \widehat{J}_h \delta_{h h_1} \left\{ \begin{matrix} j_{h_2} & j_{h_1} & J_h \\ J & J_p & j_p \end{matrix} \right\} \langle (p h_2) J_p | H^{(2)} | (p_1 p_2) J_p \rangle \\ &+ \langle (p h) J | V^{(1)} | ((p_1 p_2) J_p (h_1 h_2) J_h) J \rangle. \end{aligned} \quad (4.101)$$

Vezani oblik A_{22} matričnog elementa dan je izrazom [111]:

$$\begin{aligned} A_{(p_1 p_2) J_p (h_1 h_2) J_h; (p'_1 p'_2) J'_p (h'_1 h'_2) J'_h}^{22 J} &= \delta_{p_1 p'_1} \delta_{h_1 h'_1} \delta_{p_2 p'_2} \delta_{h_2 h'_2} (\epsilon_{p_1} + \epsilon_{p_2} - \epsilon_{h_1} - \epsilon_{h_2}) \\ &+ \delta_{p_1 p'_1} \delta_{p_2 p'_2} \delta_{J_p J'_p} \delta_{J_h J'_h} \left[1 + (-1)^{J_p} \delta_{p_1 p_2} \right] (1 + \delta_{p_1 p_2})^{-1} \langle (h'_1 h'_2) J_h | H_2 | (h_1 h_2) J_h \rangle \\ &+ \delta_{h_1 h'_1} \delta_{h_2 h'_2} \delta_{J_p J'_p} \delta_{J_h J'_h} \left[1 + (-1)^{J_h} \delta_{h_1 h_2} \right] (1 + \delta_{h_1 h_2})^{-1} \langle (p_1 p_2) J_p | H_2 | (p'_1 p'_2) J_p \rangle \\ &+ \left[1 - (-1)^{j_{p_1} + j_{p_2} - J_p} P(p_1, p_2) \right] \left[1 - (-1)^{j_{h_1} + j_{h_2} - J_h} P(h_1, h_2) \right] \\ &\left[1 - (-1)^{j_{p'_1} + j_{p'_2} - J'_p} P(p'_1, p'_2) \right] \left[1 - (-1)^{j_{h'_1} + j_{h'_2} - J'_h} P(h'_1, h'_2) \right] \\ &(1 + \delta_{p_1 p_2})^{-1/2} (1 + \delta_{h_1 h_2})^{-1/2} (1 + \delta_{p'_1 p'_2})^{-1/2} (1 + \delta_{h'_1 h'_2})^{-1/2} \delta_{h_2, h'_2} \delta_{p_2, p'_2} \\ &\widehat{J}'_h \widehat{J}'_p \widehat{J}_h \widehat{J}_p (-1)^{J_h + J_{h'} + j_{p_1} + j_{p'_1} + J + j_{p_2} + j_{h_2}} \sum_{J'} (-1)^{J'} \widehat{J}'^2 \sum_L \widehat{L}^2 \left\{ \begin{matrix} J_h & J_{h'} & L \\ J_{p'} & J_p & J \end{matrix} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{matrix} J_{p'} & J_p & L \\ j_{p_1} & j_{p'_1} & j_{p_2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_{p_1} & j_{p'_1} & L \\ j_{h_1} & j_{h'_1} & J' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_{h_1} & j_{h'_1} & L \\ J_{h'} & J_h & j_{h_2} \end{matrix} \right\} \langle (p_1 h'_1) J' | H_2 | (p'_1 h_1) J' \rangle \\
& + \langle ((p_1 p_2) J_p (h_1 h_2) J_h) J | V^{(1)} | ((p'_1 p'_2) J'_p (h'_1 h'_2) J'_h) J \rangle
\end{aligned} \tag{4.102}$$

4.8 Metoda suptrakcije u proširenim RPA pristupima

Standardna SRPA obuhvaća 2p–2h konfiguracije, čiji doprinos u spektru pobuđenih stanja uzrokuje izražen pomak vrhova prema nižim energijama u usporedbi s klasičnim RPA pristupom. Kako bi se ublažili neželjeni učinci takvog spuštanja energijskih vrhova te osigurala konzistentnost proširenog formalizma, Tselyaev je 2007. godine uveo metodu suptrakcije kao rješenje za problem dvostrukog brojanja korelacija u proširenim RPA pristupima [232]. U navedenom se pristupu ($V_{\text{SRPA}}(\omega)$) interpretira kao frekvencijski ovisno efektivno međudjelovanje u 1p–1h prostoru, koje nastaje zbog vezanja s 2p–2h konfiguracijama. Veličina $U(\omega)$ označava dodatni, energijski ovisni doprinos tog proširenog međudjelovanja u odnosu na standardno RPA rezidualno međudjelovanje (V_{RPA}), odnosno

$$U(\omega) = V_{\text{SRPA}}(\omega) - V_{\text{RPA}}. \tag{4.103}$$

Sušтина metode jest da se iz frekvencijski ovisnog efektivnog međudjelovanja u proširenoj teoriji oduzme njegova statička komponenta [117, 232]:

$$V_{\text{SRPA}}(\omega) \rightarrow V_{\text{SRPA}}(\omega) - U(0). \tag{4.104}$$

Na taj način osigurano je da se odziv u proširenom formalizmu reducira na RPA rezultat u granici $\omega \rightarrow 0$. Time su statičke korelacije, koje su već implicitno uključene u parametre efektivnog funkcionala međudjelovanja brojane samo jednom, dok se dinamičke korelacije izvan srednjeg polja uvode na ispravan način [117, 232].

4.8.1 Metoda suptrakcije u okviru teorije energijskih funkcionala gustoće

U okviru nuklearne teorije energijskih funkcionala gustoće često se koristi međudjelovanje koje ovisi o gustoći, odnosno strujama. U slučaju slabe vanjske perturbacije $\lambda Q(\vec{r})$, funkcional se mijenja kao [117]:

$$E_\lambda[\rho] = E[\rho] + \lambda \int d^3r Q(\vec{r}) \rho(\vec{r}), \tag{4.105}$$

što dovodi do nove gustoće:

$$\rho_\lambda = \rho_0 + \lambda \int d^3r' R(\omega = 0, \vec{r}, \vec{r}') Q(\vec{r}'), \quad (4.106)$$

gdje je $R(\omega = 0)$ statička funkcija odziva. Unutar Kohn-Shamova formalizma, ovaj odziv odgovara onome iz RPA:

$$R(\omega = 0) = R_{\text{KS}}^{\text{RPA}}, \quad (4.107)$$

što implicira da svaka proširena teorija mora u statičkom (adijabatskom) ograničenju reproducirati RPA rezultat kako bi se izbjeglo dvostruko brojanje korelacija [117].

Kada se sustav promatra u vremenskoj domeni, koristi se vremenski ovisna DFT (TDDFT), temeljena na Runge-Grossovom teoremu [233]. Tada se odzivni operator može izraziti kao:

$$R(\omega) = R_0(\omega) + R_0(\omega)V(\omega)R(\omega), \quad (4.108)$$

gdje $V(\omega)$ označava efektivnu, frekvencijski ovisnu interakciju. U adijabatskoj aproksimaciji, ova interakcija postaje:

$$V(\omega) \rightarrow V^{\text{RPA}} = \left. \frac{\delta^2 E[\rho]}{\delta \rho(\vec{r}) \delta \rho(\vec{r}')} \right|_{\rho_0}. \quad (4.109)$$

U modelu SRPA efektivno međudjelovanje ovisi o frekvenciji, stoga je potrebno osigurati da SRPA u granici $\omega \rightarrow 0$ daje isti odziv kao RPA. To se postiže primjenom suptrakcijske sheme [117]:

$$V^{\text{SRPA}}(\omega) \rightarrow V^{\text{SRPA}}(\omega) - [V^{\text{SRPA}}(0) - V^{\text{RPA}}], \quad (4.110)$$

čime se izbjegava dvostruko brojanje statičkih korelacija i osigurava stabilnost modela.

4.8.2 Primjena metode suptrakcije u (R)SRPA

Metoda suptrakcije je već uspješno primijenjena u SRPA zasnovanoj na nerelativističkoj DFT [117]. Osnovna ideja je da se SRPA jednačbe mogu zapisati kao RPA jednačbe s matricama A_{11} i B_{11} ovisnim o energiji, a sadrže učinke vezanja između 1p–1h i 2p–2h konfiguracija. Ti se učinci pojavljuju preko preko inverza operatora $\omega + i\eta - A_{22}$ i $\omega + i\eta + A_{22}$, čime se dinamika eliminiranog 2p–2h potprostora ugrađuje u efektivni 1p–1h problem [117]:

$$A_{11'}(\omega) = A_{11'} + \sum_{2,2'} A_{12} (\omega + i\eta - A_{22'})^{-1} A_{2'1'} - \sum_{2,2'} B_{12} (\omega + i\eta + A_{22'})^{-1} B_{2'1'}, \quad (4.111)$$

$$B_{11'}(\omega) = B_{11'} + \sum_{2,2'} A_{12} (\omega + i\eta - A_{22'})^{-1} B_{2'1'} - \sum_{2,2'} B_{12} (\omega + i\eta + A_{22'})^{-1} A_{2'1'}. \quad (4.112)$$

gdje indeks 1 u sažetom zapisu označava 1p–1h konfiguracije, dok indeks 2 označava 2p–2h konfiguracije. Parametar η predstavlja infinitezimalno mali pozitivan broj koji osigurava pravilnu

strukturu odzivne funkcije te se u praktičnim numeričkim izračunima η često uzima kao mali, ali konačan broj kako bi se izbjegle numeričke singularnosti te omogućilo ugađivanje diskretnog spektra pobuđenja. Podrazumijeva se da su sve blok matrice u prethodnim izrazima realne. Bez članova preraspodjele, B_{12} i B_{21} bi iščeznuli, stoga ne bi bilo korekcije za matricu B_{11} , koja bi jednostavno postala odgovarajuća RPA matrica (bez energijske ovisnosti), a posljednji član u jednadžbi (4.111) bio bi nula. Iz prethodnih izraza izdvajaju se oni dijelovi koji sadrže energijski ovisne efekte međudjelovanja između dva različita potprostora, odnosno 1p–1h i 2p–2h konfiguracija:

$$E_{11'}(\omega) = \sum_{2,2'} A_{12} (\omega + i\eta - A_{22'})^{-1} A_{2'1'} - \sum_{2,2'} B_{12} (\omega + i\eta + A_{22'})^{-1} B_{2'1'}, \quad (4.113)$$

$$F_{11'}(\omega) = \sum_{2,2'} A_{12} (\omega + i\eta - A_{22'})^{-1} B_{2'1'} - \sum_{2,2'} B_{12} (\omega + i\eta + A_{22'})^{-1} A_{2'1'}. \quad (4.114)$$

Postupak suptrakcije, u ovom matričnom kontekstu, ispravlja matrice slične RPA-u oduzimanjem statičkih dijelova $E_{11}(0)$ i $F_{11}(0)$ od $A_{11'}(\omega)$ i $B_{11'}(\omega)$ (radi usporedbe pogledati izraze (4.104) ili (4.110)):

$$\begin{aligned} A_{11'}^S(\omega) &= A_{11'}(\omega) - E_{11'}(0), \\ B_{11'}^S(\omega) &= B_{11'}(\omega) - F_{11'}(0). \end{aligned} \quad (4.115)$$

Drugim riječima, glavni problem pri korištenju DFT-a unutar SRPA je što su korelacije već djelomično uključene u sam nuklearni funkcional gustoće. Ako se samo uključe 2p–2h konfiguracije, dobiva se tzv. "dvostruko brojanje" (engl. *double counting*) korelacija. Iz tog razloga su definirani $E_{11'}(0)$ i $F_{11'}(0)$ kao svojevrsni "višak" informacija koji treba ukloniti kako bi se očistila matrica od nefizikalnih nestabilnosti. U idućem koraku $A_{11'}^S(\omega)$ i $B_{11'}^S(\omega)$ se zamjenjuju s $A_{11'}(\omega)$ i $B_{11'}(\omega)$ u energijski ovisnim jednadžbama sličnim RPA. Zatim je potrebno vratiti se na energijski neovisne jednadžbe s većim matricama [117], dobivajući u konačnici $\mathcal{A}_F^S$ i $\mathcal{B}_F^S$:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_F^S &= \begin{pmatrix} A_{11'} + \sum_{2,2'} A_{12} (A_{22'})^{-1} A_{2'1'} + \sum_{2,2'} B_{12} (A_{22'})^{-1} B_{2'1'} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22'} \end{pmatrix}, \\ \mathcal{B}_F^S &= \begin{pmatrix} B_{11'} + \sum_{2,2'} A_{12} (A_{22'})^{-1} B_{2'1'} + \sum_{2,2'} B_{12} (A_{22'})^{-1} A_{2'1'} & B_{12} \\ B_{21} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.116)$$

odakle slijede suptrahirane RSRPA (RSSRPA) jednadžbe:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A}_F^S & \mathcal{B}_F^S \\ -\mathcal{B}_F^{S*} & -\mathcal{A}_F^{S*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} = E_\nu \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix}. \quad (4.117)$$

Provedbom metode suptrakcije, energijska ovisnost prestaje biti eksplicitno prisutna u jednadžbama (4.116) jer se efekti korelacija redefiniiraju unutar statičkih blokova proširenog konfiguracijskog prostora. Rezultirajuće matrice, $\mathcal{A}_F^S$ i $\mathcal{B}_F^S$, posjeduju ključna svojstva koja osiguravaju robusnost numeričkog modela. Prvenstveno, osigurana je dinamička stabilnost sustava na način

da suptrakcija korigira položaj vlastitih vrijednosti čime se efikasno eliminira pojava imaginarnih energija, inače čestog problema u nerelativističkom SRPA formalizmu unutar DFT-a [111]. Nadalje, postignuta je fizikalna konzistentnost modela, kojom se jamči da rješenja RSSRPA jednadžbi u limesu spore evolucije odgovaraju statičkim svojstvima izvedenim izravno iz upotrijebljenog energijskog funkcionala. Konačno, očuvana je specifična struktura matrice u kojoj blok B_{22} iščezava, što odražava teorijsku pretpostavku o zanemarivom doprinosu izravnih korelacija između dvočestičnih-dvošupljinskih stanja u usporedbi s dominantnim utjecajem korelacija unutar 1p–1h potprostora.

Zbog numeričkih zahtjeva, kao dodatna varijanta uvedena je i dijagonalna aproksimacija (RSSRPA(d)) u kojoj se zanemaruje međudjelovanje između 2p–2h konfiguracija u matrici $A_{22'}$ prilikom izračuna korekcije [213]

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_D^S &= \begin{pmatrix} A_{11'} + \sum_2 A_{12} \left(A_{22}^{\text{diag}} \right)^{-1} A_{21'} + \sum_2 B_{12} \left(A_{22}^{\text{diag}} \right)^{-1} B_{21'} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22}^{\text{diag}} \end{pmatrix}, \\ \mathcal{B}_D^S &= \begin{pmatrix} B_{11'} + \sum_2 A_{12} \left(A_{22}^{\text{diag}} \right)^{-1} B_{21'} + \sum_2 B_{12} \left(A_{22}^{\text{diag}} \right)^{-1} A_{21'} & B_{12} \\ B_{21} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.118)$$

Ta aproksimacija značajno smanjuje računski trošak, a daje rezultate slične potpunoj verziji RSSRPA za GMR i GDR, uz mali sustavni pomak prema višim energijama u odnosu na potpuni oblik. Metoda suptrakcije, bez obzira na primjenu u punom obliku ili unutar dijagonalne aproksimacije, osigurava fizikalno utemeljene, stabilne i konzistentne rezultate.

4.9 Snaga prijelaza i norma stanja

Jedna od fizikalnih veličina koju je potrebno istražiti je raspodjela snage prijelaza, definirana kao suma reduciranih vjerojatnosti prijelaza $B_F(E_\nu)$ za pobuđenja iz osnovnog stanja $|0\rangle$ u pobuđena stanja $|\nu\rangle$ pomoću vanjskog operatora pobuđenja $\hat{F}$ [111]:

$$\begin{aligned} R(E) &= \sum_\nu |\langle \nu | \hat{F} | 0 \rangle|^2 \delta(E - E_\nu) \\ &= \sum_\nu B_F(E_\nu) \delta(E - E_\nu). \end{aligned} \quad (4.119)$$

U ovom radu razmatraju se jednočestični operatori bez ovisnosti o spinu dani izrazima:

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\lambda M}^{\text{IS}} &= \sum_i r_i^k Y_{\lambda M}(\Omega_i), \\ \hat{F}_{\lambda M}^{\text{IV}} &= \sum_i r_i^k Y_{\lambda M}(\Omega_i) \hat{t}_z(i), \end{aligned} \quad (4.120)$$

za izoskalarni (IS) i izovektorski (IV) kanal. Za $\lambda = 0$, tj. monopolni slučaj, $k = 2$, dok za ostale vrijedi $\lambda = k$. Momenti prijelazne snage ponderirani energijom definirani su kao:

$$m_k = \sum_{\nu} E_{\nu}^k B_F(E_{\nu}), \quad (4.121)$$

iz kojih se središnja energija (centroid energije) dobiva kao:

$$\bar{E} = \frac{m_1}{m_0}, \quad (4.122)$$

gdje se momenti m_k mogu računati preko cijelog spektra pobuđenih stanja ili samo unutar eksperimentalnog prozora. Širina raspodjele ili rezonancije izražava se kao:

$$\Delta = \sqrt{\frac{m_2}{m_0} - \bar{E}^2}. \quad (4.123)$$

Unutar promatranog SRPA formalizma pobuđeno stanje $|\nu\rangle$ prikazuje se kao linearna kombinacija konfiguracija tipa čestica–šupljina, antičestica–šupljina i dvočestično–dvošupljinskih konfiguracija:

$$\begin{aligned} |\nu\rangle = & \sum_{ph} \left(X_{ph}^{(1)\nu} a_p^{\dagger} a_h - Y_{ph}^{(1)\nu} a_h^{\dagger} a_p \right) |\Phi_0\rangle + \sum_{\alpha h} \left(X_{\alpha h}^{(1)\nu} a_{\alpha}^{\dagger} a_h - Y_{\alpha h}^{(1)\nu} a_h^{\dagger} a_{\alpha} \right) |\Phi_0\rangle \\ & + \frac{1}{4} \sum_{pp'hh'} \left(X_{pp'hh'}^{(2)\nu} a_p^{\dagger} a_{p'}^{\dagger} a_{h'} a_h - Y_{pp'hh'}^{(2)\nu} a_h^{\dagger} a_{h'}^{\dagger} a_{p'} a_p \right) |\Phi_0\rangle. \end{aligned} \quad (4.124)$$

Prijelazni matrični element tada se računa kao

$$\langle \nu | \hat{F} | 0 \rangle = \sum_{ph} \left(f_{ph} X_{ph}^{(1)\nu} + f_{hp} Y_{ph}^{(1)\nu} \right) + \sum_{\alpha h} \left(f_{\alpha h} X_{\alpha h}^{(1)\nu} + f_{h\alpha} Y_{\alpha h}^{(1)\nu} \right), \quad (4.125)$$

gdje su $f_{ph} = \langle p | \hat{F} | h \rangle$ jednočestični prijelazni matrični elementi operatora $\hat{F}$. Doprinosi konfiguracija tipa $2p-2h$ u ovom se redu ne pojavljuju, budući da je operator $\hat{F}$ jednočestičnog oblika te ne povezuje referentno stanje $|\Phi_0\rangle$ izravno s $2p-2h$ konfiguracijama. Iako $2p-2h$ konfiguracije ne doprinose izravno prijelaznom matričnom elementu, one se putem SRPA jednadžbi miješaju s $1p-1h$ konfiguracijama. Posljedično, amplitude $X^{(1)\nu}$ i $Y^{(1)\nu}$ koje se pojavljuju u izrazu (4.125) već u sebi sadrže učinak vezanja s $2p-2h$ konfiguracijskim prostorom[224]. Uvjet normiranja RSRPA amplituda odražava proširenu kvazibozonsku strukturu pobuđenog stanja, odnosno

$$\mathcal{N}_{\nu} = \mathcal{N}_1 + \mathcal{N}_2 = 1, \quad (4.126)$$

gdje su

$$\begin{aligned}\mathcal{N}_1 &= \sum_{ph} \left(|X_{ph}^{(1)\nu}|^2 - |Y_{ph}^{(1)\nu}|^2 \right) + \sum_{\alpha h} \left(|X_{\alpha h}^{(1)\nu}|^2 - |Y_{\alpha h}^{(1)\nu}|^2 \right), \\ \mathcal{N}_2 &= \sum_{pp'hh'} \left(|X_{pp'hh'}^{(2)\nu}|^2 - |Y_{pp'hh'}^{(2)\nu}|^2 \right).\end{aligned}\tag{4.127}$$

4.10 Relativistička druga Tamm-Dancoff aproksimacija

U potrazi za numerički učinkovitijim rješenjima unutar konfiguracijskog prostora, korisno je razmotriti limes u kojem korelacijska matrica $\mathcal{B}$ iščezava, čime se općeniti RSRPA formalizam reducira na relativističku drugu Tamm-Dancoff aproksimaciju (RSTDA). Navedeno pojednostavljenje predstavlja ključnu polazišnu točku za sustavno istraživanje kolektivnih nuklearnih pobuđenja prvenstveno zbog značajne redukcije dimenzionalnosti problema. Naime, zanemarivanjem korelacija koje su sadržane u matrici $\mathcal{B}$, ukupna dimenzija matrične jednadžbe vlastitih vrijednosti reducira se dvostruko, što bitno olakšava numeričku dijagonalizaciju u proširenom prostoru. RSTDA formalizam zadržava ključne efekte miješanja između primarnih 1p–1h (1α –1h) i složenijih 2p–2h konfiguracija, a može se formulirati u obliku sljedeće matrične jednadžbe [146, 223]:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A}_{11}^S & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ \chi^\nu \end{pmatrix} = \omega_\nu \begin{pmatrix} X^\nu \\ \chi^\nu \end{pmatrix}.\tag{4.128}$$

Metoda suptrakcije, definirana u prethodnom potpoglavlju, ovdje je prilagođena RSTDA slučaju. Pritom je suptrahirani blok $\mathcal{A}_{11}^S$ definiran izrazom:

$$\mathcal{A}_{11'}^S = A_{11'} + \sum_{22'} A_{12} (A_{22'})^{-1} A_{2'1'}.\tag{4.129}$$

Kako bi se izvele konačne suptrahirane RSTDA (RSSTDA) jednadžbe, potrebno je zamijeniti izvorni blok A_{11} u jednadžbi (4.128) suptrahiranim blokom $\mathcal{A}_{11}^S$ (izraz (4.129)), što unutar relativističkog formalizma rezultira sljedećim matričnim zapisom:

$$\begin{pmatrix} A_{11'} + \sum_2 A_{12} (A_{22'})^{-1} A_{2'1'} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ \chi^\nu \end{pmatrix} = \omega_\nu \begin{pmatrix} X^\nu \\ \chi^\nu \end{pmatrix}.\tag{4.130}$$

U dijagonalnoj aproksimaciji RSSTDA (RSSTDA(d)) isključeno je međudjelovanje između 2p–2h konfiguracija, pa se matrica A_{22} sastoji samo od razlike vlastitih energija čestica i šupljina, te poprima dijagonalni oblik, kao i u slučaju RSSRPA:

$$\begin{pmatrix} A_{11'} + \sum_2 A_{12} (A_{22}^{\text{diag}})^{-1} A_{2'1'} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22}^{\text{diag}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ \chi^\nu \end{pmatrix} = \omega_\nu \begin{pmatrix} X^\nu \\ \chi^\nu \end{pmatrix}.\tag{4.131}$$

Reducirana snaga prijelaza $B_F(E_\nu)$ izračunava se isključivo unutar 1p–1h konfiguracijskog prostora, odnosno određena je amplitudama X_{ph} te jednočestičnim matričnim elementima prijelaza $f_{ph} = \langle p|\hat{F}|h\rangle$ i $f_{\alpha h} = \langle \alpha|\hat{F}|h\rangle$ [146]:

$$B_F^\lambda(E_\nu) = \left| \sum_{ph} f_{ph}^{\lambda(\nu)} X_{ph}^{\lambda(\nu)} + \sum_{\alpha h} f_{\alpha h}^{\lambda(\nu)} X_{\alpha h}^{\lambda(\nu)} \right|^2. \quad (4.132)$$

Ukoliko se zanemare 1p–1 α –2h i 2 α –2h konfiguracije, uvjet normalizacije RSTDA vlastitih stanja glasi:

$$\sum_{ph} |X_{ph}^\nu|^2 + \sum_{\alpha h} |X_{\alpha h}^\nu|^2 + \sum_{p_1 p_2 h_1 h_2} |\chi_{p_1 p_2 h_1 h_2}^\nu|^2 = \mathcal{N}_1 + \mathcal{N}_2 = 1. \quad (4.133)$$

Za 1p–1h, 1 α –1h i 2p–2h konfiguracije, pripadni doprinosi pojedinih konfiguracija RSTDA normi definirani su izrazima:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{1p1h} &= \sum_{ph} |X_{ph}^\nu|^2, \\ \mathcal{N}_{1\alpha1h} &= \sum_{\alpha h} |X_{\alpha h}^\nu|^2, \\ \mathcal{N}_{2p2h} &= \sum_{p_1 p_2 h_1 h_2} |\chi_{p_1 p_2 h_1 h_2}^\nu|^2, \end{aligned} \quad (4.134)$$

uz relacije $\mathcal{N}_1 = \mathcal{N}_{1p1h} + \mathcal{N}_{1\alpha1h}$ te $\mathcal{N}_2 = \mathcal{N}_{2p2h}$. U slučaju RTDA pristupa, uvjet normalizacije sveden je isključivo na prva dva člana u jednadžbi (4.133).

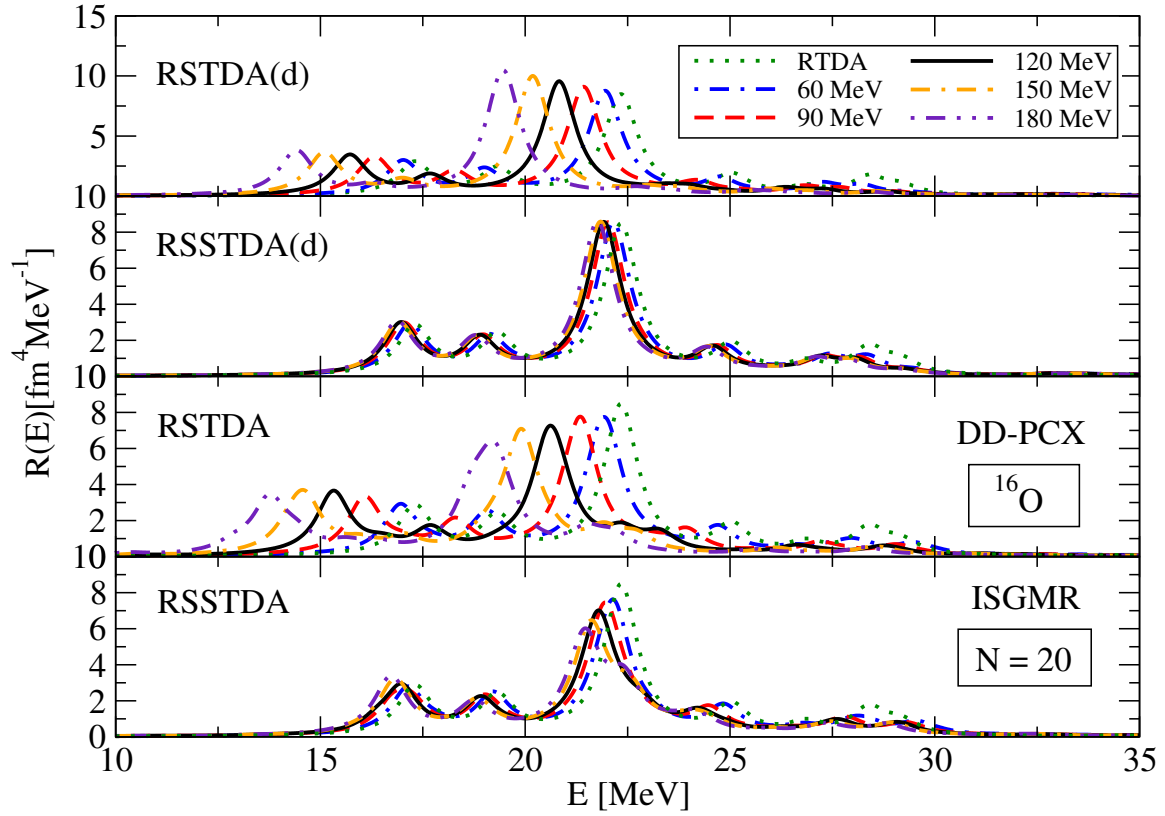
U svrhu sustavne analize i lakše interpretacije spektara pobuđenih stanja, rezultati su u narednim poglavljima strukturirani prema stupnju složenosti primijenjenih teorijskih modela. Predstavljanje rezultata započinje detaljnom analizom spektara GMR-a i GQR-a dobivenih pomoću RTDA, koja zbog svoje jednostavnije strukture i zanemarivanja korelacija u osnovnom stanju služi kao polazišna točka za razumijevanje miješanja 1p–1h (1 α –1h) i 2p–2h konfiguracija.

5 REZULTATI DRUGE TAMM-DANCOFF APROKSIMACIJE

U ovom poglavlju prikazani su rezultati energijskih spektara za ISGMR, IVGMR, ISGQR i IVGQR koji su dobiveni pomoću nekoliko varijanti relativističke STDA metode. Energije i valne funkcije jednočestičnih stanja osnovnog stanja dobivene su u okviru relativističke Hartreejeve aproksimacije rješavanjem Diracovih jednažbi koristeći bazu sfernih valnih funkcija harmoničkog oscilatora [66]. Baza uključuje stanja do vrijednosti glavnog kvantnog broja $N = 20$ za GMR i $N = 10$ za GQR, kako za osnovno, tako i za pobuđena stanja. Odabir 1p–1h i 2p–2h konfiguracija provodi se uzimajući u obzir izospin, paritet i ukupni moment kutne količine gibanja. Također se primjenjuje energijski odsječak (engl. *cutoff*), na način da se u slučaju 1p–1h konfiguracija promatraju neperturbirane energije prijelaza do 200 MeV, dok se za 1 α –1h konfiguracije, koje uključuju prijelaze u prazna stanja negativnih energija Diracova mora (označena s α), uzimaju u obzir one do 2000 MeV, kojima su obuhvaćene praktički sve raspoložive navedene konfiguracije. U slučaju 2p–2h konfiguracija, čiji broj znatno povećava dimenzije STDA matrice, uvodi se odgovarajući energijski odsječak koji se određuje tako da se osigura konvergencija u SSTDA izračunima.

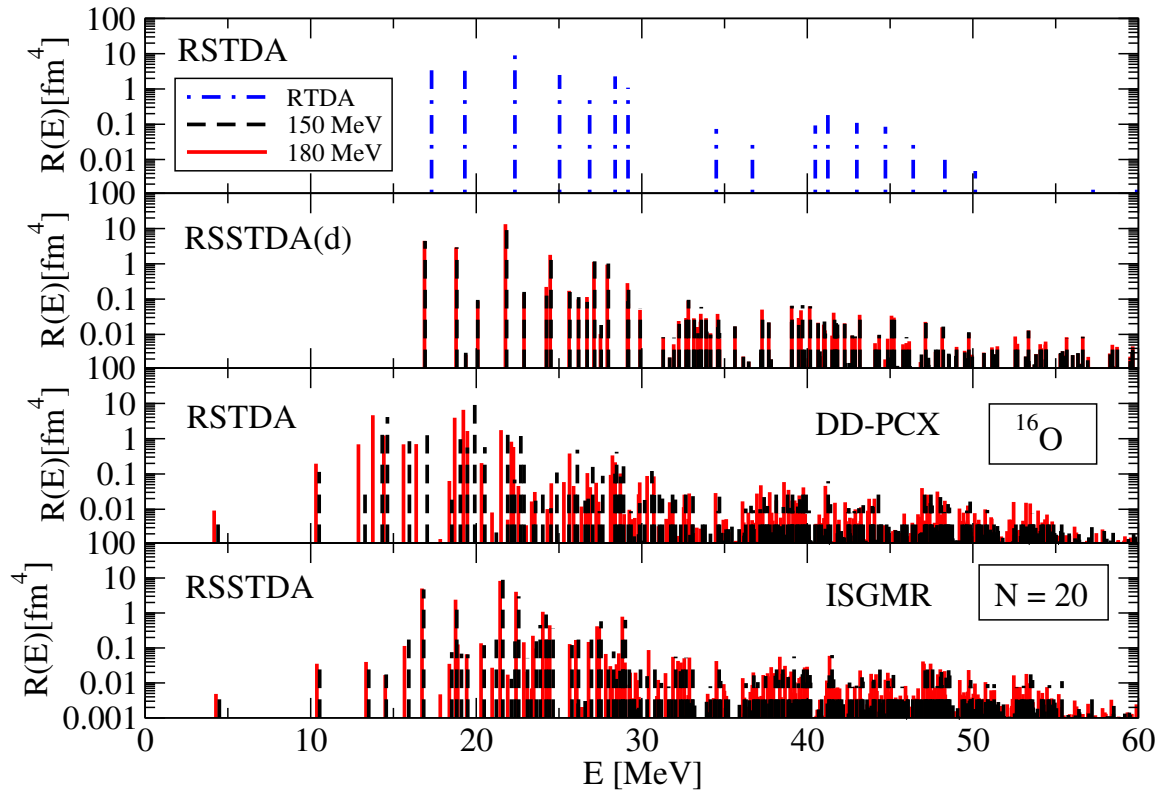
5.1 Raspodjela snage prijelaza za ISGMR

Slika 5.1 prikazuje raspodjelu snage ISGMR prijelaza (0^+) u ^{16}O izračunatu korištenjem nekoliko varijanti RSTDA zasnovanih na relativističkoj kontaktnoj interakciji s DD-PCX parametrizacijom i glavnim kvantnim brojem $N = 20$. Rezultati za navedene prijelaze dobiveni pomoću DD-PC1 međudjelovanja prikazani su u radu [146], dok su za nešto manji glavni kvantni broj ($N = 14$ i $N = 8$) predstavljeni u radovima [223, 224]. Radi osiguravanja glatke reprezentacije snage prijelaza, svi diskretni rezultati ugađeni su Lorentzovom funkcijom širine 1 MeV. Proračuni uključuju standardni i suptrahirani oblik STDA metode u potpunoj i dijagonalnoj aproksimaciji. Radi usporedbe, na slici 5.1 prikazani su i rezultati standardne RTDA. U potpunom obliku RSTDA i RSSTDA, svi članovi preraspodjele uključeni su u podmatrice A_{11} , A_{12} i A_{22} , dok u dijagonalnom slučaju podmatrice A_{22} nikakvo međudjelovanje između 2p–2h parova nije uzeto u obzir. RSTDA i RSTDA(d) rezultati su prikazani za 2p–2h energijske odsječke od 60, 90, 120, 150 i 180 MeV, pri čemu se opaža postupno pomicanje prema nižim energijama pobuđenja s povećanjem energijskog odsječka. Čak ni za vrlo visoke 2p–2h odsječke ($E_b \gtrsim 150$ MeV) nije uočena konvergencija RSTDA i RSTDA(d) spektra. S druge strane, RSSTDA i RSSTDA(d) izračuni pokazuju konvergenciju svih glavnih vrhova pri povećanju energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija sa 150 na 180 MeV, uz pomake položaja prema nižim energijama pri spomenutoj promjeni koja je u pravilu najviše $\Delta E^{\text{SSTDA}} \lesssim 170$ keV i $\Delta E^{\text{SSTDA(d)}} \lesssim 100$ keV.



Slika 5.1: Raspodjela snage ISGMR prijelaza za jezgru ^{16}O , dobivena korištenjem različitih varijanti RSTDA (vidjeti u tekstu). Zelena točkasta linija označava referentni RTDA račun, dok preostale linije predstavljaju izračune za različite vrijednosti energijskog odsječka (engl. *cutoff*) neperturbiranih dvočestično-dvošupljinskih ($2p-2h$) konfiguracija: 60, 90, 120, 150 i 180 MeV.

Slika 5.2 prikazuje diskretnu raspodjelu snage za ISGMR prijelaz, otkrivajući detaljniju fragmentaciju stanja, s velikim brojem novih stanja miješane i pretežito $2p-2h$ prirode ($N_2 \gtrsim 0.99$). U usporedbi s RTDA, za $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV (180 MeV) svi glavni vrhovi ($R \gtrsim 0.1 \text{ fm}^4$) pretežno $1p-1h$ prirode ($N_1 \gtrsim 0.8$) i oni mješovite prirode ispod energije pobuđenja $E = 30$ MeV u RSTDA i RSTDA(d) pomaknuti su prema nižim energijama do približno 3 MeV odnosno 2.5 MeV. Daljnjim povećanjem energijskog odsječka, standardna RSTDA ne pokazuje konvergenciju u pomaku energija pobuđenja ni snazi. Za RSSTDA i RSSTDA(d), pomaci energija ograničeni su do otprilike 1 MeV u usporedbi s RTDA. Ključna razlika između RSSTDA i RSSTDA(d) leži u odsutnosti međudjelovanja između $2p-2h$ stanja u potonjem, što rezultira nešto manje izraženom fragmentacijom. To implicira manji broj pretežito $2p-2h$ stanja sa smanjenom snagom prijelaza ($R \gtrsim 0.001 \text{ fm}^4$) između glavnih $1p-1h$ i mješovitih vrhova u donjem ($E \lesssim 20$) i središnjem dijelu spektra ($20 \lesssim E \lesssim 40$ MeV).



Slika 5.2: Diskretna raspodjela snage ISGMR za jezgru ^{16}O .

5.2 Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacijskog pravila za ISGMR

U tablici 5.1 prikazane su vrijednosti energijskih momenata raspodjele (vidjeti izraz (4.121)) prijelazne snage za ISGMR u jezgri ^{16}O . U usporedbi s RTDA rezultatom, RSSTDA i RSSTDA(d) daju gotovo identične vrijednosti nultog momenta m_0 u cijelom spektru. Sve tri metode predviđaju vrijednosti u rasponu od 28.375 do 28.383 fm^4 (vidjeti tablicu 5.1), što pokazuje da uključivanje 2p–2h konfiguracija ne utječe značajno na integrirani intenzitet prijelaza. Unutar eksperimentalnog energijskog prozora [11, 40] MeV prema [23], sve metode bilježe smanjenje m_0 u odnosu na vrijednosti dobivene u cijelom rasponu (vidjeti tablicu 5.2). RTDA u tom slučaju daje 27.495 fm^4 , dok RSSTDA(d) i RSSTDA predviđaju 26.575, odnosno 26.033 fm^4 . Dakle, formalizam sa suptrakcijom, uzrokuje dodatno smanjenje nultog momenta unutar eksperimentalnog prozora [23], čime se snaga prijelaza dijelom premješta izvan energijskog intervala dostupnog u mjerenju. Ovo pokazuje da se proširenje prostora konfiguracija ne odražava u povećanju ukupne vrijednosti m_0 , već prvenstveno u redistribuciji snage.

Moment prvog reda m_1 pokazuje izraženiju osjetljivost na uključenje 2p–2h konfiguracija. U cijelom spektru RTDA predviđa 660.399 MeVfm^4 , dok RSSTDA(d) i RSSTDA daju više vrijednosti, 726.044 i 736.057 MeVfm^4 (vidjeti tablicu 5.1). To povećanje iznosi približno 11% u odnosu na RTDA, što pokazuje da prošireni formalizam značajno mijenja energijski ponderirani

Tablica 5.1: Energijski momenti izoskalarnih 0^+ prijelaza dobiveni pomoću RTDA, RSSTDA(d) i RSSTDA za ^{16}O primjenom DD-PCX kontaktnog međudjelovanja. Za RSSTDA(d) i RSSTDA korišten je energijski odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RTDA	RSSTDA(d)	RSSTDA	Exp. [23]
m_0 [fm ⁴]	28.383	28.375	28.375	
m_1 [MeVfm ⁴]	660.399	726.044	736.057	
m_2 [MeV ² fm ⁴]	16663.36	27007.99	27771.14	
m_{-1} [MeV ⁻¹ fm ⁴]	1.274	1.274	1.274	
m_1/m_0 [MeV]	23.268	25.588	25.940	21.13±0.49
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	22.766	23.871	24.035	19.63±0.38
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	28.149	50.546	50.830	24.89±0.59
Δ [MeV]	6.761	17.237	17.488	8.76±1.82
EWSR[%]	90.62	99.63	101.00	48±10

sadržaj prijelaza. Unutar eksperimentalnog prozora opaža se suprotan trend. Naime, RTDA daje 616.621 MeVfm⁴, dok RSSTDA(d) i RSSTDA predviđaju 581.532 i 566.876 MeVfm⁴ (vidjeti tablicu 5.2). U radu [119] dobiven je sličan porast m_1 momenta, odnosno približno 7.5 % (9.5 %) za slučaj nerelativističkog SSRPA(d) (SSRPA) izračuna u usporedbi s RPA vrijednosti. Slična pojava uočava se i kod momenta drugog reda m_2 . U cijelom spektru njegova se vrijednost povećava u odnosu na RTDA (16663.36 MeV²fm⁴) za približno 62% u RSSTDA(d) i 67% u RSSTDA, dok unutar prozora [11, 40] MeV m_2 u odnosu na RTDA vrijednost (14155.25 MeV²fm⁴) bilježi pad od oko 7.4% u RSSTDA(d) i 9.7% u RSSTDA. Ovakav obrazac ukazuje da RSSTDA i RSSTDA(d) koncentriraju dio snage u energijama iznad 40 MeV.

Tablica 5.2: Slično kao u tablici 5.1, ali unutar energijskog prozora pobuđenja od 11 do 40 MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RTDA	RSSTDA(d)	RSSTDA	Exp. [23]
m_0 [fm ⁴]	27.495	26.575	26.033	
m_1 [MeVfm ⁴]	616.621	581.532	566.876	
m_2 [MeV ² fm ⁴]	14155.25	13107.38	12783.82	
m_{-1} [MeV ⁻¹ fm ⁴]	1.255	1.247	1.233	
m_1/m_0 [MeV]	22.426	21.883	21.776	21.13±0.49
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	22.168	21.593	21.440	19.63±0.38
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	23.225	22.919	23.008	24.89±0.59
Δ [MeV]	3.447	3.790	4.110	8.76±1.82
EWSR[%]	84.61	79.80	77.79	48±10

Inverzni moment m_{-1} u cijelom spektru identičan je za sve tri metode i iznosi 1.274 MeV⁻¹fm⁴, što upućuje na to da uključivanje 2p–2h konfiguracija nema zamjetan utjecaj na ovaj moment kod

proučavanja kompletnog pozitivnog dijela spektra. Unutar eksperimentalnog prozora razlike su izraženije pa RTDA daje 1.255, RSSTDA(d) 1.247, a RSSTDA 1.233 MeV⁻¹fm⁴, što odgovara smanjenju od oko 2% pri prelasku s RTDA na RSSTDA. Inverzni energijski moment m_{-1} osjetljiv je na niskoenergijski dio spektra i ima ključnu ulogu u evaluacijama pravila sume, osobito u kontekstu kompresijskih modova. Unatoč uključivanju 2p–2h konfiguracija, vrijednost m_{-1} ostaje izuzetno stabilna u svim primijenjenim modelima. Varijacije su ispod 0.001 MeV⁻¹fm⁴, što ukazuje na to da je m_{-1} izrazito robustan fizikalni pokazatelj u teorijskim razmatranjima (vidjeti tablicu 5.1). Nadalje, takva postojanost upućuje na to da svi pristupi reproduciraju istu statičku izoskalarnu polarizabilnost, odnosno istu nuklearnu kompresibilnost. Stabilnost momenta m_{-1} implicira da su teorijski pristupi međusobno konzistentni te da razlike među modelima utječu isključivo na dinamičku redistribuciju snage, a ne na ukupnu veličinu statičkog monopolnog odziva. Slična je pojava uočena i u nerelativističkim modelima, gdje moment m_{-1} ostaje praktički nepromijenjen između SSRPA i RPA izračuna [119]. Međutim, u nerelativističkim modelima pojavljuje se zamjetno odstupanje kada se primijeni dijagonalna aproksimacija, što ukazuje na djelomičan gubitak samosuglasnosti koji proizlazi iz izostavljanja međudjelovanja među 2p–2h konfiguracijama pri inverznom izračunu matrice A_{22} tijekom provođenja postupka suptrakcije, odnosno pri izračunu A_{11}^S , dok se istodobno matrica A_{22} zadržava u potpunom obliku u $\mathcal{A}_D^S$ [117, 119]. Nasuprot tome, ovdje je dijagonalna aproksimacija matrice A_{22} primijenjena dosljedno tijekom cjelokupnog postupka suptrakcije, i to u svim aproksimacijama, odnosno RSTDA(d) i RSSTDA(d). Iako nije eksplicitno prikazano u tablici 5.1, uočeno je da i RSTDA i RSTDA(d) rezultati za ISGMR očuvaju m_0 i m_1 momente unutar odstupanja $\sim 0.1\%$, a time i EWSR, u usporedbi s pripadnim RTDA vrijednostima. Nasuprot tome, SRPA računi u radu [111] pokazuju blago odstupanje u m_0 momentu, koje iznosi približno 3% u usporedbi s odgovarajućim RPA rezultatom, dok istovremeno očuvaju m_1 moment. Slično je uočeno i prilikom upotrebe drugog kontaktnog međudjelovanja, odnosno DD-PC1 parametrizacije [146].

Srednja energija prijelaza (centroid energije), dana omjerom energijskih momenata m_1/m_0 , daje informaciju o prosječnoj energiji pobuđenja raspodjele prijelazne snage. U cijelom spektru raste uključivanjem 2p–2h konfiguracija, odnosno RTDA predviđa 23.268 MeV, dok RSSTDA(d) i RSSTDA daju nešto više vrijednosti, 25.588 i 25.940 MeV. Ove razlike jasno pokazuju da središnja energija prijelaza osjetljivo reagira na proširenje prostora konfiguracija. Unutar eksperimentalnog prozora razlike su znatno manje, pri čemu vrijednost za RTDA iznosi 22.426 MeV, dok RSSTDA(d) pokazuje pad od približno 2.4% (na 21.883 MeV), a RSSTDA pad od oko 2.9% (na 21.776 MeV). Sve metode predviđaju nešto više vrijednosti od eksperimentalne referentne energije 21.13 ± 0.49 MeV, pri čemu RSSTDA(d) i RSSTDA smanjuju odstupanje u odnosu na RTDA. Slično je uočeno u radu [117] gdje je uočen pomak od nekoliko MeV prema višim energijama u nerelativističkoj SSRPA raspodjeli monopolne prijelazne snage u odnosu na RPA slučaj, uslijed povećanja 2p–2h odsječka (cutoffa) do 70 MeV.

Efektivna energija $\sqrt{m_1/m_{-1}}$ u cijelom spektru raste s 22.77 MeV (RTDA) na 23.87 MeV (RSSTDA(d)) i 24.04 MeV (RSSTDA). U eksperimentalnom prozoru vrijednosti su nešto niže,

tako da za RTDA imamo 22.17 MeV, za RSSTDA(d) 21.59 MeV i za RSSTDA 21.44 MeV. Sve tri aproksimacije sustavno prelaze eksperimentalnu vrijednost od (19.63 ± 0.38) MeV, što ukazuje na dosljedno precjenjivanje efektivne energije ($\sqrt{m_1/m_{-1}}$) i na moguću potrebu za uključivanjem dodatnih korelacija na RH razini za opis osnovnog stanja, odnosno proširenja RSTDA tako da uključuje i konfiguracije iznad 2p–2h razine. Veličina $\sqrt{m_3/m_1}$ pokazuje najveće promjene u cijelom spektru, pri čemu RTDA daje 28.149 MeV, dok RSSTDA(d) i RSSTDA dosežu vrijednosti od 50.546 i 50.830 MeV. Unutar eksperimentalnog prozora sve tri metode konvergiraju na vrijednosti 23.225 za RTDA, 22.919 za RSSTDA(d) i 23.008 MeV za RSSTDA, što se nalazi u relativno dobrom slaganju s eksperimentalnim podatkom (24.89 ± 0.59) MeV. Time se potvrđuje da razlike među metodama postaju izrazite tek kada se promatra cijeli energijski raspon, dok su unutar eksperimentalnog prozora (11–40 MeV) znatno ublažene [23].

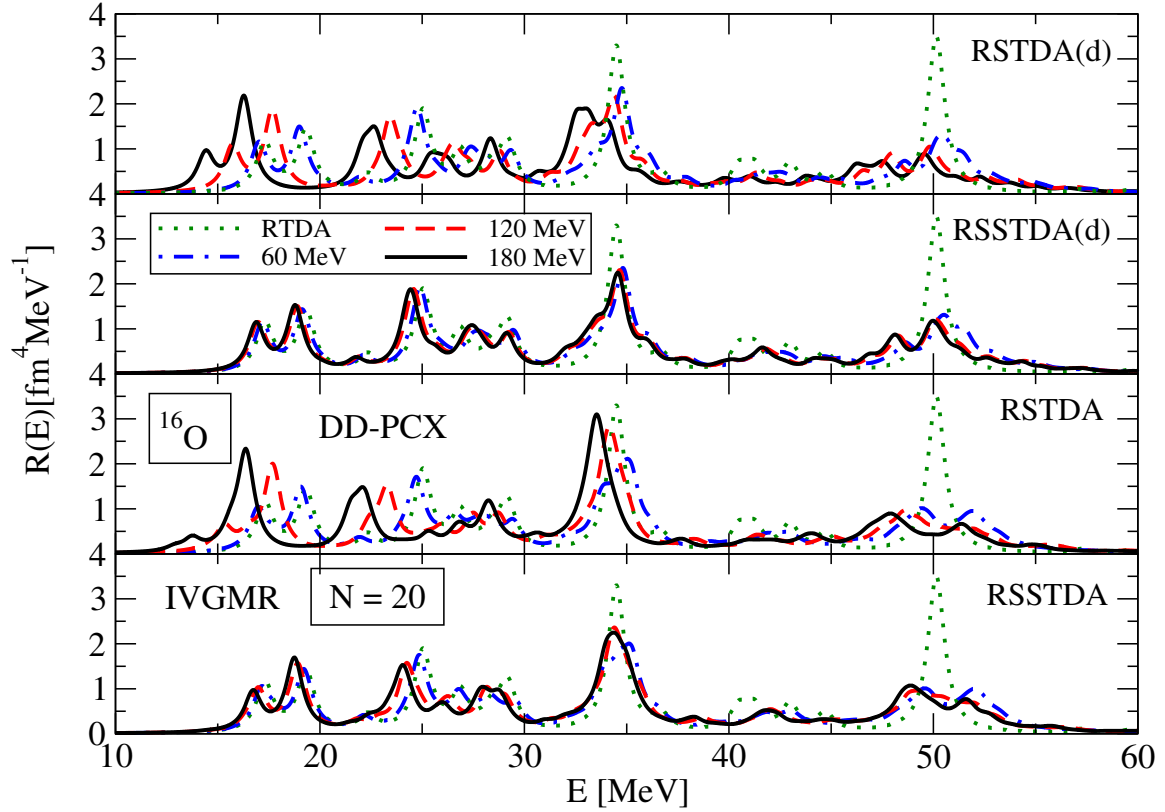
Širina raspodjele Δ u cijelom spektru značajno raste uključivanjem 2p–2h konfiguracija. Dok RTDA predviđa 6.76 MeV, RSSTDA(d) i RSSTDA daju 17.24 i 17.49 MeV, što ukazuje na gotovo trostruko povećanje. Navedenim se potvrđuje da prošireni modeli predviđaju šire raspoređivanje snage u cijelom rasponu energija. U eksperimentalnom prozoru širine su znatno manje, odnosno 3.45 MeV u RTDA, 3.79 MeV u RSSTDA(d) i 4.11 MeV u RSSTDA. Iako se u slučaju RSSTDA širina unutar prozora povećala za ≈ 0.7 MeV u odnosu na RTDA, sve vrijednosti i dalje ostaju ispod eksperimentalne širine od (8.76 ± 1.82) MeV, što upućuje na nedostatan opisane mehanizme prigušenja.

Konačno, energijski ponderirano sumacijsko pravilo (EWSR) u cijelom rasponu iznosi 90.62% za RTDA, dok se kod RSSTDA(d) i RSSTDA povećava na 99.63% i 101.00%. Unutar eksperimentalnog prozora, međutim, RTDA ostvaruje 84.61%, a vrijednosti za RSSTDA(d) i RSSTDA padaju na 79.80% i 77.79%. Sve teorijske vrijednosti i dalje nadmašuju eksperimentalnu procjenu od $(48 \pm 10)\%$, no prošireni modeli daju blaže precjenjivanje u odnosu na RTDA. Ovi rezultati pokazuju da RSSTDA i RSSTDA(d) povećavaju ukupno ispunjenje EWSR-a u cijelom spektru, ali unutar eksperimentalnog prozora ipak bolje reproduciraju relativnu raspodjelu snage.

5.3 Raspodjela snage prijelaza za IVGMR

Slika 5.3 prikazuje raspodjele prijelazne snage za IVGMR u ^{16}O , izračunate korištenjem prethodno opisanih aproksimacija (RTDA, RSTDA, RSTDA(d), RSSTDA i RSSTDA(d)) zasnovanih na relativističkoj kontaktnoj interakciji s DD-PCX parametrizacijom i za različite energijske odsječke za 2p–2h konfiguracije (60, 120 i 180 MeV). Dok slika 5.3 prikazuje raspodjele izgladene Lorentzovom funkcijom, slika 5.4 prikazuje pripadne diskretne raspodjele snage prijelaza za RTDA, RSTDA, RSSTDA i RSSTDA(d), za energije odsječka 2p–2h konfiguracija od 150 i 180 MeV.

RTDA aproksimacija pokazuje izraženije vrhove u višem dijelu spektra. Suprotno tome,

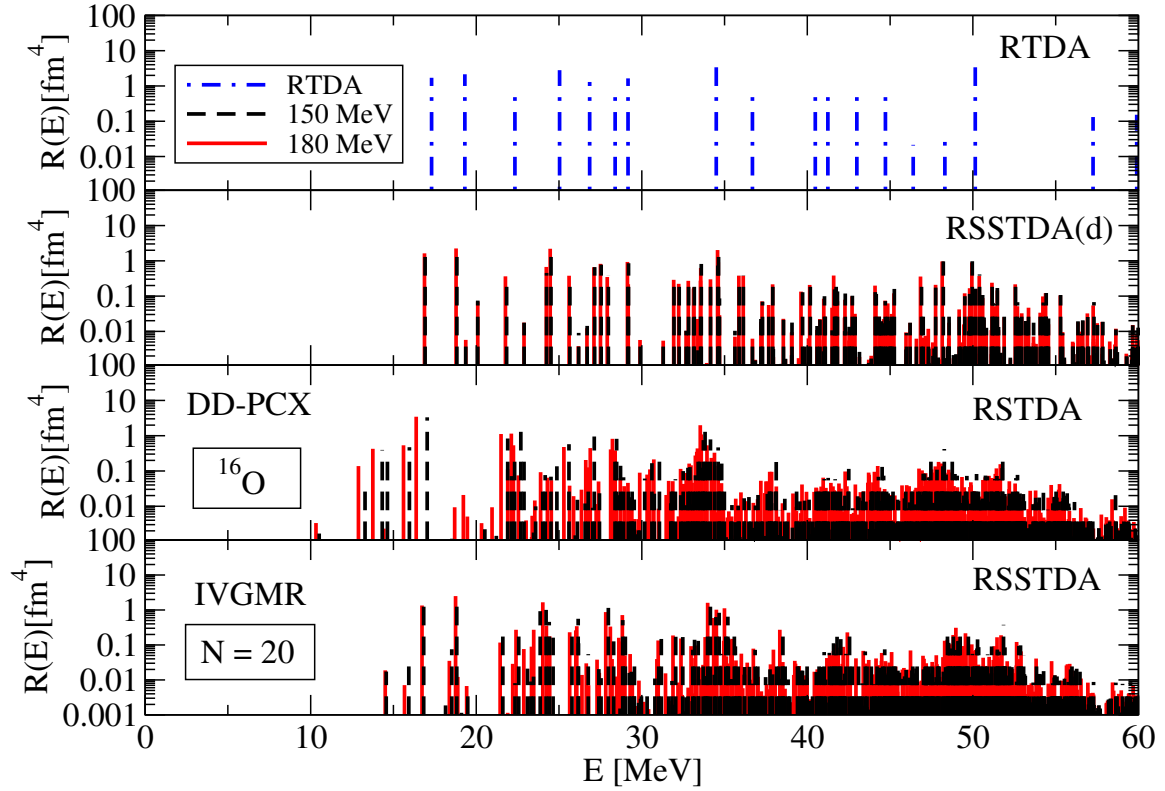


Slika 5.3: Isto kao na slici 5.1, ali za raspodjelu snage IVGMR.

RSTDA aproksimacija smanjuje snagu visokih vrhova i pomiče glavne vrhove prema nižim energijama, s primjetnom fragmentacijom stanja, osobito pri većim energijskim odsječcima. Ova fragmentacija ukazuje na složenije međudjelovanje između nuklearnih stanja. RSSTDA i RSSTDA(d), koje uključuju dodatne korekcije, pokazuju manju fragmentaciju i stabilniju raspodjelu. RSSTDA(d) posebno sadrži manji broj 2p–2h stanja s konačnim doprinosom većim od 10^{-3} fm^4 zbog odsustva međudjelovanja među tim konfiguracijama, što rezultira nešto manjim prijelaznim snagama i koncentriranijom raspodjelom oko glavnih 1p–1h stanja. Pri 2p–2h energijskom odsječku od 150 MeV, dolazi do značajnog pomaka vrhova, do otprilike 2.5 MeV u RSTDA u usporedbi s RTDA. RSSTDA i RSSTDA(d) pokazuju veću stabilnost, s pomacima ograničenima do $\approx 1 \text{ MeV}$. Kada se energijski odsječak poveća na 180 MeV, RSTDA vrhovi dodatno se pomiču prema nižim energijama za $\Delta E_x \approx 1 \text{ MeV}$ za stanja s $E_x \lesssim 40 \text{ MeV}$, dok RSSTDA i RSSTDA(d) pokazuju konvergenciju, s dodatnim malim pomacima prema nižim energijama od približno 170 keV, odnosno 100 keV.

5.4 Raspodjela snage prijelaza za ISGQR

Raspodjele prijelazne snage za izoskalarnu gigantsku kvadrupolnu rezonanciju (ISGQR) u ^{16}O , izračunate pomoću RSTDA, RSTDA(d), RSSTDA i RSSTDA(d) za različite energijske

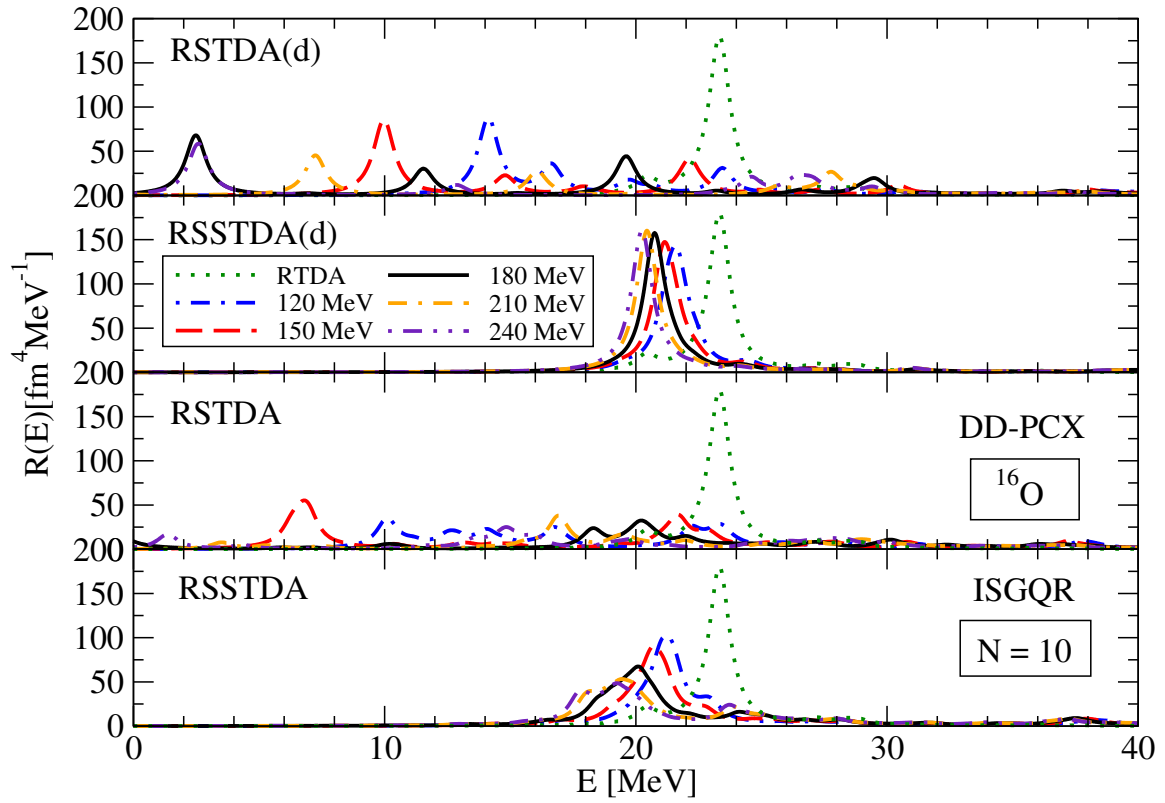


Slika 5.4: Isto kao na slici 5.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGMR.

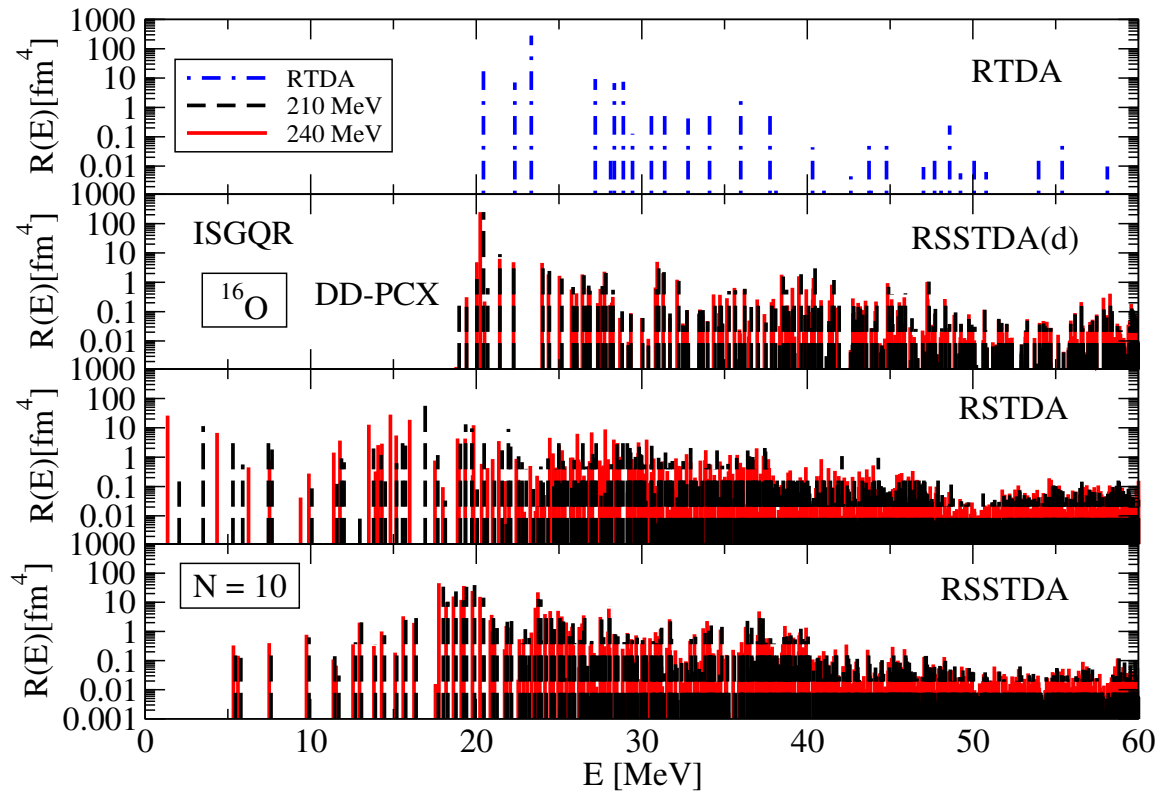
odsječke 2p–2h konfiguracija (od 120 do 240 MeV), prikazane su na slici 5.5. Pripadajuće prijelazne snage za diskretne spektre, dobivene za energijske odsječke od 210 i 240 MeV, prikazane su na slici 5.6. Zbog računalnih ograničenja, u ovim je proračunima korištena baza do najvećeg glavnog kvantnog broja $N = 10$.

Kao što je prikazano na slici 5.5, dominantni vrh u RTDA aproksimaciji razdvaja se na više vrhova u RSTDA, već pri nižim energijskim 2p–2h odsječcima od $E_{\text{cutoff}} = 60$ MeV, kada se uključe međudjelovanja između 1p–1h i 2p–2h konfiguracija. RSTDA pokazuje izraženu fragmentaciju raspodjele snage, s nešto bržim pomakom vrhova prema nižim energijama u odnosu na ISGMR i IVGMR pri porastu 2p–2h odsječaka. Za razliku od slučajeva ISGMR i IVGMR, gdje postoji mala razlika između RSTDA i RSTDA(d) spektra, uključivanje međudjelovanja između 2p–2h konfiguracija ovdje ima ključnu ulogu u oblikovanju raspodjele prijelazne snage. To dovodi do većih pomaka energija i značajnih promjena u snazi prijelaza. Na primjer, za najniži dominantni vrh (ispod 15 MeV), razlika između RSTDA i RSTDA(d) iznosi otprilike 2 MeV za $E_{\text{cutoff}} = 120$ MeV, odnosno 2.5 MeV za $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV.

Za veće odsječke 2p–2h energija, odnosno ($E_{\text{cutoff}} \gtrsim 150$ MeV), dio prijelazne snage u slučaju RSTDA i RSTDA(d) prelazi u negativni nefizikalni dio spektra. S druge strane, RSSTDA aproksimacija pokazuje stabilnije raspodjele s manje izraženom fragmentacijom u usporedbi s RSTDA, osobito pri višim odsječcima. Suptrakcijska metoda eliminira divergenciju i dodatno fragmentira dominantni prijelaz u više vrhova raspoređenih između 15 i 25 MeV. Pored spome-



Slika 5.5: Isto kao na slici 5.1, ali za raspodjelu snage ISGQR.



Slika 5.6: Isto kao na slici 5.2, ali za diskretnu raspodjelu snage ISGQR.

nutog, u RSSTDA izračunima javlja se 12 niskoenergijskih 2p–2h stanja ($N_2 \gtrsim 0.99$) već za $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 60$ MeV, koja oblikuju spektar pobuđenja ispod $E_x \lesssim 17$ MeV i pokazuju slabu ovisnost o izboru energijskog odsječka. Za $E_{\text{cutoff}} \lesssim 150$ MeV, pretežno 1p–1h i miješani vrhovi ispod 25 MeV u RSSTDA pomiču se prema nižim energijama za nekoliko stotina keV svakih 30 MeV. Međutim, za $E_{\text{cutoff}} > 150$ MeV, raspodjela prijelazne snage pokazuje tendenciju konvergencije, pri čemu se za $E_{\text{cutoff}} = 210$ MeV energijski pomaci položaja stanja stabiliziraju na manje od ≈ 100 keV po povećanju $\Delta E_{\text{cutoff}} = 30$ MeV.

Slična ponašanja opažena su i u niskoenergijskim nerelativističkim RSRPA izračunima temeljenim na Skyrme funkcionalu [117]. U RSSTDA(d), većina snage sadržana je u jednom stanju, što ukazuje na manje izraženu fragmentaciju, a vrhovi se pomiču prema nižim energijama uz sličnu stopu konvergencije. Primjerice, pomak energije glavnog stanja smanjuje se za otprilike 30–40% svakih 30 MeV unutar raspona od 90 do 240 MeV.

5.5 *Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacijskog pravila za ISGQR*

U Tablici 5.3 prikazani su energijski momenti ISGQR prijelaza za jezgru ^{16}O , izračunati pomoću RTDA, RSSTDA(d) i RSSTDA uz primjenu DD-PCX kontaktnog međudjelovanja. Tablica omogućuje usporedbu globalnih opservabli na cijelom energijskom spektru, pri čemu su u proširenim modelima uključene 2p–2h konfiguracije s energijskim odsječkom $E_{\text{cutoff}} = 210$ MeV. Rezultati unutar eksperimentalnog prozora od 11 do 40 MeV [23], zajedno s detaljnijom usporedbom s eksperimentom, prikazani su zasebno u tablici 5.4. Ovakva podjela omogućuje razlikovanje svojstava cijelog spektra od onih koji izravno doprinose eksperimentalno opaženoj ISGQR rezonanciji. Izračun energijskih momenata proveden je nad skupom pozitivnih svojstvenih energija do gornje granice od 180 MeV.

U odnosu na RTDA, uočeno je da RSSTDA(d) i RSSTDA predviđaju nešto manji iznos momenta m_0 , pri čemu RSSTDA(d) pokazuje apsolutno smanjenje od 14.593 fm^4 (oko 4.2%), dok se u RSSTDA ostvaruje smanjenje od 13.080 fm^4 (oko 3.8%) u odnosu na RTDA. Unutar eksperimentalnog prozora od 11 do 40 MeV pad je još izraženiji. RSSTDA(d) daje 299.496 fm^4 , RSSTDA 303.339 fm^4 , dok RTDA predviđa 344.060 fm^4 (vidjeti tablicu 5.4). Relativno smanjenje m_0 u odnosu na RTDA iznosi približno 12.9% i 11.8%. Promatra li se prvi energijski moment m_1 , u proširenim se pristupima uočava porast u odnosu na RTDA. U usporedbi s RTDA vrijednošću, RSSTDA(d) pokazuje apsolutno povećanje od 625.478 MeVfm^4 , što odgovara relativnom porastu od približno 7.6%, dok RSSTDA ostvaruje povećanje od 866.747 MeVfm^4 , odnosno oko 10.5%. U eksperimentalnom prozoru energijski moment m_1 pokazuje značajno relativno smanjenje u odnosu na RTDA vrijednost od 8127.507 MeVfm^4 . U slučaju RSSTDA(d) ta se vrijednost smanjuje za približno 20.4%, dok puna RSSTDA dovodi do smanjenja od oko 14.8%.

Tablica 5.3: Slično kao u tablici 5.1, ali za ISGQR u ^{16}O . Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RTDA	RSSTDA(d)	RSSTDA	Exp. [23]
m_0 [fm ⁴]	345.645	331.052	332.565	
m_1 [MeVfm ⁴]	8242.724	8868.202	9109.471	
m_2 [MeV ² fm ⁴]	204036.0	376597.4	374224.7	
m_{-1} [MeV ⁻¹ fm ⁴]	14.688	14.622	14.632	
m_1/m_0 [MeV]	23.847	26.788	27.392	19.76±0.22
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	23.690	24.627	24.951	
EWSR [%]	90.27	97.12	99.76	53±10

Centroid energije m_1/m_0 u cijelom spektru također reagira na proširenje prostora konfiguracija. Uzimajući u obzir svojstvene energije $E \leq 180$ MeV, RTDA predviđa 23.847 MeV, dok RSSTDA(d) i RSSTDA daju 26.788 i 27.392 MeV s povećanjem za približno 12% i 15% u odnosu na RTDA slučaj. U eksperimentalnom prozoru centroidi energije su niži. RTDA daje 23.622 MeV dok RSSTDA(d) i RSSTDA daju 21.606 i 22.829 MeV, što odgovara smanjenju od 8.5% i 3.4%. Omjer $\sqrt{m_1/m_{-1}}$ u pozitivnom dijelu spektra RSSTDA(d) i RSSTDA pokazuje povećanje od približno 4.0% i 5.3%, dok u eksperimentalnom prozoru dolazi do smanjenja od približno 9.0% i 5.7% u odnosu na RTDA. U eksperimentalnom prozoru (11–40 MeV), veličina $\sqrt{m_3/m_1}$ jasno oslikava utjecaj različitih razina aproksimacije unutar 2p–2h prostora. Dok uvođenje samo dijagonalnih doprinosa u slučaju RSSTDA(d) dovodi do blagog smanjenja vrijednosti na 22.603 MeV (u usporedbi s RTDA vrijednošću od 23.940 MeV), uključivanje međudjelovanja između 2p–2h konfiguracija u punoj RSSTDA uzrokuje umjeren porast na 25.321 MeV. Ovakvo ponašanje ukazuje na primjetan, ali ne i značajan utjecaj strukture A_{22} matrice na raspodjelu viših energijskih momenata unutar spomenutog energijskog prozora.

Tablica 5.4: Slično kao u tablici 5.2, ali za ISGQR u ^{16}O , izračunato u energijskom intervalu od 11 do 40 MeV dostupnom eksperimentu. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RTDA	RSSTDA(d)	RSSTDA	Exp. [23]
m_0 [fm ⁴]	344.060	299.496	303.339	
m_1 [MeVfm ⁴]	8127.507	6470.857	6924.990	
m_2 [MeV ² fm ⁴]	193573.0	143506.6	168939.9	
m_{-1} [MeV ⁻¹ fm ⁴]	14.662	14.105	14.038	
m_1/m_0 [MeV]	23.622	21.606	22.829	19.76±0.22
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	23.544	21.419	22.210	
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	23.940	22.603	25.321	
Δ [MeV]	2.145	3.514	5.980	5.11± 0.17
EWSR [%]	89.01	70.87	75.84	53±10

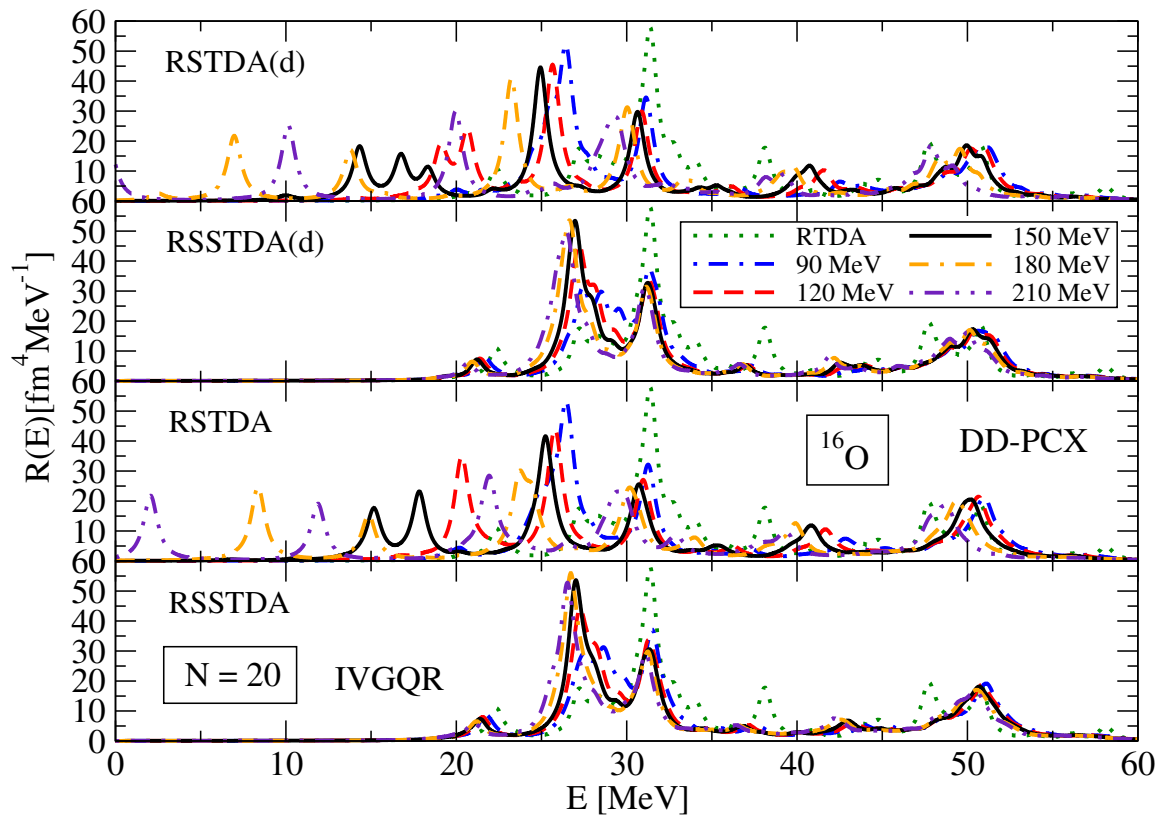
Širina rezonancije Δ također pokazuje promjene. U energijskom prozoru [11, 40] MeV

RTDA i RSSTDA(d) daju širine manje od eksperimentalne vrijednosti (5.11 ± 0.17) MeV, odnosno 2.145 i 3.514 MeV, dok RSSTDA daje nešto veću širinu, odnosno 5.980 MeV, koja je usporediva s eksperimentalnom vrijednošću. Usporedba RSSTDA(d) i RSSTDA unutar energijskog prozora pokazuje da puna suptrahirana shema daje veće širenje snage prijelaza, što ujedno znači i jaču fragmentaciju kolektivnog moda. Konačno, energijski ponderirano sumacijsko pravilo EWSR u cijelom rasponu pozitivnog dijela spektra iznosi 90.27% u RTDA dok RSSTDA(d) i RSSTDA postižu 97.12% i 99.76%. U eksperimentalnom prozoru vrijednosti su niže. RTDA daje 89.01% dok RSSTDA(d) i RSSTDA daju 70.87% i 75.84%. Sve teorijske vrijednosti i dalje prelaze eksperimentalnu vrijednost od $(53 \pm 10)\%$ [23]. Prošireni modeli ipak pokazuju pomak snage izvan mjernog raspona, što se odražava na smanjene teorijske vrijednosti unutar prozora.

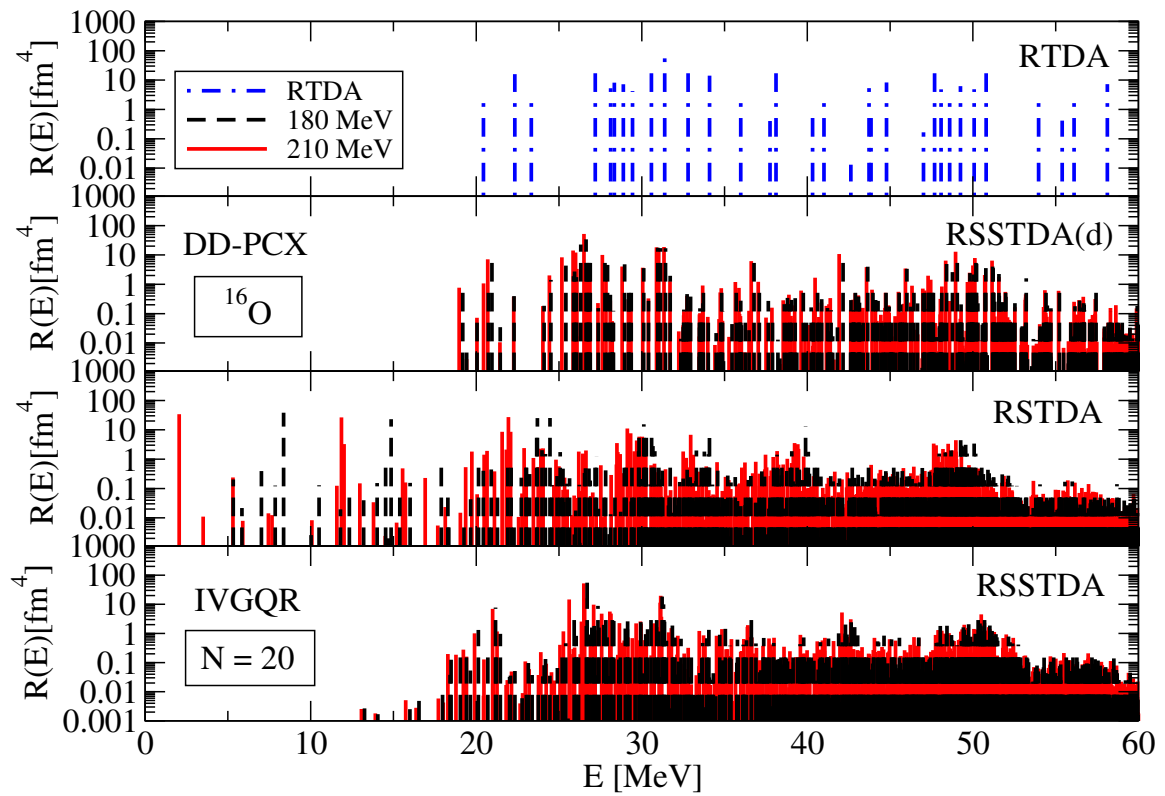
5.6 Raspodjela snage prijelaza za IVGQR

Na slici 5.7 prikazane su raspodjele prijelazne snage ugladene Lorentzovom funkcijom za izovektorsku gigantsku kvadrupolnu rezonanciju (IVGQR) u jezgri ^{16}O , dok je na slici 5.8 prikazana odgovarajuća diskretna raspodjela. Raspodjele su dobivene korištenjem istih aproksimacija kao za ISGQR, odnosno RTDA, RSTDA, RSTDA(d), RSSTDA i RSSTDA(d), s različitim vrijednostima energijskih odsječaka 2p–2h konfiguracija, odnosno od 90 do 210 MeV.

Rezultati za IVGQR kvalitativno su slični onima za ISGQR. Međutim, razlika između RSTDA i RSTDA(d) spektra je znatno manja u slučaju IVGQR, što ukazuje na manji utjecaj međudjelovanja među 2p–2h konfiguracijama u oblikovanju raspodjele izovektorske kvadrupolne snage (vidjeti sliku 5.8). Sličan trend opaža se i prilikom primjene metode suptrakcije, gdje RSSTDA i RSSTDA(d) pokazuju sličnu raspodjelu za energijske odsječke $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 150$ MeV. To upućuje na činjenicu da izovektorski kvadrupolni prijelaz pokazuje manju osjetljivost na korelacije između 2p–2h konfiguracija u usporedbi s izoskalarnim slučajem. Uočena je nešto slabija energijska ovisnost RSSTDA i RSSTDA(d) rezultata u odnosu na 2p–2h odsječke s tendencijom konvergencije za $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 150$ MeV, što dodatno potvrđuje stabilnost spektra za IVGQR pobuđenje.



Slika 5.7: Isto kao na slici 5.1, ali za IVGQR raspodjelu snage.

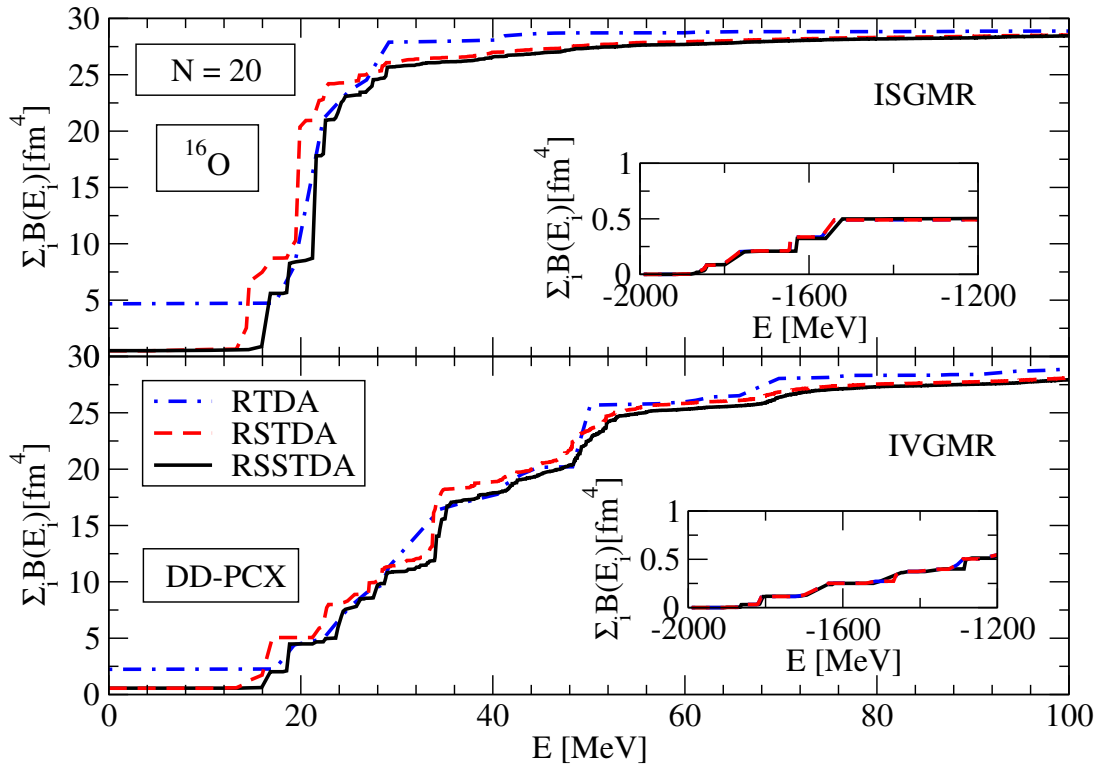


Slika 5.8: Isto kao na slici 5.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGQR.

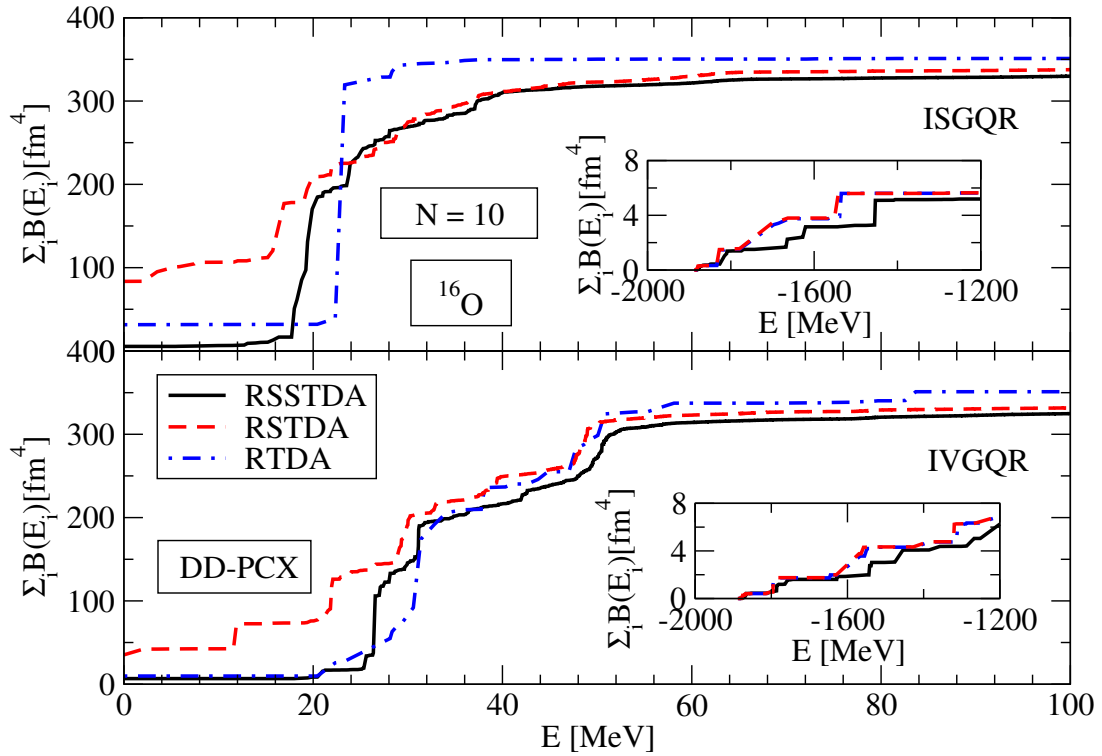
5.7 Kumulativna snaga GMR i GQR prijelaza

U ovom potpoglavlju analizira se kumulativna prijelazna snaga definirana kao $\sum_i B(E_i)$ za monopolna (GMR) i kvadrupolna (GQR) pobuđenja u jezgri ^{16}O . Na slici 5.9 prikazana je kumulativna snaga za ISGMR i IVGMR za tri teorijska pristupa: TDA, STDA i SSTDA. Izračuni su provedeni za energijski odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV.

Za izoskalarnu komponentu (ISGMR), RSTDA rezultati pokazuju relativno brzo zasićenje kumulativne snage u energijskom području pobuđenja $10 \lesssim E \lesssim 40$ MeV. Nasuprot tome, RSSTDA rezultat se razvija sporije, s izraženijom redistribucijom snage prema nešto višim energijama. To je u skladu s prethodno prikazanim višim vrijednostima omjera m_3/m_1 i širinama Δ u RSSTDA modelu, koji ukazuju na fragmentaciju spektra i prisutnost visokoležećih pobuđenja. Za $E \gtrsim 40$ MeV, RSTDA i RSSTDA se približavaju, ali obje krivulje ostaju ispod RTDA za $E \lesssim 100$ MeV. U slučaju IVGMR, sve tri metode pokazuju veći stupanj fragmentacije, a zasićenje kumulativne snage odvija se sporije. RSTDA daje brži rast u području niskih i srednjih energija, dok slično vrijedi za RTDA na višim energijama ($E \gtrsim 50$ MeV). Iako se vrijednosti kumulativne snage prijelaza za RSTDA i RSSTDA međusobno približavaju na višim energijama ($50 \text{ MeV} \lesssim E \lesssim 100 \text{ MeV}$), one ne premašuju vrijednosti dobivene pomoću RTDA. Ovakvo ponašanje reflektira različitu dinamiku korelacija prisutnu u izovektorskom kanalu.



Slika 5.9: Kumulativna prijelazna snaga za ISGMR i IVGMR u jezgri ^{16}O za RTDA, RSTDA i RSSTDA kao funkcije energije pobuđenja E , pri čemu su uključene neperturbirane 2p–2h konfiguracije do $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV.



Slika 5.10: Isto kao i za 5.9, ali za ISGQR i IVGQR u jezgri ^{16}O , pri čemu su uključene neperturbirane 2p–2h konfiguracije do $E_{\text{cutoff}} = 210$ MeV.

Na slici 5.10 prikazana je kumulativna prijelazna snaga za ISGQR i IVGQR pobuđenja, također za RTDA, RSTDA i RSSTDA. Izračuni su provedeni u bazi s glavnim kvantnim brojem $N = 10$. Za ISGQR prijelaze, iako RSTDA pokazuje najbrže zasićenje za $E \lesssim 20$ MeV, u području energija $20 \lesssim E \lesssim 30$ MeV njenu ulogu preuzima RTDA, dostižući više od 95% ukupne snage. RSTDA i RSSTDA iznad 20 MeV akumuliraju snagu postupnije, osobito potonja aproksimacija, zbog izraženije fragmentacije spektra i redistribucije prijelazne snage u više energijsko područje. Sličan trend uočen je i kod IVGQR, gdje RSSTDA znatno sporije akumulira snagu u niskom i srednjem dijelu spektra ($E \lesssim 45$ MeV), a konačno konvergira prema RSTDA vrijednostima na višim energijama.

Poseban naglasak treba staviti na dodatne prikaze unutar slika 5.9 i 5.10, koji prikazuju kumulativnu prijelaznu snagu u području visokih negativnih energija (između -2000 i -1200 MeV). Ovi doprinosi potječu od konfiguracija Diracovog mora, odnosno parova antičestica–šupljina (α – h), koji su nužni za osiguravanje Lorentzove kovarijantnosti i termodinamičke konzistentnosti unutar relativističkog RPA formalizma. Analizom kumulativne prijelazne snage u jezgri ^{16}O (slika 5.9), vidljivo je da doprinos stanja iz Diracovog mora iznosi približno 0.5 fm^4 za ISGMR i IVGMR, uz neznatnu razliku između pristupa (RTDA; RSTDA i RSSTDA), što predstavlja oko 1.7 % ukupne kumulativne snage. Sličan doprinos α – h parova kumulativnoj snazi uočen je u slučaju ISGQR i IVGQR (slika 5.10), uz manju razliku između navedenih teorijskih pristupa nego u slučaju monopolnih prijelaza.

U oba slučaja uključivanje 2p–2h korelacija u kombinaciji s primjenom procedure suptrakcije vodi prema realističnijoj redistribuciji snage, posebice u području kvadrupolnih rezonancija, pri čemu se RSSTDA model ističe boljom stabilnošću.

5.8 Mikroskopska razlika između RTDA, RSTDA i RSSTDA

Za dublje razumijevanje efekata koje uvode 2p–2h konfiguracije i metoda suptrakcije, potrebno je provesti analizu mikroskopske strukture pobuđenih stanja dobivenih različitim teorijskim pristupima. Prvo je razmotrena RTDA aproksimacija, u kojoj sudjeluju isključivo 1p–1h konfiguracije, nakon čega je provedena usporedba s RSTDA i RSSTDA rezultatima za odgovarajuća stanja. Ovdje je u svim slučajevima korištena DD-PCX parametrizacija, dok se analiza u slučaju DD-PC1 parametrizacije nalazi u [146].

U slučaju RTDA za izoskalarni 0^+ prijelaz, samo 1p–1h konfiguracije doprinose prijelaznoj snazi. Kao primjer, u tablici 5.5 prikazan je spektar konfiguracija koje doprinose stanju pri $E = 17.30$ MeV. Uočava se da je prijelazna snaga gotovo u cijelosti koncentrirana u jednoj dominantnoj konfiguraciji $(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$, koja nosi gotovo 98% norme. Preostale čestično-šupljinske (p–h) konfiguracije daju znatno manji doprinos, pri čemu samo jedna prelazi 1%, dok većina ostalih doprinosi s manje od 0.001.

Tablica 5.5: Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) parova i njihovi udjeli u normi u slučaju RTDA za 0^+ stanje na $E = 17.30$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.97993
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.01576
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00179
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00119
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00072
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.00013
$(4p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00010
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1
U rasponu [0.01 – 0.1]	1
U rasponu [0.001 – 0.01]	2
U rasponu [≤ 0.001]	104

U slučaju RSTDA izračuna za ISGMR, stanja ispod 30 MeV koja doprinose s prijelaznom snagom $R \gtrsim 1.0 \text{ fm}^4$ karakterizira snažno miješanje 1p–1h i 2p–2h konfiguracija, u rasponu otprilike od oko 20% do 70% u korist 2p–2h konfiguracija. Ovo ne uključuje nekoliko stanja koja su općenito obilježena slabijom prijelaznom snagom $R \lesssim 1.0 \text{ fm}^4$, i koja su gotovo u cijelosti 2p–2h prirode, s udjelima 2p–2h konfiguracija većim od 99%. Za razliku od DD-PC1 međudjelovanja (za detalje vidjeti [146]), u slučaju RSTDA s DD-PCX parametrizacijom

Tablica 5.6: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA za 0^+ stanje na $E = 14.64$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.31294
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.06514
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.01788
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.01017
$(4p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00360
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00228
$(4p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00227
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00138
Broj p–h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.31294)
U rasponu [0.01 – 0.1]	3 (0.09319)
U rasponu [0.001 – 0.01]	4 (0.00952)
U rasponu [≤ 0.001]	100 (0.00506)
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.10845
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.08931
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.08895
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.07314
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.03120
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\nu^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.02689
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.02384
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.02174
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.01373
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.10845)
U rasponu [0.01 – 0.1]	8 (0.36880)
U rasponu [0.001 – 0.01]	22 (0.04693)
U rasponu [≤ 0.001]	7359 (0.05511)

prethodno je stanje fragmentirano u dva stanja, koja se mogu smatrati pandanom prethodno promatranog RTDA stanja pri 17.30 MeV. Jedno od spomenutih stanja nalazi se pri 14.32 MeV, a drugo na 14.64 MeV. Struktura posljednjeg stanja prikazana je u tablici 5.6. Konfiguracija $(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$ jasno dominira p–h dijelom s doprinosom normi od 0.31294, slijedi je $(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$ s vrijednošću 0.06514, iza čega slijede konfiguracije $(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$ i $(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$ s nekoliko puta manjim doprinosima. U slučaju 2p–2h konfiguracija, ne postoji jedna dominantna, već je nešto više od trećine ukupne norme raspodijeljeno na 4 konfiguracije, odnosno $[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$, $[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$, $[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$ i $[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$. Još 5 konfiguracija s pojedinačnim doprinosom između 1% i 10% ima udio u normi od oko 11%. Pored spomenutog, 22 konfiguracije s udjelima u rasponu od [0.001–0.01] doprinose s oko $\approx 4.7\%$ ukupnoj normi, dok sličan udio u normi dolazi od više od 7300 2p–2h konfiguracija čiji pojedinačni doprinosi iznose manje od 0.001. Iako nijedna dominantna 2p–2h konfiguracija ne prevladava, kumulativni

Tablica 5.7: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA za 0^+ stanje na $E = 16.83$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.85402
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.02856
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00226
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00218
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00195
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00102
Broj p–h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 - 0.9999]	1 (0.85402)
U rasponu [0.01 - 0.1]	1 (0.02856)
U rasponu [0.001 - 0.01]	4 (0.00741)
U rasponu [≤ 0.001]	102 (0.00166)
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.02689
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\nu^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\nu^0]^0$	0.01846
$[(2p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00233
$[(2s_{1/2}, 2p_{1/2})_\pi^0 (1s_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00222
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00185
$[(3p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00165
$[(2p_{1/2}, 3p_{3/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.00138
$[(1d_{3/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00125
$[(2p_{1/2}, 4p_{3/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.00120
$[(2p_{1/2}, 3p_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00105
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.1 - 0.9999]	0 (0.00000)
U rasponu [0.01 - 0.1]	2 (0.04536)
U rasponu [0.001 - 0.01]	11 (0.01603)
U rasponu [≤ 0.001]	7377 (0.04696)

doprinos mnogih povezanih komponenata daje značajan ukupni efekt. Drugim riječima, nezamerniv doprinos većeg broja 2p–2h komponenata doprinosi fragmentaciji i širenju prijelazne snage prema nižim energijama pobuđenja u RSTDA aproksimaciji.

Preostaje razjasniti ulogu metode suptrakcije u oblikovanju mikroskopske strukture vlastitih stanja u analiziranom energijskom području. u usporedbi s RSTDA, RSSTDA sustavno pomiče energije pobuđenja prema višim vrijednostima i mijenja unutarnje miješanje konfiguracija. Takvo ponašanje je u skladu s teorijskom osnovom metode suptrakcije, koja eliminira statičke komponente korelacija osnovnog stanja. Kao rezultat, RSSTDA potiskuje umjetno pojačanje 2p–2h primjesa u niskoenergijskim miješanim konfiguracijama i favorizira fizikalno realističnije strukture koje su pretežno 1p–1h prirode. U stanjima u kojima 2p–2h komponente ostaju izražene, metoda ih ne uklanja u potpunosti, već ih redistribuira, koncentrirajući prijelaznu snagu u manji broj kolektivnijih konfiguracija i smanjujući fragmentaciju. Struktura stanja koja su dominantno 2p–2h s $\mathcal{N}_2 \gtrsim 0.99$ ostaje uvelike nepromijenjena. Posljedično, metoda stabilizira spektar niskih i djelomično srednjih energija te ublažava širenje prijelazne snage

prema nižim energijama pobuđenja, što je vidljivo iz usporedbe pandan-stanja u RSTDA i RSSTDA.

Tablica 5.8: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA za 0^+ stanje na $E = 21.91$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.50064
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.02341
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.02280
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.01597
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.01109
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.50064)
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.07327)
U rasponu [0.001 – 0.01]	11 (0.03952)
U rasponu [≤ 0.001]	92 (0.00501)
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^1]^0$	0.09202
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^1]^0$	0.06836
$[(1d_{3/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^1]^0$	0.01251
$[(1d_{3/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^1]^0$	0.01092
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_{\pi}^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_{\pi}^0]^0$	0.00717
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.00671
$[(1d_{3/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.00660
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.00579
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_{\pi}^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_{\pi}^0]^0$	0.00523
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_{\nu}^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^1]^0$	0.00514
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.18382)
U rasponu [0.001 – 0.01]	40 (0.12868)
U rasponu [≤ 0.001]	7346 (0.06906)

Stanje koje predstavlja pandan onome u RSTDA pri 14.64 MeV (tablica 5.6) pojavljuje se pri 16.83 MeV u RSSTDA aproksimaciji i prikazano je u tablici 5.7. Dominantna p–h konfiguracija, $(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$, povećava svoj doprinos s 0.31294 u RSTDA na 0.85402 u RSSTDA, što ukazuje na znatno smanjenje miješanja konfiguracija. Istodobno, doprinos 2p–2h konfiguracija je znatno potisnut. Vodeća 2p–2h amplituda u RSSTDA doseže samo 0.02689, dok je u RSTDA iznosila 0.10845 uz dodatnih 8 konfiguracija iznad 0.01. Ukupna norma 2p–2h dijela u RSSTDA iznosi $N_2 \approx 0.11$, što ukazuje na redistribuciju i djelomično potiskivanje korelacijskih efekata izvan p–h prostora. Ova transformacija odražava se u sustavnom pomaku energija pobuđenja i do nekoliko MeV prema višim vrijednostima u odnosu na RSTDA. Uzimajući u obzir još nekoliko stanja sličnog karaktera u spektru, takvo ponašanje vodi ka općem potiskivanju efekata niskoenergijske fragmentacije u RSSTDA.

Takve promjene javljaju se i pri višim energijama pobuđenja $E \gtrsim 20$ MeV, no njihov je učinak znatno manji, rezultirajući promjenama u miješanju između 1p–1h i 2p–2h konfiguracija od nekoliko do približno 10%. U RSTDA slučaju, primjer takvog stanja nalazi se na 21.91 MeV.

Struktura konfiguracija spomenutog stanja prikazana je u tablici 5.8. Konfiguracija $(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$ doprinosi s 0.50064 normi stanja, dok četvero dodatnih 1p–1h konfiguracija u rasponu [0.01–0.1] ukupno daje 0.07327. Preostale 1p–1h konfiguracije doprinose s oko 4.5%, čineći 1p–1h dio norme $\mathcal{N}_1 \approx 0.61844$. Prve dvije dominantne 2p–2h konfiguracije u RSTDA, odnosno $[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$ $[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_\nu^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^1]^0$, redom doprinose normi 0.09202 i 0.06836, uz još dvije koje prelaze 0.01 i velik broj manjih komponenti koje dodatno doprinose ukupno s 0.19774.

Tablica 5.9: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA za 0^+ stanje na $E = 21.61$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.28534
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.13068
$(3p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.03524
$(2s_{1/2})^\nu (1s_{1/2})^\nu$	0.03522
$(2s_{1/2})^\pi (1s_{1/2})^\pi$	0.03515
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.03513
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	2 (0.41602)
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.14074)
U rasponu [0.001 – 0.01]	11 (0.04517)
U rasponu [≤ 0.001]	91 (0.00465)
$[(1d_{3/2}, 1d_{5/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.05840
$[(1d_{3/2}, 1d_{5/2})_\nu^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^1]^0$	0.04417
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.03611
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_\nu^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^1]^0$	0.02937
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00919
$[(2s_{1/2}, 2d_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00889
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00853
$[(1d_{3/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00834
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\nu^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^1]^0$	0.00766
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\nu^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\nu^0]^0$	0.00640
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.16806)
U rasponu [0.001 – 0.01]	46 (0.15777)
U rasponu [≤ 0.001]	7340 (0.06760)

U slučaju RSSTDA, pandan prethodnog stanja prikazan je u tablici 5.9 i nalazi se na 21.61 MeV. Iste konfiguracije $(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$ i $(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$ sada doprinose s 0.28534 i 0.13068 normi, odnosno ukupno 0.41602. Doprinos normi prve konfiguracije gotovo je dvostruko manji od RSTDA vrijednosti, dok je, s druge strane, doprinos druge konfiguracije $((2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu)$ nekoliko puta veći u slučaju RSSTDA. No, odnos $\mathcal{N}_1$ i $\mathcal{N}_2$ ostaje gotovo nepromijenjiv, pri čemu je 1p–1h dio norme, odnosno $\mathcal{N}_1$ svega je za oko 1% manji u odnosu na RSTDA ($\mathcal{N}_1 = 0.60658$). Redistribucija vodi ka sličnom doprinosu najkolektivnijih 2p–2h komponenata u odnosu na pandan-stanje u RSTDA, dok je broj konfiguracija s doprinosom u rasponu [0.001 – 0.01] tek

za 6 veći od RSTDA slučaja.

Ovi rezultati ukazuju na to da metoda suptrakcije implementirana u RSSTDA pri višim energijama ne smanjuje drastično ukupni sadržaj 2p–2h komponenti, već mijenja njihovu raspodjelu. Snaga se koncentrira u manji broj kolektivnijih 2p–2h konfiguracija, dok se fragmentacija smanjuje u usporedbi s RSTDA. Ovakav obrazac podupire tumačenje da metoda suptrakcije prvenstveno utječe na strukturu i miješanje korelacija, a ne na njihovo potpuno uklanjanje. Slična opažanja su uočena u slučaju DD-PC1 parametrizacije u [146].

5.9 Mikroskopska razlika između pune forme i dijagonalne aproksimacije u RSTDA i RSSTDA

Preostaje istražiti učinak uključivanja međudjelovanja između 2p–2h konfiguracija. Pandanska stanja prvog i drugog primjera iz potpoglavlja 5.8 u dijagonalnoj aproksimaciji, odnosno u RSTDA(d), nalaze se pri 15.09 i 23.01 MeV. Doprinosi 1p–1h i 2p–2h konfiguracija za prvo (energijski niže) stanje prikazani su u tablici 5.10. To je stanje snažno dominirano protonskim čestično-šupljinskim (p–h) prijelazom $(2p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$, koji doprinosi s 82.6% ukupne norme. Druga najznačajnija konfiguracija, $(2p_{1/2})^\nu(1p_{1/2})^\nu$, iznosi 5.17%, a nekoliko dodatnih protonskih i neutronskih konfiguracija u rasponu od 0.001 do 0.01 podižu ukupnu 1p–1h normu na približno 93.72%. Doprinos 2p–2h konfiguracija normi ograničen je na oko 5.67%, pri čemu nijedna pojedinačna komponenta ne prelazi 0.006. U usporedbi s odgovarajućim RSTDA stanjem pri 14.64 MeV (vidi tablicu 5.6), gdje je 2p–2h dio iznosio oko $N_2 \approx 57.9\%$, RSTDA(d) drastično smanjuje miješanje konfiguracija ($N_2 \approx 5.67\%$) i istodobno pomiče energiju pobuđenja ka višim vrijednostima za otprilike 450 keV. Redistribucija snage u RSTDA(d) na taj način rezultira kompaktnijim stanjem s čišćom 1p–1h strukturom. Očito međudjelovanje između 2p–2h konfiguracija ima značajnu ulogu u miješanju konfiguracija, i za realističan opis pobuđenja je dijagonalna aproksimacija dosta ograničena.

Drugo stanje, koje se u RSTDA(d) nalazi pri 23.01 MeV, odgovara RSTDA stanju pri 19.88 MeV. Karakteriziraju ga dominantne p–h konfiguracije $(2p_{3/2})^\pi(1p_{3/2})^\pi$ i $(2p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$ koje zajedno doprinose s 49.64% norme (vidi tablicu 5.11). Uz pet dodatnih 1p–1h komponenti u rasponu [0.01–0.1], ukupni sadržaj 1p–1h prelazi 62%, što upućuje da je čak i u dijagonalnoj aproksimaciji prisutno snažno miješanje između 1p–1h i 2p–2h konfiguracija. Drugim riječima, 2p–2h dio je nešto manje izmiješan nego u RSTDA. Najveća 2p–2h konfiguracija doseže 25.9%, a ukupna norma 2p–2h dijela iznosi približno 33.3%, u usporedbi s gotovo 39.3% u RSTDA. Ovo ilustrira dosljedno ponašanje u RSTDA(d), smanjeno miješanje 2p–2h konfiguracija i koncentriranija snaga u p–h sektoru, uz blagi pomak energija pobuđenja prema višim vrijednostima.

S druge strane, pandan prvog stanja nalazi se pri 16.91 MeV u RSSTDA(d) i pokazuje strukturna svojstva slična onima iz RSSTDA izračuna, s oko 92.9 % norme koja proizlazi iz

Tablica 5.10: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 15.09$ MeV.

Konfiguracije	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.82600
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.05171
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.03706
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00835
$(4p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00722
$(2s_{1/2})^\pi (1s_{1/2})^\pi$	0.00227
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.82600)
U rasponu [0.01 – 0.1]	2 (0.08877)
U rasponu [0.001 – 0.01]	6 (0.02243)
U rasponu [≤ 0.001]	99 (0.00608)
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00531
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00375
$[(2p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00226
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00188
$[(2s_{1/2}, 2p_{1/2})_\pi^0 (1s_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00160
$[(3p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00157
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00102
$[(4p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00100
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.001 – 0.01]	7 (0.01739)
U rasponu [≤ 0.001]	7383 (0.03933)

konfiguracije $(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$. Neutronska konfiguracija $(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$ doprinosi s dodatnih 2%, dok se preostale 1p–1h komponente nalaze ispod granice od 0.01. Ukupni doprinos norme $\mathcal{N}_2$ iznosi približno 4.24%, što ukazuje na ograničeno miješanje konfiguracija i potvrđuje dominantnu p–h prirodu stanja. Eksplicitni doprinosi 1p–1h i 2p–2h konfiguracija navedeni su u tablici 5.12.

Pandan drugog stanja pojavljuje se pri 21.84 MeV u RSSTDA(d) i pokazuje sličan trend. Prijelazi $(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$ i $(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$ dominiraju 1p–1h sektorom, doprinoseći redom s 52.78% i 18.95% norme. Uključivanjem preostalih 1p–1h komponenata, ukupna snaga 1p–1h dijela doseže 94.16%, što ukazuje na dominantno jednočestičnu strukturu. 2p–2h konfiguracije pridonose svega oko 5.84% ukupne norme, a nijedna pojedinačna konfiguracija ne prelazi vrijednost od 0.02. Ovo smanjeno miješanje potvrđuje očekivano ponašanje RSSTDA(d), gdje izostanak međudjelovanja između 2p–2h konfiguracija vodi ka potiskivanju $\mathcal{N}_2$. Eksplicitni doprinosi za to stanje dani su u tablici 5.13.

Tablica 5.11: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 23.01$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi(1p_{3/2})^\pi$	0.36096
$(2p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.13544
$(3p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$	0.03830
$(3p_{3/2})^\pi(1p_{3/2})^\pi$	0.03769
$(2s_{1/2})^\nu(1s_{1/2})^\nu$	0.02192
$(3p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.01525
$(2p_{1/2})^\nu(1p_{1/2})^\nu$	0.01150
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	2 (0.49640)
U rasponu [0.01 – 0.1]	5 (0.12466)
U rasponu [0.001 – 0.01]	10 (0.04052)
U rasponu [< 0.001]	91 (0.00557)
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0(1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.25881
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\nu^0(1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\nu^0]^0$	0.03043
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.00867
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\nu^1(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^1]^0$	0.00222
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.00184
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.25881)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.03043)
U rasponu [0.001 – 0.01]	3 (0.01273)
U rasponu [< 0.001]	7385 (0.03088)

Tablica 5.12: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 16.91$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$	0.92901
$(2p_{1/2})^\nu(1p_{1/2})^\nu$	0.02022
$(3p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$	0.00254
$(3p_{1/2})^\nu(1p_{1/2})^\nu$	0.00187
$(2p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.00184
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.92901)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.02022)
U rasponu [0.001 – 0.01]	3 (0.00624)
U rasponu [≤ 0.001]	103 (0.00215)
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0(1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00954
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0(1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00241
$[(2p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2(1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00165
$[(2s_{1/2}, 2p_{1/2})_\pi^0(1s_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00129
$[(3p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2(1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00112
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.001 – 0.01]	5 (0.01602)
U rasponu [≤ 0.001]	7385 (0.02636)

Tablica 5.13: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično-dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 21.84$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi(1p_{3/2})^\pi$	0.52784
$(2p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.18946
$(3p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.04778
$(3p_{3/2})^\pi(1p_{3/2})^\pi$	0.04050
$(2s_{1/2})^\pi(1s_{1/2})^\pi$	0.03588
$(2s_{1/2})^\nu(1s_{1/2})^\nu$	0.03554
$(4p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.01032
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	2 (0.71730)
U rasponu [0.01 – 0.1]	5 (0.17002)
U rasponu [0.001 – 0.01]	13 (0.05080)
U rasponu [≤ 0.001]	88 (0.00347)
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0(1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.01194
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00401
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.00190
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^0]^0$	0.00172
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\nu^0(1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\nu^0]^0$	0.00147
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.00132
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\nu^1(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^1]^0$	0.00120
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\nu^0(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^0]^0$	0.00118
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00117
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.1 – 0.9999]	0 (0.00000)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.01194)
U rasponu [0.001 – 0.01]	8 (0.01397)
U rasponu [≤ 0.001]	7381 (0.03251)

5.10 Mikroskopski opis niskoležećih stanja

U ovom potpoglavlju opisan je doprinos konfiguracija u slučaju najnižeg RSTDA stanja za ISGMR koje se nalazi na 4.41 MeV. Dominantne dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije za navedeni prijelaz prikazane su u tablici 5.14. Uočava se izrazito kolektivna i višekonfiguracijska struktura pobuđenog stanja, pri čemu svega četiri konfiguracije iznad praga od 0.1 doprinose više od 70% ukupne norme. Najveći doprinosi normi potječu od konfiguracija u kojima sudjeluju protonske i neutronske orbitale ($2s_{1/2}, 1d_{5/2}$) u kombinaciji s orbitalama ispod Fermijevog nivoa, odnosno ($1p_{1/2}, 1p_{3/2}$) i ($1p_{3/2}, 1p_{3/2}$), što ukazuje na snažnu vezu između sd -ljuske i pobuđenja u p -ljusci. Dodatni doprinosi nalaze se u konfiguracijama koje uključuju orbitale $1d_{3/2}$, a iako su numerički manji, još uvijek predstavljaju značajan dio ukupne strukture stanja. Preostale konfiguracije, s vrijednostima reda veličine 10^{-3} , doprinose ukupno nekoliko posto norme, ali odražavaju široku raspodjelu 2p–2h komponenti u prostoru konfiguracija. Suma svih doprinosa jasno pokazuje da je stanje gotovo u potpunosti 2p–2h karaktera, s više od 99% norme smještene u 2p–2h konfiguracijama.

Tablica 5.14: Dominantne 2p–2h konfiguracije i pojedinačni doprinosi normi RSTDA stanja na $E = 4.41$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.21877
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.19812
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.15633
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.14058
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.05170
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.04959
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.03801
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.03598
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.1 – 0.9999]	4 (0.71379)
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.17528)
U rasponu [0.001 – 0.01]	28 (0.06639)
U rasponu [≤ 0.001]	7354 (0.03576)

Tablica 5.15 prikazuje dominantne dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije za pandan-stanje u RSSTDA na energiji 4.49 MeV. Ovo stanje jasno pokazuje da one nose gotovo cjelokupnu normu valne funkcije pobuđenog stanja ($N_2 \approx 99.64\%$). Najveći doprinosi, svaki veći od 0.14, potječu iz dvočestičnih konfiguracija oblika ($2s_{1/2}, 1d_{5/2}$) s protonske i neutronske strane, dok sa šupljinske strane imamo ($1p_{1/2}, 1p_{3/2}$) i ($1p_{3/2}, 1p_{3/2}$). Nešto manji, ali još uvijek značajni doprinosi proizlaze iz konfiguracija koje uključuju orbitalu $1d_{3/2}$, s vrijednostima između približno 0.03 i 0.05. Analiza raspona doprinosa pokazuje da konfiguracije s vrijednostima većim od 0.1 nose nešto više od 70% ukupnog doprinosa. S druge strane, uključivanjem preostalih konfiguracija s udjelom manjim od 0.1 postiže se više od 99.6% ukupne

norme. Ovakva raspodjela jasno potvrđuje izrazito 2p–2h karakter razmatranog niskoležećeg pobuđenog stanja, uz zanemariv doprinos 1p–1h komponenti te naglašenu konfiguracijsku složenost sustava.

Tablica 5.15: Dominantne 2p–2h konfiguracije i pojedinačni doprinosi normi RSSTDA stanja na $E = 4.49$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.21799
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.19688
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.15761
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.14167
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.05351
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.05136
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.03875
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.03660
Broj 2p–2h konfiguracija:	7390
U rasponu [0.1 – 0.9999]	4 (0.71416)
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.18022)
U rasponu [0.001 – 0.01]	29 (0.06754)
U rasponu [≤ 0.001]	7353 (0.03449)

Usporedba 2p–2h dominantnih konfiguracija u RSTDA i RSSTDA aproksimaciji (vidjeti tablice 5.14 i 5.15), pokazuje da primjena postupka suptrakcije dovodi tek do marginalnih promjena u strukturi pobuđenog stanja. Sve vodeće konfiguracije zadržavaju isti kvalitativni karakter, pri čemu se njihovi relativni doprinosi normi neznatno mijenjaju, bez ikakvog pregrupiranja ili promjene hijerarhije dominantnih konfiguracija. Nadalje, pragovi doprinosa po pojedinim rasponima ostaju gotovo identični, osobito u području iznad 0.1 gdje i dalje četiri konfiguracije nose preko 70% ukupne norme. S obzirom na to da su obje aproksimacije izračunate uz 2p–2h cutoff od 150 MeV, činjenica da suptrakcija ne uvodi značajne pomake u normi ili distribuciji konfiguracija ukazuje na stabilnost kolektivne strukture stanja. Ovakav rezultat potvrđuje da je utjecaj suptrakcije na predominantno 2p–2h stanja kvantitativno malen te ne mijenja fizikalnu interpretaciju stanja.

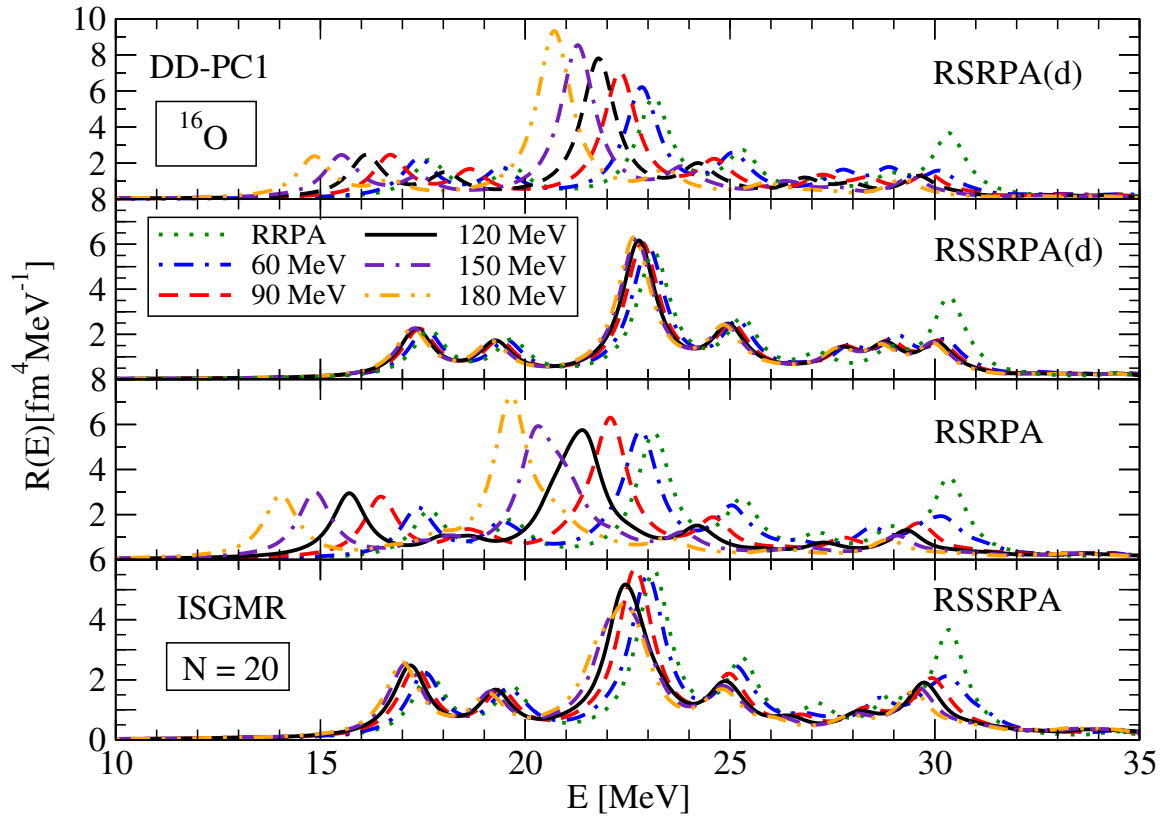
6 REZULTATI DRUGE APROKSIMACIJE SLUČAJNIH FAZA

U ovom su poglavlju prikazani i analizirani rezultati dobiveni primjenom relativističkog formalizma druge aproksimacije slučajnih faza (RSRPA), čime se teorijski okvir postavljen u prethodnim dijelovima rada primjenjuje na opis kolektivnih pobuđenja u atomskim jezgrama. Dok standardni RPA model opisuje gigantske rezonancije na razini čestično-šupljinskih ($1p-1h$) i antičestično-šupljinskih ($1\alpha-1h$) konfiguracija, uvrštavanje dvočestično-dvošupljinskih ($2p-2h$) parova unutar RSRPA pristupa omogućuje mikroskopski opis fragmentacije i prigušenja prijelazne snage. Analiza koja slijedi obuhvaća rezultate dobivene kroz nekoliko varijanti RSRPA izračuna, čime se sustavno ispituje utjecaj rezidualnog međudjelovanja i članova preraspodjele na dinamiku nuklearnih pobuđenja.

6.1 Raspodjela prijelazne snage za ISGMR

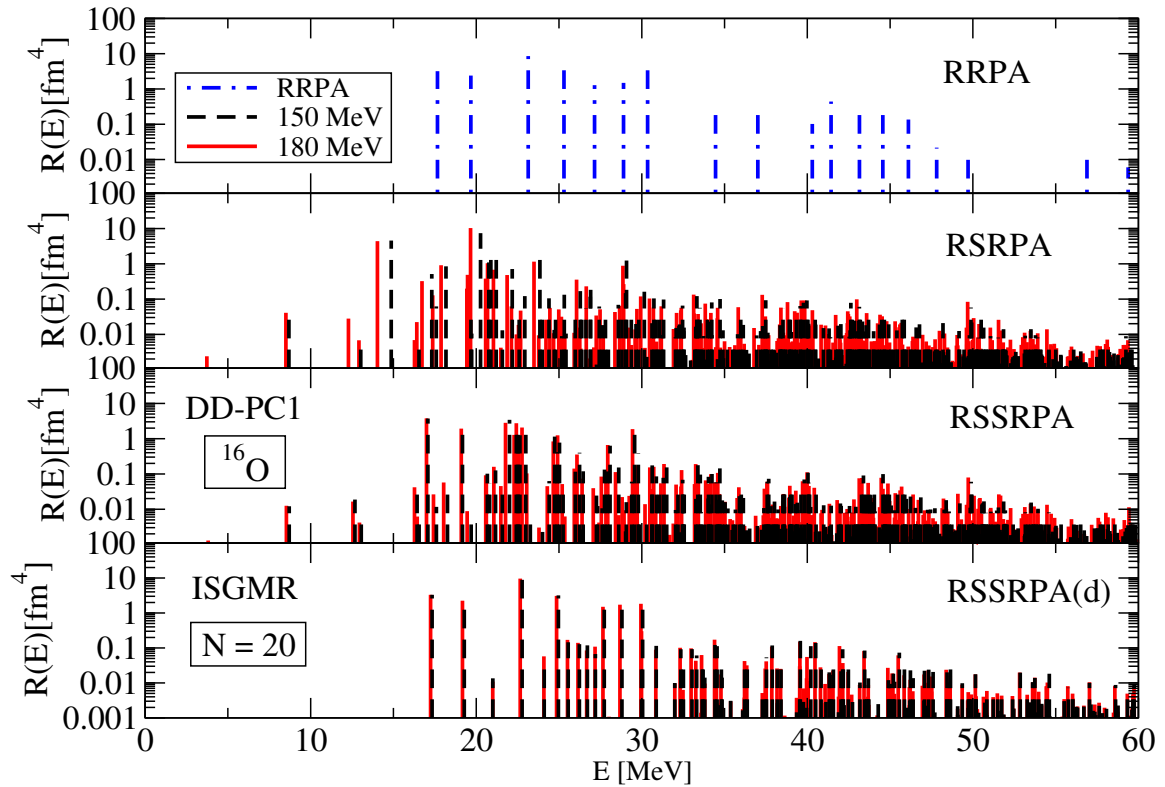
Analiza rezultata započinje prikazom raspodjele prijelazne snage za ISGMR prijelaz (0^+) u jezgri ^{16}O . Na slici 6.1 uspoređeno je nekoliko različitih varijanti RSRPA izračuna za DD-PC1 parametrizaciju, kako bi se sustavno ispitao utjecaj proširenja konfiguracijskog prostora na položaj i strukturu gigantske monopolne rezonancije. Konkretno, analiza uključuje standardnu RSRPA te verziju RSRPA s primjenom suptrakcije (RSSRPA), obje promatrane u dvije implementacije, odnosno jednoj koja zadržava potpunu A_{22} matricu s rezidualnim međudjelovanjem između $2p-2h$ konfiguracija, te drugu koja koristi dijagonalnu aproksimaciju u bloku A_{22} , odnosno razlike neperturbiranih $2p-2h$ nivoa bez uključivanja ikakvog međudjelovanja. Uz spomenute varijante RSRPA, radi usporedbe prikazani su i rezultati RRPA. U potpuno samosuglasnom tretmanu, članovi preraspodjele povezani s ovisnošću međudjelovanja o gustoći uključeni su u sve podmatrice, odnosno A_{11} , B_{11} , A_{12} , B_{12} i A_{22} (za detalje vidjeti poglavlja 4.5 i 4.6). Nasuprot tome, dijagonalna aproksimacija bez (RSRPA(d)) i s primjenom suptrakcije (RSSRPA(d)), izostavlja rezidualno međudjelovanje u potpunosti, uključujući i doprinose članova preraspodjele, iz sektora A_{22} u svim koracima postupka (uz spomenuta poglavlja, vidjeti također poglavlje 4.8). Slično kao i u slučaju druge Tamm-Dancoff aproksimacije, Dirac-Hartreejeva baza konstruirana je korištenjem valnih funkcija sfernog harmoničkog oscilatora s maksimalnom vrijednošću glavnog kvantnog broja $N = 20$. Za preostale detalje računa osnovnog stanja može se pogledati poglavlje 3.4. Kontinuirani spektralni prikaz pobuđenja dobiven je tako da su snage diskretnih prijelaza ugađene lorentzijanom širine 1 MeV.

Ovisnost rezultata o veličini $2p-2h$ konfiguracijskog prostora istražuje se promjenom gornje energijske granice (odsječka) neperturbiranih konfiguracija do vrijednosti 60, 90, 120, 150 i 180 MeV. Kao što je i očekivano, povećanje konfiguracijskog prostora dovodi do postupnog po-



Slika 6.1: Raspodjela snage ISGMR prijelaza za jezgru ^{16}O , dobivena korištenjem različitih varijanti RSRPA (vidjeti u tekstu). Zelena točkasta linija označava referentni RPA račun, dok preostale linije predstavljaju izračune za različite vrijednosti energijskog odsječka (engl. *cutoff*) neperturbiranih dvočestično-dvošupljinskih ($2p-2h$) konfiguracija: 60, 90, 120, 150 i 180 MeV.

maka vrhova prema nižim energijama. Takav trend izravna je posljedica uključivanja dodatnih stupnjeva slobode kroz dvočestično–dvošupljinske konfiguracije koje, uslijed rezidualnog međudjelovanja, dodatno polariziraju medij i efektivno snižavaju energiju kolektivnih pobuđenja. Ovakvo je ponašanje fizikalno dosljedno rezultatima prethodno dobivenim unutar relativističke druge Tamm-Dancoff aproksimacije (RSTDA), budući da oba formalizma opisuju slični mehanizam fragmentacije i pomaka snage kroz vezanje $1p-1h$ stanja sa složenijim $2p-2h$ konfiguracijama (vidjeti poglavlje 5). Kada se primijeni postupak suptrakcije, rezultirajući spektri, odnosno RSSRPA i njezini dijagonalni ekvivalent, RSSRPA(d), pokazuju numeričku stabilnost, sa svim istaknutim vrhovima prijelazne snage koji konvergiraju za vrijednosti energijskog odsječka $2p-2h$ konfiguracija između 150 i 180 MeV. Ova opažanja su u skladu s prethodnim nerelativističkim studijama [117, 119] gdje je pokazano da dijagonalna aproksimacija unosi samo mala odstupanja u odnosu na potpuni oblik kada se koristi u kombinaciji s metodom suptrakcije. Naši rezultati dodatno potvrđuju ovo ponašanje u relativističkoj domeni, iako se u potpuno samosuglasnoj RSSRPA uočavaju nešto izraženiji pomaci položaja vrhova u spektru, koji iznose do nekoliko stotina keV prema nižim energijama, u usporedbi s RSSRPA(d) za identične $2p-2h$ granične vrijednosti.



Slika 6.2: Diskretna raspodjela snage ISGMR za jezgu ^{16}O .

Slika 6.2 prikazuje diskretnu raspodjelu prijelazne snage ISGMR-a za jezgu ^{16}O , uspoređujući standardni RRPA rezultat s rezultatima za RSRPA, RSSRPA i RSSRPA(d). Usporedba RRPA izračuna s navedenim RSRPA varijantama jasno ilustrira drastično povećanje gustoće stanja uslijed vezanja 1p–1h konfiguracija sa znatno većim prostorom 2p–2h stanja, što dovodi do fragmentacije glavnog kolektivnog vrha u veći broj diskretnih prijelaza. Dok RSRPA spektar pokazuje znatan pomak snage prema nižim energijama, pristupi sa suptrakcijom (RSSRPA i RSSRPA(d)) pružaju stabilniju raspodjelu koja zadržava finu strukturu unutar šireg energijskog područja. Konvergencija rezultata dobivenih prilikom povećanja energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija sa 150 MeV na 180 MeV potvrđuje numeričku konvergenciju računa s obzirom na veličinu konfiguracijskog prostora. Ovakav diskretni uvid mikroskopski opravdava pojavu širine prigušenja (engl. *spreading width*) koja se u spektru manifestira kao širenje i fragmentacija rezonancije (vidjeti poglavlje 2.2.1).

Važno je istaknuti ulogu postupka suptrakcije unutar RSSRPA formalizma, koji se primjenjuje radi rješavanja problema infracrvene divergencije vlastitih energija te izbjegavanja dvostrukog prebrojavanja (engl. *double counting*) rezidualnog međudjelovanja. Budući da su mnoga fizikalna svojstva i korelacije već implicitno uključeni u fenomenološku parametrizaciju nuklearnog funkcionala gustoće (u ovom slučaju DD-PC1), suptrakcija osigurava da proširenje konfiguracijskog prostora na 2p–2h razinu ne naruši osnovna svojstva sustava definirana na srednjem polju. Ovakav pristup omogućuje da RSSRPA rezultati zadrže stabilnost pri ni-

skim energijama, dok istovremeno pružaju mikroskopski opis fragmentacije i širine gušenja rezonancije kroz vezanje sa složenijim konfiguracijama. Pored spomenutog, valja naglasiti da se definicija dijagonalne aproksimacije korištena u ovom radu razlikuje od one u radu [117]. U slučaju RSSRPA(d) metoda suptrakcije se primjenjuje dosljedno u svim fazama izračuna, uključujući inverziju matrice potrebnu za izračun (pod)matrica $\mathcal{A}_F^S$ i $\mathcal{B}_F^S$ (izraz (4.116), za detalje vidjeti poglavlje 4.8). Nasuprot tome, spomenuta referenca koristi punu matricu A_{22} osim tijekom koraka suptrakcije, gdje se inverzija izvodi samo s dijagonalnim dijelom. Ova razlika ima nezanemarivu ulogu u očuvanju inverznog pravila energijski ponderirane sume (m_{-1}), a samim time i na kompresibilnost jezgre kroz razmatranje energije ISGMR.

6.2 *Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacijskog pravila za ISGMR*

Ponašanje momenata m_0 , m_1 i m_2 (izraz (4.121)) analizira se usporedbom RRPA, RS-SRPA(d) i punog RSSRPA formalizma kroz cijeli pozitivni energijski spektar, kao i unutar eksperimentalnog prozora od 11 do 40 MeV [23]. Numeričke vrijednosti energijskih momenata za pozitivni dio spektra prikazane su u tablici 6.1, a one unutar navedenog eksperimentalnog prozora u tablici 6.2, dok se u nastavku teksta raspravlja o njihovom relativnom odnosu i fizičkim implikacijama postupka suptrakcije.

U usporedbi s RRPA rezultatom, RSSRPA(d) i RSSRPA pokazuju blago povećanje m_0 u cijelom spektru, pri čemu se vrijednost u RSSRPA povećava s 27.981 na 28.058 fm⁴, što je porast od približno 0.28%. Međutim, unutar eksperimentalnog prozora svi modeli bilježe smanjenje m_0 u odnosu na puni spektar, pri čemu RSSRPA model bilježi pad vrijednosti m_0 u odnosu na RRPA s 26.681 na 24.523 fm⁴ (relativni pad od oko 8%). Fizički utjecaj dvočestično-dvošupljinskih (2p–2h) konfiguracija još je izraženiji kod viših momenata raspodjele. Moment prvog reda, m_1 , unutar RSSRPA formalizma globalno raste za 11.6% u odnosu na RRPA (sa 720.883 na 804.750 MeVfm⁴), dok moment drugog reda, m_2 , doživljava značajan porast od 57.7% (s 19774.17 na 31197.57 MeV²fm⁴). U slučaju RSSRPA formalizma, ovakav globalni trend rasta momenata izravna je posljedica formiranja velikog broja visokoenergijskih stanja ($E \gtrsim 40$ MeV) koja doprinose ukupnoj raspodjeli prijelazne snage. Nasuprot tome, unutar eksperimentalnog prozora ovi momenti bilježe pad vrijednosti, pri čemu m_1 u RSSRPA opada za 12% (na 581.287 MeVfm⁴), dok m_2 bilježi smanjenje od 15.3% u odnosu na RRPA vrijednosti. U usporedbi s eksperimentalnim podacima, koji nisu izravno dostupni za sve momente, može se zaključiti da suptrahirane verzije formalizma značajno mijenjaju raspodjelu snage, posebno povećanjem viših momenata u cijelom spektru, dok u eksperimentalnom prozoru bilježe padove u odnosu na RRPA.

Moment m_{-1} ostaje gotovo nepromijenjen kroz sve modele u cijelom spektru, s vrijednostima oko 1.142–1.143 MeV⁻¹fm⁴, što ukazuje da uključivanje 2p–2h konfiguracija nema značajan

Tablica 6.1: Energijski momenti izoskalarnih monopolnih prijelaza (0^+) dobiveni pomoću RRPA, RSSRPA(d) i RSSRPA za ^{16}O primjenom DD-PC1 kontaktnog međudjelovanja. Za RSSRPA(d) i RSSRPA korišten je energijski odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RRPA	RSSRPA(d)	RSSRPA	Exp. [23]
m_0 [fm^4]	27.981	28.013	28.058	
m_1 [MeVfm^4]	720.883	787.540	804.750	
m_2 [MeV^2fm^4]	19774.17	30047.38	31197.57	
m_{-1} [$\text{MeV}^{-1}\text{fm}^4$]	1.142	1.143	1.143	
m_1/m_0 [MeV]	25.763	28.113	28.681	21.13 ± 0.49
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	25.121	26.251	26.531	19.63 ± 0.38
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	28.673	48.851	48.583	24.89 ± 0.59
Δ [MeV]	6.554	16.801	17.008	8.76 ± 1.82
EWSR[%]	99.85	109.09	111.47	48 ± 10

Tablica 6.2: Slično kao u tablici 6.1, ali unutar energijskog prozora pobuđenja od 11 do 40 MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RRPA	RSSRPA(d)	RSSRPA	Exp. [23]
m_0 [fm^4]	26.681	25.484	24.523	
m_1 [MeVfm^4]	661.157	611.175	581.287	
m_2 [MeV^2fm^4]	16917.79	15183.95	14397.64	
m_{-1} [$\text{MeV}^{-1}\text{fm}^4$]	1.113	1.100	1.079	
m_1/m_0 [MeV]	24.780	23.982	23.704	21.13 ± 0.49
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	24.370	23.571	23.215	19.63 ± 0.38
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	25.979	25.293	25.337	24.89 ± 0.59
Δ [MeV]	4.475	4.545	5.024	8.76 ± 1.82
EWSR[%]	91.58	84.66	80.52	48 ± 10

utjecaj na inverzni moment u globalnom energijskom rasponu. Međutim, unutar eksperimentalnog prozora primjećuje se blagi pad vrijednosti pri prelasku s RRPA ($1.113 \text{ MeV}^{-1}\text{fm}^4$) na RSSRPA ($1.079 \text{ MeV}^{-1}\text{fm}^4$), što predstavlja smanjenje od oko 3%. Prijelazom s RRPA na RSSRPA formalizam, efektivna energija $\sqrt{m_1/m_{-1}}$ unutar cijelog spektra raste s 25.121 MeV na 26.531 MeV, što odgovara porastu od 5.6%. Međutim, unutar eksperimentalno relevantnog prozora, efektivna energija opada s 24.370 MeV (RRPA) na 23.215 MeV (RSSRPA), što predstavlja smanjenje od približno 4.7%. Unatoč tom pomaku, teorijska vrijednost i dalje odstupa za oko 18% od eksperimentalno utvrđene vrijednosti koja iznosi $(19.63 \pm 0.38) \text{ MeV}$. Ova razlika ukazuje na složenu preraspodjelu prijelazne snage unutar RSSRPA formalizma. Dok na razini cijelog spektra efektivna energija globalno raste uslijed doprinosa visokoenergijskih repova, unutar samog eksperimentalnog prozora dominira efekt fragmentacije koji pomiče snagu prema nižim energijama, iako ne u dovoljnoj mjeri, što u konačnici dovodi do slabijeg slaganja s eksperimentom.

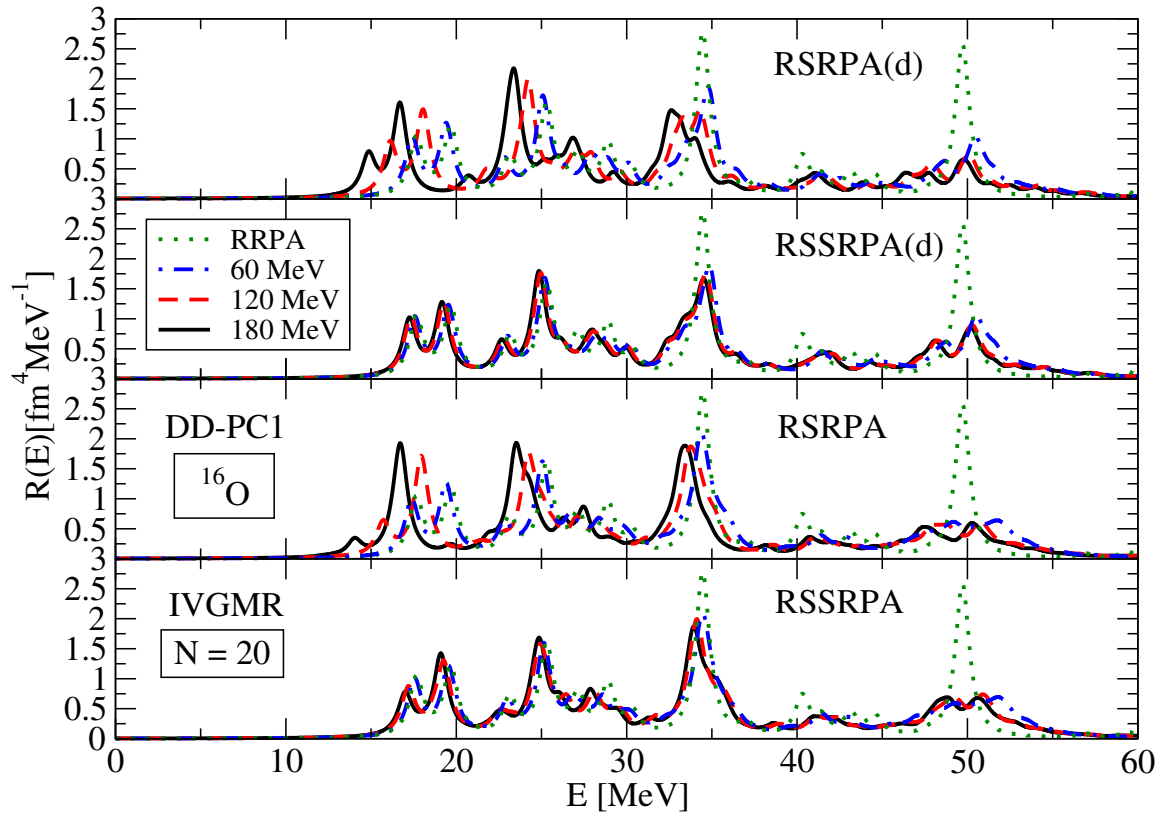
Centroid energije m_1/m_0 u cijelom spektru pokazuje značajan porast pri prelasku s RRPA (25.763 MeV) na RSSRPA (28.681 MeV), što je povećanje od oko 17.6%, dok RSSRPA(d) zauzima međuvrijednost (28.113 MeV). U eksperimentalnom prozoru, promjene su znatno manje, odnosno RSSRPA smanjuje centroid energije s 24.780 MeV (RRPA) na 23.704 MeV, što predstavlja relativno malu promjenu, ali obje vrijednosti ostaju iznad eksperimentalne referentne energije (21.13 ± 0.49) MeV. Količina $\sqrt{m_3/m_1}$, koja se povezuje s energijom u okviru trećeg momenta, u RSSRPA formalizmu ostaje gotovo jednaka RSSRPA(d) vrijednosti, ali je približno dvostruko veća od RRPA vrijednosti (28.673 MeV). U eksperimentalnom prozoru, sve tri metode daju slične rezultate (oko 25–26 MeV), što je i dalje iznad eksperimentalne vrijednosti (24.89 ± 0.59) MeV, ali s relativno malim odstupanjima. Ovi rezultati ukazuju da prošireni formalizam radikalno mijenja procjenu $\sqrt{m_3/m_1}$ u globalnom energijskom spektru, dok se razlike unutar eksperimentalnog prozora svode na manje postotke.

Efektivna širina distribucije prijelaza Δ u RRPA iznosi 6.554 MeV za cijeli spektar, dok se u RSSRPA(d) povećava na 16.801 MeV, a u RSSRPA dodatno blago raste na 17.008 MeV. To predstavlja gotovo trostruko povećanje širine kod RSSRPA u odnosu na RRPA, što ukazuje na znatno šire raspoređivanje snage po energijama kada se uključe 2p–2h konfiguracije. Unutar eksperimentalnog prozora, širine su znatno manje, odnosno 4.475 MeV (RRPA), 4.545 MeV (RSSRPA(d)) i 5.024 MeV (RSSRPA), pri čemu je povećanje u odnosu na RRPA relativno skromno (oko 12%). Usporedba s eksperimentalnom vrijednošću (8.76 ± 1.82) MeV pokazuje da sve teorijske procjene unutar prozora znatno podcjenjuju širinu, što može upućivati na nedovoljno opisivanje prigušenja ili raspršenja što predstavlja relativno malu promjenu snage u ovom energijskom području. Ovi rezultati potvrđuju da je učinak uključivanja viših konfiguracija izraženiji u globalnom spektru nego u ograničenom eksperimentalnom rasponu, što je i očekivano s obzirom na širenje spektra prema višim energijama pobuđenja zbog vezanja s 2p–2h konfiguracijama.

Postotak iscrpljenja sumacijskog pravila energije (EWSR) u RRPA za cijeli spektar iznosi 99.85%, dok u RSSRPA(d) raste na 109.09% i u RSSRPA na 111.47%. To povećanje ukazuje da prošireni formalizam ne samo da redistribuira snagu već i povećava ukupnu integriranu energijski ponderiranu snagu, što može biti posljedica uključivanja dodatnih kanala pobuđenja. Unutar eksperimentalnog prozora, svi modeli daju znatno niže postotke, 91.58% (RRPA), 84.66% (RSSRPA(d)) i 80.52% (RSSRPA), što pokazuje da se veći dio snage predviđen u proširenim formalizmima nalazi izvan izmjerenog raspona energija. Usporedba s eksperimentalnom vrijednošću od $(48 \pm 10)\%$ otkriva da velik dio prijelazne snage nedostaje u mjerenjima unutar danog energijskog prozora, s odstupanjem većim od 60% kod RSSRPA. Ovi rezultati sugeriraju da prošireni relativistički formalizmi predviđaju dodatnu snagu pri energijama iznad 40 MeV, što bi moglo zahtijevati dodatnu eksperimentalnu provjeru, posebice proširenje energijskog prozora u kojem se provode mjerenja prijelazne snage.

6.3 Raspodjela prijelazne snage za IVGMR

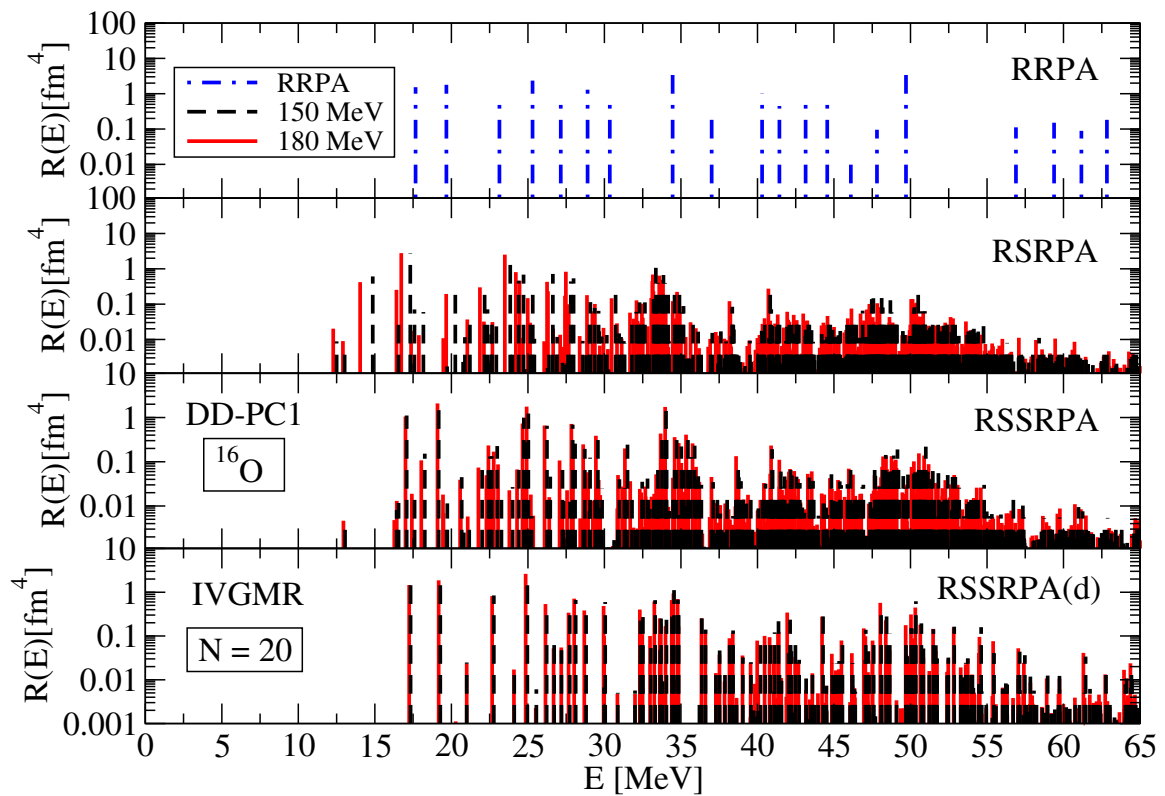
Na slici 6.3 prikazana je raspodjela prijelazne snage IVGMR-a za ^{16}O pri čemu spektar ugladen lorentzijanom širine 1 MeV i dobiven u okviru RSSRPA i RSSRPA(d) formalizama pokazuje znatno veću robusnost na povećanje energije odsječka 2p–2h konfiguracija u usporedbi s izoskalarnim modom i konvergentno ponašanje za energije $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 120$ MeV. U odsutnosti suptraksijske metode dolazi do sve izraženijeg pomicanja dominantnih vrhova prema nižim energijama s porastom energije odsječka 2p–2h konfiguracija, pri čemu konvergentno ponašanje spektra nije uočeno. Slično kao u slučajevima RSTDA i RSSTDA, prijelazna snaga dominantnih vrhova iznad 30 MeV postupno se smanjuje s povećanjem odsječka 2p–2h konfiguracija. Međutim, bez primjene suptraksije ti se vrhovi pomiču i do približno 2 MeV prema nižim energijama u odnosu na RRPA rješenje. Primjenom suptraksijske metode navedeni se pomaci značajno reduciraju, čime se ostvaruje konvergencija položaja stanja i u spomenutom energijskom području spektra.



Slika 6.3: Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGMR.

Diskretna raspodjela prijelazne snage IVGMR-a, prikazana na slici 6.4, pokazuje stabilnije ponašanje u odnosu na izoskalarne modove, osobito u okviru RSSRPA formalizma. Primjenom suptraksijske metode položaji dominantnih diskretnih stanja pokazuju slabu ovisnost o energiji odsječka 2p–2h konfiguracija, uz jasno konvergentno ponašanje već za umjerene vrijednosti $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 120$ MeV. Nasuprot tome, u odsutnosti suptraksije uočava se sustavno pomicanje

položaja pobuđenih stanja prema nižim energijama s porastom odsječka s $E_{\text{cutoff}} = 120$ MeV na $E_{\text{cutoff}} = 180$ MeV. Usporedba s RRPA rješenjem dodatno pokazuje da uključivanje 2p–2h konfiguracija, uz primjenu suptrakcije, dovodi do umjerene fragmentacije spektra, ali bez pojave nerealnih niskoenergijskih stanja. Uz navedeno, slično kao i u slučaju ISGMR-a, najveća razlika u odnosu na RRPA rješenje proizlazi iz pojave većeg broja miješanih i gotovo čistih 2p–2h stanja koja se pojavljuju između dotadašnjih RRPA svojstvenih vrijednosti, ali i u visokoenergijskom dijelu spektra ($E_x \gtrsim 40$ MeV). Ta stanja, koja su povezana s dvočestičnim sudarima (i višim korelacijskim mehanizmima), daju značajan doprinos ukupnoj širini rezonancije, nadopunjujući Landauovo gušenje prisutno već na RRPA razini.

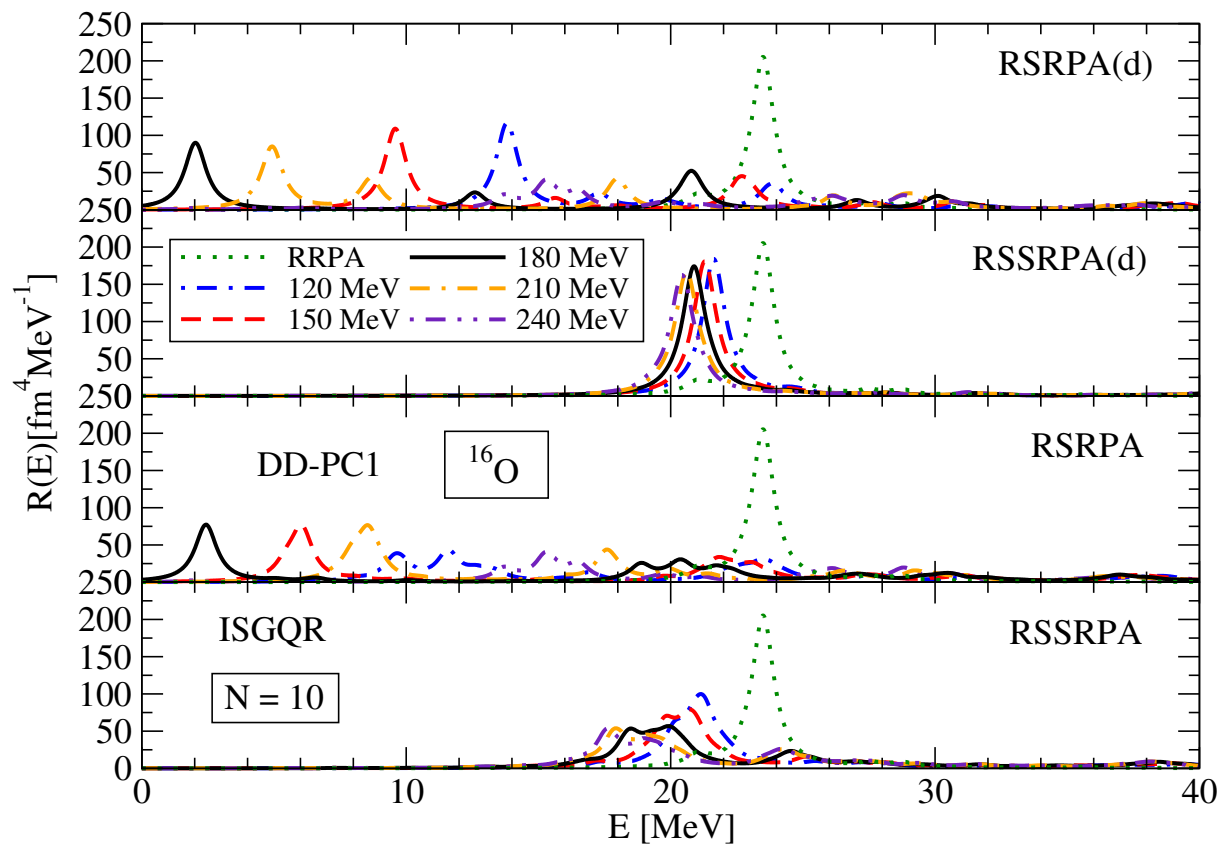


Slika 6.4: Isto kao na slici 6.2, ali za raspodjelu snage IVGMR.

6.4 Raspodjela prijelazne snage za ISGQR

Raspodjela prijelazne snage za ISGQR u jezgri ^{16}O prikazana je na slici 6.5. U okviru RSRPA i RSRPA(d) formalizma spektar pokazuje izraženu fragmentaciju i pomicanje prema nižim energijama pobuđenja, pri čemu se intenzitet tog pomaka sustavno povećava s porastom energije odsječka 2p–2h konfiguracija. Za vrijednosti odsječka $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 210$ MeV može se pojaviti jedan ili više parova kompleksno konjugiranih svojstvenih vrijednosti, što upućuje na nestabilnost RSRPA jednadžbi u odsutnosti suptrakcijske metode. Ovakvo ponašanje kvali-

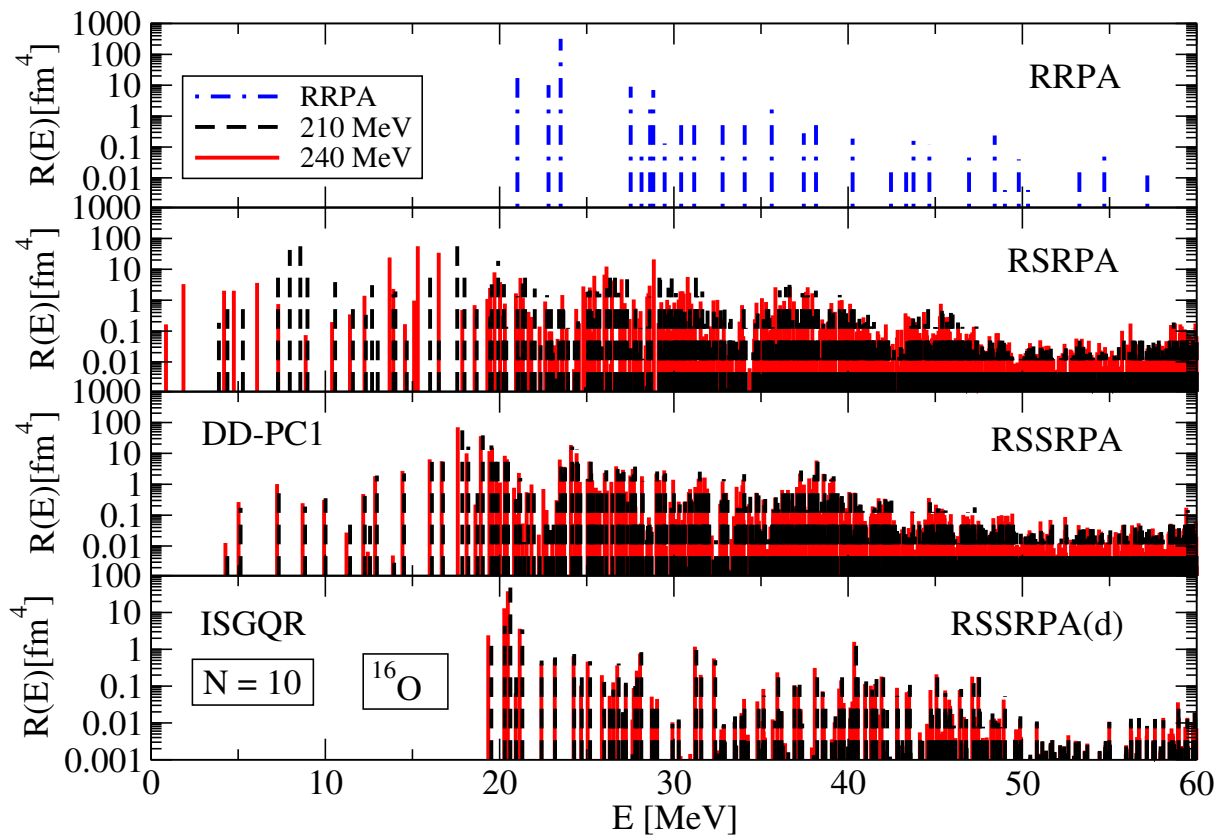
tativno se razlikuje od slučaja RSTDA, gdje se infracrvena divergencija manifestira snažnim pomicanjem dijela najnižih svojstvenih vrijednosti u negativno energijsko područje. U RSRPA formalizmu nestabilnost se, naprotiv, očituje kroz pojavu kompleksnih rješenja, čime se dodatno naglašava potreba za primjenom suptrakcijske metode radi osiguravanja stabilnosti i fizikalne konzistentnosti spektra. Primjenom suptrakcijske metode u okviru RSSRPA postiže se stabilizacija spektra, pri čemu položaji svojstvenih vrijednosti pokazuju slabu ovisnost o energiji odsječka 2p–2h konfiguracija te za energije $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 180$ MeV pokazuju jasno konvergentno ponašanje, dok raspodjela prijelazne snage ostaje fizikalno konzistentna. S druge strane, dijagonalna aproksimacija sa suptrakcijom također pokazuje konvergenciju, pri čemu se relativni pomak položaja stanja smanjuje za približno 25–35% pri svakom povećanju energije odsječka 2p–2h konfiguracija za 30 MeV.



Slika 6.5: Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage ISGQR.

Diskretni oblik raspodjele prijelazne snage ISGQR-a prikazan je na slici 6.6. U okviru RSRPA formalizma energijsko područje spektra pobuđenja ispod 20 MeV pokazuje izrazitu fragmentaciju, pri čemu se navedeni dio spektra raspada na dvadesetak diskretnih stanja uz istodobnu preraspodjelu dijela prijelazne snage prema tom energijskom području. Ni za relativno visoke energije odsječka 2p–2h konfiguracija, od 210 do 240 MeV, ne uočava se konvergentno ponašanje položaja svojstvenih vrijednosti. Naprotiv, pri povećanju odsječka s $E_{\text{cutoff}} = 210$ MeV na $E_{\text{cutoff}} = 240$ MeV i dalje su prisutni pomaci pojedinih stanja do približno 2 MeV. U središnjem

dijelu spektra, u energijskom intervalu od 20 do 40 MeV, kao i u repu raspodjele iznad 40 MeV, uočavaju se znatno manja pomicanja, tipično nekoliko puta pa do reda veličine manja u odnosu na niskoenergijski dio spektra. U usporedbi s RRPA rješenjem, dodatno se pojavljuje velik broj miješanih ($0.2 \lesssim \mathcal{N}_2 \lesssim 0.8$) i gotovo čistih 2p–2h stanja s normom $\mathcal{N}_2 \gtrsim 0.99$, koja daju značajan doprinos ukupnoj fragmentaciji i širini ISGQR rezonancije. Primjena suptraksijske metode, slično kao u slučaju GMR-a, ali i u jednostavnijem RSSTDA formalizmu, dovodi do stabilizacije spektra pobuđenja. Potpuni RSSRPA formalizam pritom se pokazuje jedinim pristupom koji uspijeva opisati veći dio eksperimentalno uočenih niskoležećih 2^+ stanja ispod 18 MeV [234]. Za razliku od GMR-a, dijagonalna aproksimacija u slučaju ISGQR-a pokazuje se nedostatnom za vjerodostojan opis energijskog spektra, budući da ne uspijeva reproducirati odgovarajući broj niskoležećih stanja niti njihovu pravilnu raspodjelu prijelazne snage.



Slika 6.6: Isto kao na slici 6.2, ali za raspodjelu snage ISGQR.

6.5 Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacijskog pravila za ISGQR

Analiza kolektivnih svojstava izoskalarne gigantske kvadrupolne rezonancije (ISGQR) obuhvaća sustavno ispitivanje energijskih momenata, centroida energije, širina raspodjele te pos-

totka ispunjenja energijski ponderiranog pravila sume (EWSR). Pripadni numerički rezultati za cjelokupni pozitivni spektar sumirani su u tablici 6.3, dok su vrijednosti unutar eksperimentalnog prozora [11, 40] MeV prikazane u tablici 6.4. U usporedbi s polaznim RRPA rezultatom, suptrahirani formalizmi RSSRPA(d) i RSSRPA u cijelom spektru predviđaju blago smanjenje ukupne prijelazne snage m_0 , čije vrijednosti iznose 364.591 i 365.911 fm⁴ u odnosu na RRPA vrijednost od 378.578 fm⁴ (smanjenje od 3.69% i 3.35%). Unutar eksperimentalnog prozora [11, 40] MeV pad snage je još izraženiji; RSSRPA(d) i RSSRPA bilježe pad na 325.630 i 331.083 fm⁴ u odnosu na početnih 377.190 fm⁴, što predstavlja smanjenje od oko 13.7% i 12.2%. Nasuprot tome, m_1 u cijelom spektru raste na 9767.270 i 10208.280 MeVfm⁴ u usporedbi s RRPA vrijednošću od 9060.486 MeVfm⁴ (porast od 7.80% i 12.67%). Međutim, unutar promatranog eksperimentalnog prozora moment m_1 opada u odnosu na RRPA rezultat (7046.127 i 7623.916 naspram 8976.663 MeVfm⁴), uz relativno smanjenje od 21.51% i 15.07%. Ovakva kombinacija reduciranog ukupnog intenziteta m_0 i globalno povećanog prvog momenta m_1 ukazuje na djelomičnu redistribuciju snage prema višim energijama izvan dosega eksperimentalnog raspona.

Tablica 6.3: Slično kao u tablici 6.1, ali za ISGQR u ¹⁶O. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RRPA	RSSRPA(d)	RSSRPA	Exp. [23]
m_0 [fm ⁴]	378.578	364.591	365.911	
m_1 [MeVfm ⁴]	9060.486	9767.270	10208.280	
m_2 [MeV ² fm ⁴]	221154.50	400687.00	430295.40	
m_{-1} [MeV ⁻¹ fm ⁴]	15.961	15.970	16.037	
m_1/m_0 [MeV]	23.933	26.790	27.898	19.76±0.22
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	23.826	24.730	25.230	
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	25.156	56.367	55.779	
Δ [MeV]	3.374	19.527	19.941	5.11±0.17
EWSR[%]	100.12	107.93	112.80	53±10

Inverzni moment m_{-1} ostaje gotovo nepromijenjen u čitavom spektru, uz minimalna odstupanja u odnosu na RRPA (0.06% za RSSRPA(d) i 0.48% za RSSRPA), što sugerira da uključivanje 2p–2h konfiguracija slabo utječe na statičku polarizabilnost u globalnom smislu. Ipak, unutar eksperimentalnog prozora opaža se pad m_{-1} za približno 4% (s 15.935 na 15.284 i 15.316 MeV⁻¹fm⁴), što prati trend smanjenja udjela spektralne snage u tom intervalu. Takve promjene reflektiraju se i na vrijednostima $\sqrt{m_1/m_{-1}}$ te na razini cijelog spektra one blago rastu u odnosu na RRPA (do 5.89% u slučaju RSSRPA), dok u eksperimentalnom prozoru dolazi do umjerenog pada (do 9.54% u slučaju RSSRPA(d)). Ova razlika ukazuje na omekšavanje efektivne energije kada se promatra samo mjerljivi raspon.

Slično kao i u slučaju RSSTDA, centroid energije pokazuje različito ponašanje ovisno o tome promatra li se cijeli spektar ili samo eksperimentalni energijski prozor. U cijelom spektru

Tablica 6.4: Slično kao u tablici 6.1, ali za ISGQR unutar energijskog prozora pobuđenja od 11 do 40 MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].

	RRPA	RSSRPA(d)	RSSRPA	Exp. [23]
m_0 [fm ⁴]	377.190	325.630	331.083	
m_1 [MeVfm ⁴]	8976.663	7046.127	7623.916	
m_2 [MeV ² fm ⁴]	215122.50	155998.70	189018.00	
m_{-1} [MeV ⁻¹ fm ⁴]	15.935	15.284	15.316	
m_1/m_0 [MeV]	23.799	21.638	23.027	19.76±0.22
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	23.735	21.471	22.311	
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	24.073	22.508	25.795	
Δ [MeV]	1.987	3.293	6.376	5.11± 0.17
EWSR[%]	99.19	77.86	84.24	53±10

uključivanje 2p–2h konfiguracija pomiče centroid prema višim energijama, pri čemu je taj pomak izraženiji u RSSRPA aproksimaciji (povećanje od 16.57%) nego u RSSRPA(d) (povećanje od 11.94%). Unutar eksperimentalnog prozora, RSSRPA(d) položaj centroida spušta se na 21.638 MeV (smanjenje od 9.08%), dok u slučaju RSSRPA ostaje blizu RRPA na 23.027 MeV (smanjenje od 3.24%). Takvo ponašanje pokazuje da proširene aproksimacije (RSSRPA i RSSRPA(d)) ne djeluju samo kao jednostavan globalni pomak snage prema višim energijama, nego mijenjaju i unutarnju raspodjelu prijelazne snage u području koje je izravno usporedivo s eksperimentom. Istodobno, omjer momenata $\sqrt{m_3/m_1}$, koji je posebno osjetljiv na visokenergijski dio raspodjele prijelazne snage, u cijelom spektru pokazuje izrazit porast u obje proširene aproksimacije. U RSSRPA(d) navedeni omjer iznosi 56.367 MeV, a u punoj RSSRPA 55.779 MeV, što odgovara povećanju većem od 120% u odnosu na RRPA vrijednost (25.156 MeV). Takav rezultat upućuje na snažno premještanje dijela prijelazne snage prema višim energijama nakon uključivanja 2p–2h konfiguracija. Unutar eksperimentalnog prozora, omjer $\sqrt{m_3/m_1}$ za RSSRPA(d) iznosi 22.508 MeV, što predstavlja pad od 6.50% u odnosu na RRPA rezultat. Nasuprot tome, RSSRPA izračun daje nešto višu vrijednost, odnosno 25.795 MeV (porast od 7.15%). Navedena razlika odražava različite mehanizme redistribucije prijelazne snage koji su prisutni u razmatranim proširenim aproksimacijama, pri čemu u punoj suptrahiranoj shemi ključnu ulogu ima rezidualno međudjelovanje između 2p–2h konfiguracija, koje je u dijagonalnom pristupu zanemareno u svim koracima suptraksijske procedure.

Uključivanjem 2p–2h konfiguracija efektivna širina Δ duž cijelog spektra bilježi višestruki porast pri prijelazu s RRPA na suptrahirane sheme, odnosno s 3.374 MeV na 19.527 MeV kod RSSRPA(d), odnosno na 19.941 MeV u punoj RSSRPA shemi. Unutar eksperimentalnog prozora porast je umjereniji, ali i dalje značajan, s 1.987 MeV kod RRPA na 3.293 MeV za dijagonalnu aproksimaciju, te na 6.376 MeV za punu shemu. Vrijednost Δ dobivena na RRPA razini (≈ 2 MeV) prvenstveno je rezultat Landauovog gušenja, odnosno fragmentacije pobuđenja na jednostavne 1p–1h konfiguracije. Nasuprot tome, snažno širenje raspodjele u

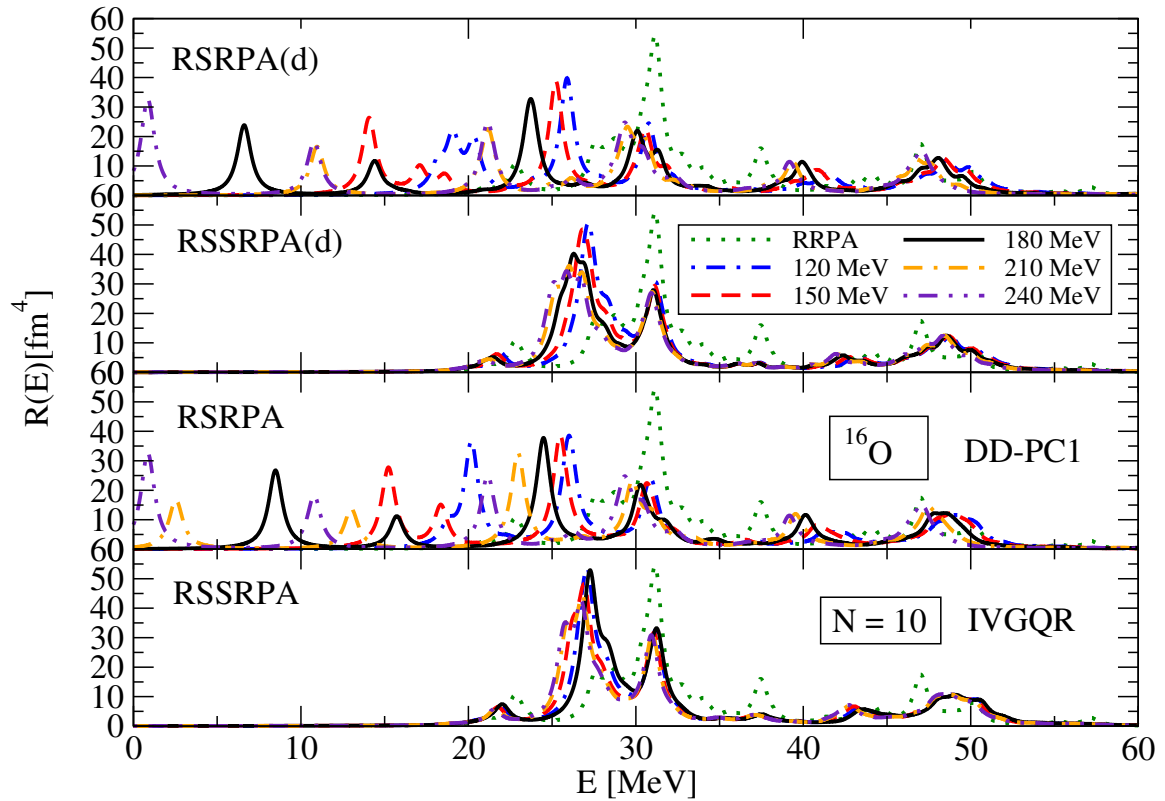
proširenim formalizmima proizlazi iz vezanja 1p–1h sa složenijim 2p–2h konfiguracijama, ali i miješanjem unutar 2p–2h konfiguracija. Činjenica da se glavina dodatnog širenja odvija izvan mjerljivog prozora sugerira da se navedeni mehanizam manifestira i na nešto višim energijama. U usporedbi s eksperimentalnom vrijednošću od (5.11 ± 0.17) MeV, očito je da standardna RRPA i RSSRPA(d) podcjenjuju širinu raspodjele, dok puna RSSRPA, unatoč blagom precjenjivanju, kvalitativno najbolje reproducira eksperimentalno opaženu širinu.

Za ISGQR (2^+) EWSR udjeli za RRPA iznose 100.12% u cijelom spektru i 99.19% unutar eksperimentalnog prozora, što implicira gotovo potpuno ispunjenje sumacijskog pravila u oba slučaja. Uključivanje 2p–2h konfiguracija u RSSRPA(d) i RSSRPA redistribuira snagu, pri čemu se u cijelom spektru dobiva povećano iscrpljenje EWSR-a, 107.93% u RSSRPA(d) i 112.80% u punoj RSSRPA aproksimaciji. Međutim, kada se promatra samo eksperimentalni energijski prozor, odgovarajući udjeli padaju na 77.86% i 84.24%, što znači da se dio prijelazne snage pomiče izvan promatranog intervala. Eksperimentalna vrijednost iznosi $(53 \pm 10)\%$ [23], pa svi teorijski pristupi precjenjuju izmjereni EWSR udio unutar eksperimentalnog prozora, pri čemu je odstupanje najveće za RRPA, a manje za RSSRPA(d) i RSSRPA. Ipak, uvođenje 2p–2h konfiguracija približava teorijski rezultat eksperimentalnoj vrijednosti jer smanjuje udio snage u prozoru od gotovo potpunog iscrpljenja u RRPA na približno 80% u proširenim aproksimacijama. To upućuje na to da korelacije višeg reda imaju važnu ulogu u fragmentaciji i redistribuciji kvadrupolne snage, iako ni RSSRPA(d) ni puna RSSRPA ne reproduciraju u potpunosti eksperimentalno opaženo iscrpljenje EWSR-a.

6.6 Raspodjela prijelazne snage za IVGQR

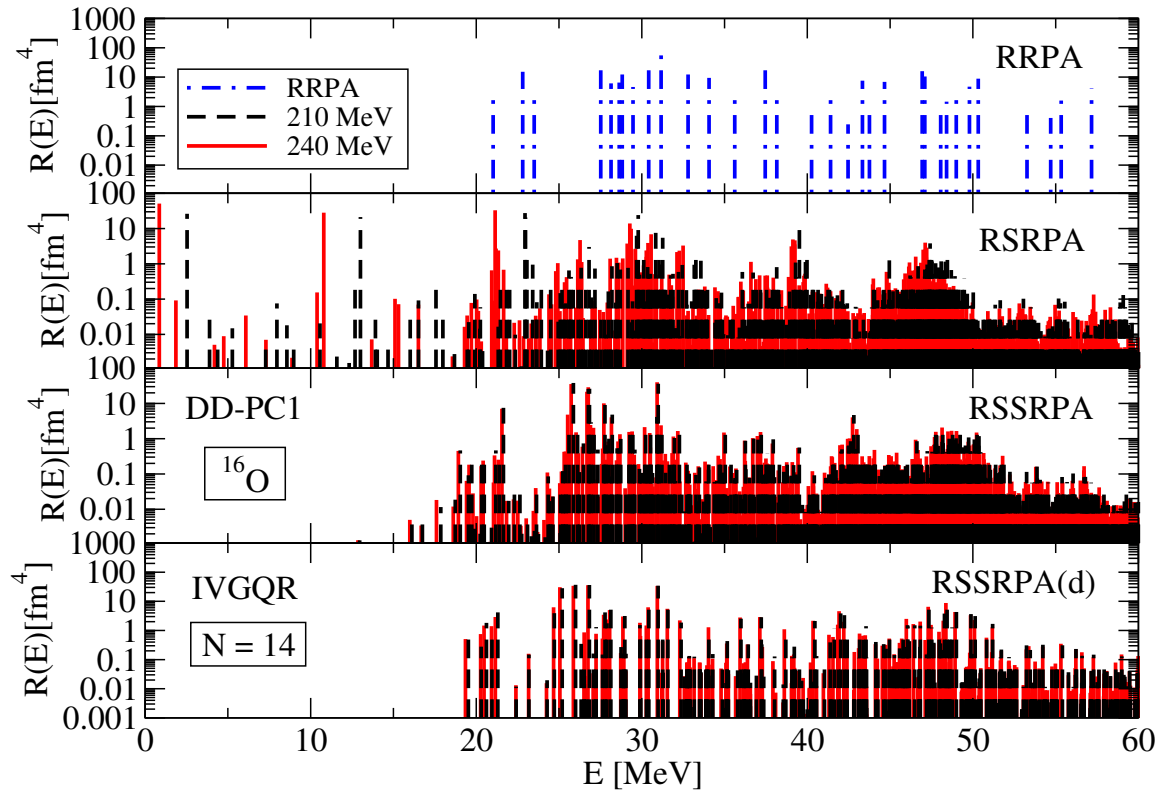
Raspodjele prijelazne snage IVGQR-a za ^{16}O dobivene za različite energijske odsječke 2p–2h konfiguracija prikazane su na slikama 6.7 i 6.8. Prva slika prikazuje raspodjelu prijelazne snage uglađenu Lorentzovom funkcijom širine 1 MeV za sve varijante RSRPA formalizma, bez i s primjenom suptrakcijske metode, dok druga prikazuje diskretne doprinose pojedinih aproksimacija (RRPA, RSRPA, RSSRPA i RSSRPA(d)). U slučaju RSRPA(d) i RSRPA uočava se izraženo pomicanje dominantnih vrhova u spektru pobuđenja, koji se u pravilu nalaze ispod 30 MeV, prema nižim energijama s porastom energije odsječka 2p–2h konfiguracija. Za odsječke s energijama $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 150$ MeV to pomicanje iznosi približno 5 do 15 MeV u odnosu na RRPA, pri čemu su energijski najniži vrhovi ujedno i najizraženije pomaknuti (vidjeti sliku 6.7). Navedena pojava praćena je i preraspodjelom prijelazne snage, tako da najviše pomaknuti vrhovi ostvaruju nešto veću prijelaznu snagu, dok ukupna snaga u pozitivnom dijelu spektra ostaje praktički nepromijenjena. S druge strane, RSSRPA u potpunom i dijagonalnom obliku (RSSRPA(d)) okarakterizirana je relativno slabom ovisnošću o energiji odsječka 2p–2h konfiguracija te za energije $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 180$ MeV pokazuje jasno konvergentno ponašanje.

Diskretni spektar, s druge strane, jasnije ilustrira razlike između svojstvenih vrijednosti



Slika 6.7: Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGQR.

dobivenih rješavanjem RRPA i RSRPA jednadžbi. Uključivanjem 2p–2h konfiguracija pojavljuje se znatno veći broj pobuđenih stanja u području između vrhova koji su u RRPA formalizmu bili dominantni, što rezultira izraženijom fragmentacijom spektra (vidjeti sliku 6.8). Iako je Landauovo gušenje prisutno već na razini RRPA, tek u okviru RSRPA dolazi do stvaranja realistične širine rezonancije, koja, među ostalim mehanizmima, proizlazi i iz dvočestičnih sudara. RSRPA formalizam pritom pokazuje i određena ograničenja, jer s porastom energije odsječka 2p–2h konfiguracija dolazi do neprirodne redistribucije dijela prijelazne snage prema nižem dijelu spektra, tipično u područje ispod 15 MeV, što nema fizičko uporište. Štoviše, za vrijednosti odsječka $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 240$ MeV može doći do pojave kompleksnih svojstvenih vrijednosti, odnosno jednog ili više parova kompleksno konjugiranih rješenja, što jasno ukazuje na nestabilnost RSRPA jednadžbi u odsutnosti suptrakcijske metode. Primjenom suptrakcije postiže se stabilizacija spektra, pri čemu se položaji predominantnih 1p–1h i miješanih diskretnih vrhova sada mijenjaju tek za 120–180 keV pri povećanju energije odsječka 2p–2h konfiguracija s 210 na 240 MeV. Za stanja s dominantnim 2p–2h karakterom ti su pomaci još manji i u pravilu ne prelaze 100 keV za isti raspon energija odsječka.

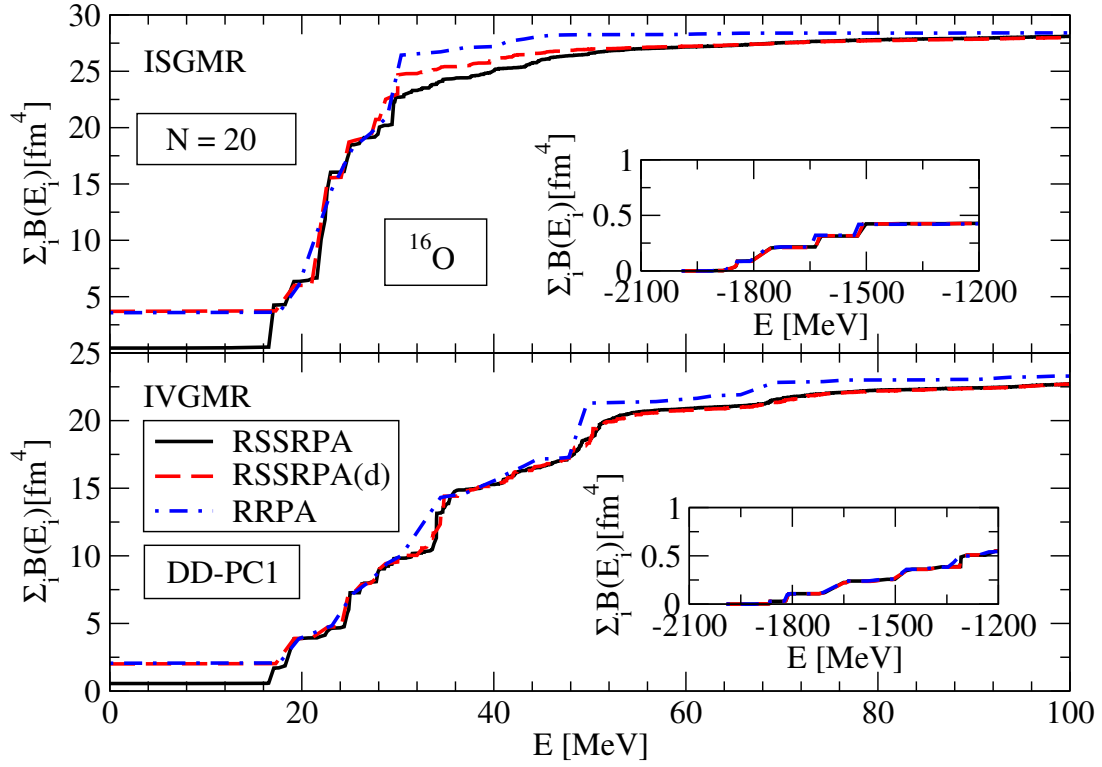


Slika 6.8: Isto kao na slici 6.2, ali za raspodjelu snage IVGQR.

6.7 Kumulativna snaga GMR i GQR prijelaza

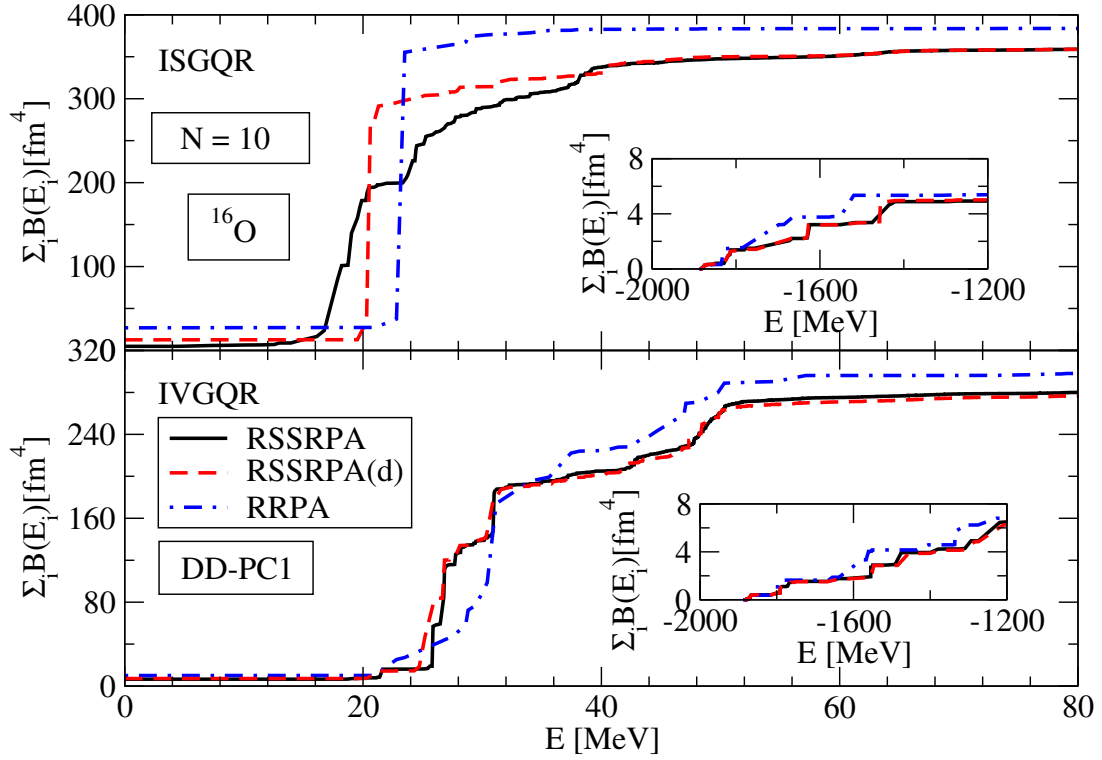
Kumulativna snaga u slučaju ISGMR i IVGMR za jezgru ^{16}O za RRPA, RSSRPA i RSRPA(d) za kompletan energijski spektar (negativne i pozitivne energije pobuđenja do 100 MeV) prikazana je na slici 6.9. Za izoskalarnu komponentu (ISGMR), sve tri aproksimacije pokazuju relativno brzo zasićenje kumulativne snage u području $10 \lesssim E \lesssim 40$ MeV, pri čemu prethodi RRPA, osobito u području iza 25 MeV. Iznad 40 MeV, vrijednosti za RSSRPA i RSSRPA(d) asimptotski se približavaju zasićenoj RRPA vrijednosti, no u promatranom energijskom području ostaju neznatno niže. U slučaju IVGMR, sve tri metode pokazuju veći stupanj fragmentacije, što rezultira sporijim zasićenjem kumulativne snage. Vrijednost kumulativne snage RRPA ima nešto brži rast od suptrahiranih shema, ali kumulativne vrijednosti za RSSRPA i RSSRPA(d) ne premašuje vrijednost RRPA za područje $E \gtrsim 65$ MeV.

Analiza kumulativne prijelazne snage za ISGQR i IVGQR u ^{16}O , prikazane na slici 6.10, jasno ocrta fundamentalne razlike u dinamici nuklearnih pobuđenja ovisno o primijenjenom teorijskom pristupu. Dok standardni RRPA pristup rezultira naglim, stepenastim skokovima karakterističnim za Landauovo prigušenje (fragmentacija na 1p–1h konfiguracije), suptrahirane sheme RSSRPA i RSSRPA(d) uvode raniji početak nakupljanja snage, što je vezano uz pomak dominantnih vrhova prema nižim energijama, ali i kontinuiraniju fragmentaciju spektra (vidjeti poglavlja 6.4 i 6.6). Ovo "omekšavanje" spektra izravna je manifestacija vezanja 1p–1h konfigu-



Slika 6.9: Kumulativna snaga u slučaju ISGMR i IVGMR u jezgri ^{16}O .

racija na složenije 2p–2h konfiguracije, što u punoj RSSRPA shemi, zahvaljujući eksplicitnom uključivanju rezidualnog međudjelovanja između 2p–2h parova, poprima najizraženiji oblik, osobito u ISGQR. Važno je primijetiti da prošireni formalizmi potiskuju značajan dio snage prema visokoenergijskom repu (vidjeti omjere $\sqrt{m_3/m_1}$ u poglavlju 6.5), što rezultira nižim zasićenjem ukupne snage unutar prikazanog raspona u odnosu na RRPA. Štoviše, za područje $E \gtrsim 45$ MeV, vrijednosti kumulativne snage u RSSRPA i RSSRPA(d), iako međusobno bliske, uvijek su niže od RRPA u oba izospinska kanala.



Slika 6.10: Kumulativna snaga u slučaju ISGQR i IVGQR u jezgri ^{16}O .

6.8 Mikroskopska razlika između RSRPA i RSSRPA

U nastavku je detaljnije analizirana struktura pobuđenih stanja monopolnih prijelaza u ^{16}O , razmatranih u okviru RSRPA i RSSRPA. Primjer strukture pobuđenog 0^+ stanja u relativističkoj RPA (RRPA) aproksimaciji koji se nalazi na energiji $E_x = 17.66$ MeV prikazan je u tablici 6.5. Navedeno stanje pokazuje izrazito jednostavnu strukturu, gotovo u potpunosti određenu jednom čestica–šupljina (1p–1h) konfiguracijom. Dominantni doprinosi normi, veći od 98%, potječe od protonske konfiguracije $(2p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$, dok je neutronska komponenta istog tipa zastupljena tek na razini 1%. Svi preostali 1p–1h doprinosi nalaze se ispod praga od 10^{-3} i imaju zanemariv utjecaj na ukupnu strukturu stanja. Ovakva raspodjela jasno ukazuje na gotovo čisti 1p–1h karakter pobuđenog stanja, bez značajnije konfiguracijske raspodjele. Na taj način se potvrđuje da u okviru RRPA aproksimacije navedeno stanje nema kolektivni karakter, već se može interpretirati kao jednostavno pobuđenje protona iz stanja ispod u stanje iznad Fermijevog nivoa. Takav rezultat služi kao referentna točka za kasnije usporedbe s proširenim formalizmima koji uključuju 2p–2h konfiguracije.

U tablici 6.6 prikazan je pretpostavljeni SRPA pandan prethodnog stanja koje se nalazi na $E_x = 14.86$ MeV. Struktura promatranog pobuđenog stanja pokazuje miješani karakter, pri čemu dominantni doprinos i dalje potječe od čestica–šupljina (1p–1h) konfiguracija, koje nose približno 85% ukupne norme. Najveći udio pripada protonskoj konfiguraciji $(2p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$, uz značajan, ali manji doprinos ekvivalentne neutronske konfiguracije. Preostale 1p–1h kom-

Tablica 6.5: Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) parova i njihovi doprinosi u slučaju RRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 17.66$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$	0.98640
$(2p_{1/2})^\nu(1p_{1/2})^\nu$	0.01072
$(2p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.00078
$(3p_{1/2})^\nu(1p_{1/2})^\nu$	0.00075
$(3p_{3/2})^\nu(1p_{3/2})^\nu$	0.00025
$(2s_{1/2})^\pi(1s_{1/2})^\pi$	0.00010
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1
U rasponu [0.01 – 0.1]	1
U rasponu [0.001 – 0.01]	0
U rasponu [< 0.001]	106

ponente raspoređene su na veći broj konfiguracija s pojedinačnim doprinosima ispod 0.05, što ukazuje na umjerenu fragmentaciju unutar 1p–1h prostora. Dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije doprinose ukupnoj normi na razini od oko 14%, pri čemu niti jedna pojedinačna konfiguracija ne prelazi prag od 0.1. Najveći 2p–2h doprinos potječe od konfiguracija koje uključuju orbitale $2s_{1/2}$ i $1d_{5/2}$ u kombinaciji s p -ljuskom, ali njihov utjecaj ostaje sekundaran u odnosu na vodeće 1p–1h komponente. Ovakva raspodjela ukazuje da je stanje primarno 1p–1h prirode, uz mjerljiv, ali ne dominantan doprinos višestruko pobuđenih konfiguracija. Drugim riječima, ovakav rezultat potvrđuje da je promatrano SRPA stanje na 14.86 MeV doista pandan navedenog RRPA pobuđenja na 17.66 MeV, pri čemu uključivanje 2p–2h stupnjeva slobode dovodi do umjerene fragmentacije, ali bez potpune promjene osnovnog karaktera stanja.

Primjenom suptrakcijske metode promatrano pobuđeno stanje pomiče se s $E_x = 14.86$ MeV ka višoj energije pobuđenja, odnosno $E_x = 17.08$ MeV (vidjeti tablicu 6.7), međutim i dalje pokazuje pretežno jednočestično–jednošupljinski (1p–1h) karakter, s jasno izraženom dominacijom protonske konfiguracije $(2p_{1/2})^\pi(1p_{1/2})^\pi$, koja sama nosi približno 85% ukupne norme. Neutronska ekvivalentna konfiguracija doprinosi na razini nekoliko posto, dok su sve ostale 1p–1h komponente znatno slabije zastupljene i nalaze se ispod praga od 1%. Uključivanje dvočestično–dvošupljinskih (2p–2h) konfiguracija uvodi dodatnu, ali i dalje relativno skromnu fragmentaciju valne funkcije, pri čemu najveći pojedinačni doprinosi potječu iz konfiguracija tipa $(2s_{1/2}, 2s_{1/2})$ u kombinaciji s $(1p_{1/2}, 1p_{1/2})$. Njihov ukupni doprinos normi iznosi oko 10%, što je nešto manje u odnosu na strukturno slično stanje na 14.86 MeV, u kojem odgovarajući doprinos doseže oko 14%. Time se potvrđuje da je promatrano SSRPA stanje na 17.08 MeV pandan RRPA pobuđenja na 17.66 MeV, čiji se osnovni strukturni karakter zadržava i nakon proširenja konfiguracijskog prostora, ali i primjene suptrakcijske metode. Usporedba sa standardnom RRPA aproksimacijom pokazuje da korelacije višeg reda dovode do umjerene redistribucije norme, ali ne uzrokuju kvalitativnu promjenu prirode pobuđenog stanja. Drugim riječima, navedeno RSSRPA stanje je i dalje primarno 1p–1h prirode.

Tablica 6.6: Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) i dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije te njihovi doprinosi normi u slučaju RSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 14.86$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.67026
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.10615
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.03969
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.01563
$(4p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00828
$(4p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00353
$(5p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00226
$(2s_{1/2})^\pi (1s_{1/2})^\pi$	0.00223
$(2s_{1/2})^\nu (1s_{1/2})^\nu$	0.00115
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	2 (0.77641)
U rasponu [0.01 – 0.1]	2 (0.05532)
U rasponu [0.001 – 0.01]	5 (0.01745)
U rasponu [< 0.001]	99 (0.00588)
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.01033
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\nu^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\nu^0]^0$	0.00534
$[(2p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00439
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00388
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00373
$[(1d_{3/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00337
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.00332
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00305
$[(3p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00300
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.00298
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.1 – 0.9999]	0 (0.00000)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.01033)
U rasponu [0.001 – 0.01]	30 (0.06790)
U rasponu [< 0.001]	7390 (0.06322)

Za razliku od prethodno promatranog stanja pretežno 1p–1h prirode koje se nalazilo ispod 20 MeV, kao primjer nešto kvalitativno drugačijeg pobuđenog stanja razmotreno je RSRPA stanje na $E_x = 21.21$ MeV koje je prikazano u tablici 6.8. Za razliku od prethodnog stanja, gdje je dominantna konfiguracija vezana uz pobuđenje iz protonske orbitale $1p_{3/2}$ prema višim jednočestičnim stanjima iznad Fermijeveg nivoa, u navedenom stanju ne postoji jasna dominacija jedne 1p–1h konfiguracije, iako konfiguracija $(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$ sadrži oko 9% doprinosa normi. Drugim riječima, amplituda koja bi u jednostavnijem opisu bila koncentrirana u jednoj vodećoj konfiguraciji raspodjeljuje se na veći broj komponenti, pri čemu niti jedna 1p–1h konfiguracija ne prelazi doprinos normi od 10%. Istodobno, značajan dio norme prelazi u 2p–2h prostor, gdje više konfiguracija s orbitalama $3s_{1/2}$ i $1d_{3/2}$ iznad Fermijeveg nivoa u kombinaciji sa šupljinama u p -ljusci nosi najveće doprinose i upućuje na snažno miješanje sd -ljuske i p -ljuske. Zbog snažne fragmentacije u slučaju RSRPA, spomenuto je stanje jedno od pet stanja slične strukture, čiji

Tablica 6.7: Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) i dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije te njihovi doprinosi normi u slučaju RSSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 17.08$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.84943
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.03560
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00367
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00266
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00100
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.84943)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.03560)
U rasponu [0.001 – 0.01]	2 (0.00633)
U rasponu [≤ 0.001]	104 (0.00354)
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.02146
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\nu^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\nu^0]^0$	0.00991
$[(2p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00341
$[(2s_{1/2}, 2p_{1/2})_\pi^0 (1s_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00242
$[(3p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00228
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00218
$[(2p_{1/2}, 3p_{3/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.00147
$[(4p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00140
$[(2p_{1/2}, 4p_{3/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.00139
$[(1d_{5/2}, 2d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00135
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.1 – 0.9999]	0 (0.00000)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.02146)
U rasponu [0.001 – 0.01]	13 (0.03053)
U rasponu [≤ 0.001]	7407 (0.05206)

su položaji između 20.3 do 22.3 MeV. Fizički gledano, to znači da se odgovarajuća prijelazna snaga ne manifestira kao jedna dominantna rezonancija, nego se raspada na nekoliko stanja s usporedivo velikim doprinosima. Takvo ponašanje je očekivano kada korelacije višeg reda učinkovito spajaju 1p–1h i 2p–2h prostore te uzrokuju redistribuciju snage u konfiguracijskom prostoru. Posljedično, interpretacija ovog dijela spektra zahtijeva prošireni formalizam jer se priroda pobuđenja ne može pouzdano opisati unutar jednostavne RRPA slike, već tek kroz višekonfiguracijsku strukturu i fragmentiranu prijelaznu snagu u spektru pobuđenih stanja.

Primjenom suptrakcije pobuđena stanja se pomiču ka višim energijama, iako su ti pomaci nešto manji nego za stanja ispod 20 MeV. Jedno od promatranih RSSRPA stanja, na 22.42 MeV, prikazano je u tablici 6.9. Navedeno stanje predstavlja snažno fragmentiranu verziju pobuđenja koja bi u najjednostavnijem opisu odgovarala prijelazu iz protonske orbitale $1p_{3/2}$ ispod Fermijeve razine u viša jednočestična stanja, međutim ovdje je teško govoriti o odgovarajućem jednoznačnom RRPA pandan-stanju. Za razliku od RRPA slike, u kojoj je prijelazna snaga koncentrirana u jednom ili dva stanja, ovdje se ona raspodjeljuje na više fragmenata s usporedivim doprinosima, pri čemu 1p–1h prostor svakog od stanja doprinosi najviše s nekoliko desetaka

Tablica 6.8: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 21.21$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.09126
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.03256
$(3p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.00700
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00682
$(4p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00151
$(4p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.00131
$(3s_{1/2})^\nu (1s_{1/2})^\nu$	0.00120
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.01 – 0.1]	2 (0.12381)
U rasponu [0.001 – 0.01]	5 (0.01785)
U rasponu [≤ 0.001]	101 (0.00201)
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.12745
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.11185
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\nu^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.09262
$[(3s_{1/2}, 1d_{3/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.09010
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.04503
$[(2s_{1/2}, 2d_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.04296
$[(2s_{1/2}, 2d_{3/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.03739
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.03489
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.03479
$[(2s_{1/2}, 2d_{3/2})_\nu^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.03094
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.1 – 0.9999]	2 (0.23930)
U rasponu [0.01 – 0.1]	11 (0.47293)
U rasponu [0.001 – 0.01]	27 (0.09135)
U rasponu [≤ 0.001]	7381 (0.05206)

posto. U konkretnom slučaju se radi o pet stanja između 22.0 i 23.0 MeV sličnog doprinosa prijelazne snage. Iako je vodeća 1p–1h komponenta u stanju još uvijek prepoznatljiva, njezin relativni doprinos značajno je smanjen, dok veći dio norme prelazi u 2p–2h prostor. Dominantne 2p–2h konfiguracije uključuju pobuđenja unutar sd -ljuske, posebice kombinacije orbitala $1d_{3/2}$ i $1d_{5/2}$, povezane sa šupljinama u p -ljusci. Time se jasno očituje snažno miješanje 1p–1h i 2p–2h konfiguracija, što je i dovelo do razbijanja prijelazne snage na nekoliko stanja. Ovakva struktura potvrđuje da primjenom metode suptrakcije, odnosno u RSSRPA formalizmu pobuđenja i dalje zadržava izraziti kolektivni i višekonfiguracijski karakter, iako pritom može doći do preraspodjele konfiguracija unutar 2p–2h konfiguracijskog prostora.

Tablica 6.9: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 22.42$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.10508
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.02696
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.00442
$(3p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.00347
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00321
$(2s_{1/2})^\nu (1s_{1/2})^\nu$	0.00312
$(2s_{1/2})^\pi (1s_{1/2})^\pi$	0.00241
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00239
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.10508)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.02696)
U rasponu [0.001 – 0.01]	6 (0.01901)
U rasponu [≤ 0.001]	100 (0.00418)
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\nu^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\nu^0]^0$	0.16114
$[(1d_{3/2}, 2d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.05074
$[(1d_{3/2}, 2d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.04399
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.03602
$[(1d_{3/2}, 2d_{5/2})_\nu^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.03486
$[(1d_{3/2}, 2d_{5/2})_\nu^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\nu^2]^0$	0.03366
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.02807
$[(1d_{3/2}, 1d_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.02639
$[(1d_{5/2}, 2d_{5/2})_\pi^2 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.02130
$[(2p_{1/2}, 2p_{3/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.02093
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.16114)
U rasponu [0.01 – 0.1]	21 (0.48194)
U rasponu [0.001 – 0.01]	44 (0.14193)
U rasponu [≤ 0.001]	7355 (0.05927)

6.9 Mikroskopska razlika između potpunog i dijagonalnog oblika RSSRPA

Ostaje promotriti mikroskopsku strukturu stanja u dijagonalnoj aproksimaciji, RSSRPA(d). Za RSSRPA stanje na 14.86 MeV (tablica 6.6) pandan stanje u RSSRPA(d) nalazi se na 15.51 MeV i prikazano je u tablici 6.10. Struktura promatranog stanja obilježena je izrazitom dominacijom protonske 1p–1h konfiguracije $(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$, koja nosi više od 84% ukupne norme. Iduće dvije konfiguracije, odnosno $(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$ i $(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$, doprinose redom tek s oko 3.7% i 3.5%. Manji, ali još uvijek vidljivi doprinosi dolaze od prijelaza u više protonske $p_{1/2}$ i $s_{1/2}$ orbitale, kao i od neutronske pobuđenja, što upućuje na umjereno miješanje unutar 1p–1h prostora. Drugim riječima, prijelazna snaga je ovdje znatno koncentriranija u 1p–1h prostoru, odnosno stanje zadržava pretežno jednočestični karakter ($\mathcal{N}_1 \approx 94\%$). Dvočestično–dvošupljinske konfiguracije pojavljuju se u velikom broju, ali njihov ukupni doprinos normi

ostaje ispod 6%, pri čemu nijedna pojedinačna 2p–2h komponenta ne prelazi prag od 1%. Takva raspodjela jasno pokazuje da korelacije višeg reda u ovom slučaju ne dovode do snažne fragmentacije unutar konfiguracijskog prostora, već samo do blage redistribucije norme. Stoga, promatrano stanje ujedno predstavlja strukturno očuvan pandan RPPA pobuđenju (tablica 6.5), čija je priroda primarno definirana jednočestičnim 1p–1h prijelazom protona iz zauzete $1p_{1/2}$ u nepopunjenu $2p_{1/2}$ orbitalu.

Tablica 6.10: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSRPA(d) za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 15.51$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.84469
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.03717
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.03512
$(4p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00698
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00566
$(2s_{1/2})^\pi (1s_{1/2})^\pi$	0.00300
$(5p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00179
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.00119
$(3s_{1/2})^\pi (1s_{1/2})^\pi$	0.00117
$(4p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00110
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.84469)
U rasponu [0.01 – 0.1]	2 (0.07229)
U rasponu [0.001 – 0.01]	7 (0.02089)
U rasponu [≤ 0.001]	98 (0.00521)
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00445
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00314
$[(2p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00267
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00199
$[(3p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00184
$[(2s_{1/2}, 2p_{1/2})_\pi^0 (1s_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00144
$[(4p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00117
$[(2p_{1/2}, 4p_{3/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.00102
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00101
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.001 – 0.01]	9 (0.01872)
U rasponu [≤ 0.001]	7412 (0.03544)

Nakon primjene postupka suptrakcije u dijagonalnoj aproksimaciji, ranije opisano stanje na $E_x = 15.51$ MeV pomiče se u RSSRPA(d) na $E_x = 17.28$ MeV. Budući da se i dalje radi o stanju s izrazito sličnom dominantnom konfiguracijskom strukturom (vidjeti tablicu 6.11), ono se može smatrati strukturno odgovarajućim stanjem (pandanom) prethodno analiziranom RSRPA(d) slučaju. Njegova mikroskopska struktura je i dalje obilježena dominantnom protonskom 1p–1h konfiguracijom $(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$, koja nosi približno 94% ukupne norme. Neutronska analogna konfiguracija $(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$ doprinosi tek na razini od oko 1.4%, dok su ostale 1p–1h

komponente pojedinačno znatno manje i ne mijenjaju osnovni karakter stanja. Ukupni 1p–1h doprinos iznosi približno $N_1 \simeq 96\%$, čime je prijelazna snaga još izraženije koncentrirana u jednočestičnom prostoru nego u RSRPA(d) slučaju (bez suptrakcije). Dvočestično–dvošupljinske konfiguracije daju samo mali doprinos, približno $N_2 \simeq 4\%$, pri čemu nijedna dominantna 2p–2h komponenta ne prelazi prag od 1%. Stoga se može zaključiti da postupak suptrakcije u ovom slučaju ne dovodi do značajne kvalitativne promjene mikroskopske strukture, nego ponajprije pomiče energiju stanja uz očuvanje njegova gotovo čistog protonskog 1p–1h karaktera.

Tablica 6.11: Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSRPA(d) za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 17.28$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.94230
$(2p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.01401
$(3p_{1/2})^\pi (1p_{1/2})^\pi$	0.00208
$(3p_{1/2})^\nu (1p_{1/2})^\nu$	0.00121
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	1 (0.94230)
U rasponu [0.01 – 0.1]	1 (0.01401)
U rasponu [0.001 – 0.01]	2 (0.00329)
U rasponu [≤ 0.001]	104 (0.00235)
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00590
$[(2p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00194
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00183
$[(3p_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1s_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00130
$[(2s_{1/2}, 2p_{1/2})_\pi^0 (1s_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00114
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.001 – 0.01]	5 (0.01211)
U rasponu [≤ 0.001]	7416 (0.02497)

Zbog velikog miješanja konfiguracija u energijskom području od 20.3 do 22.3 MeV teško je govoriti o jednoznačnom pandanu RSRPA stanja koje se pojavljuje u dijagonalnoj aproksimaciji (RSRPA(d)), no jedan od mogućih kandidata jest stanje na 21.28 MeV koje je prikazano u tablici 6.12. Navedeno stanje pokazuje izraženu dominaciju pobuđenja iz protonske orbitale $1p_{3/2}$ prema višim jednočestičnim stanjima, ali uz znatno jače miješanje konfiguracija nego u slučaju gotovo čistih 1p–1h pobuđenja (bez prisustva 2p–2h članova). Iako vodeća protonska konfiguracija $(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$ nosi više od polovice ukupne norme, značajan doprinos dolazi i od neutronske analogne konfiguracije $(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$ te viših $p_{3/2}$ orbitala. Time se prijelazna snaga raspodjeljuje na nekoliko dominantnih 1p–1h komponenti, što ukazuje na početak fragmentacije karakteristične za ovaj dio spektra. Dodatni doprinosi iz $s_{1/2}$ orbitala upućuju na pojačano miješanje ljusaka, osobito između p - i sd -prostora. Dvočestično–dvošupljinske konfiguracije, iako brojne, ukupno doprinose tek nekoliko posto norme te ne preuzimaju vodeću ulogu u strukturi stanja. U usporedbi s pobuđenjima na nešto nižim energijama, nešto su slabije fragmentirana i ovo stanje mješovite prirode predstavlja prijelazni slučaj između gotovo čistog RRPA karaktera

i snažno kolektivnih, višekonzfiguracijskih pobuđenja. Takva struktura potvrđuje da RSSRPA(d) formalizam uspijeva zahvatiti ranu fazu fragmentacije prijelazne snage povezane s pobuđenjima iz orbitale $1p_{3/2}$.

Tablica 6.12: Dominantne 1p–1h i 2p–2h konfiguracije s doprinosima normi za RSRPA(d) 0^+ pobuđeno stanje u ^{16}O na $E_x = 21.28$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.56680
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.15376
$(3p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.05060
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.03761
$(2s_{1/2})^\nu (1s_{1/2})^\nu$	0.02884
$(2s_{1/2})^\pi (1s_{1/2})^\pi$	0.02861
$(4p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.01063
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	2 (0.72056)
U rasponu [0.01 – 0.1]	5 (0.15628)
U rasponu [0.001 – 0.01]	9 (0.03675)
U rasponu [≤ 0.001]	92 (0.00402)
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_v^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_v^0]^0$	0.00949
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00585
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00563
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_v^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_v^2]^0$	0.00308
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^0]^0$	0.00197
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00168
$[(2s_{1/2}, 3s_{1/2})_v^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_v^1]^0$	0.00159
$[(3s_{1/2}, 1d_{5/2})_v^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_v^2]^0$	0.00154
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_v^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_v^0]^0$	0.00152
$[(2s_{1/2}, 4s_{1/2})_\pi^1 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^1]^0$	0.00104
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.001 – 0.01]	10 (0.03339)
U rasponu [≤ 0.001]	7411 (0.04364)

Odgovarajuće stanje onome u RSRPA(d) na 21.28 MeV, u RSSRPA(d) formalizmu nalazi se na energiji $E_x = 22.72$ MeV (vidjeti tablicu 6.13) te predstavlja strukturno očuvano pandan stanje prethodno analiziranog RSRPA(d) pobuđenja s dominantnim protonskim prijelazom $(1p_{3/2})^\pi \rightarrow (2p_{3/2})^\pi$. Mikroskopska struktura ovog stanja i dalje je izrazito koncentrirana u 1p–1h prostoru, pri čemu vodeća protonska konfiguracija $(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$ nosi približno 77.5% ukupne norme. Zajedno s neutronsom analognom konfiguracijom $(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$, koja doprinosi s oko 11.1%, dvije najvažnije komponente obuhvaćaju gotovo 89% ukupne norme. Dodatni doprinosi potječu od pobuđenja u više $p_{3/2}$ orbitale te od prijelaza koji uključuju orbitale $2s_{1/2}$, no njihovi pojedinačni udjeli ostaju ispod 2%. Ukupni doprinos 1p–1h konfiguracija iznosi približno $\mathcal{N}_1 \simeq 96\%$, što potvrđuje da stanje zadržava pretežno jednočestični karakter i nakon uključivanja postupka suptrakcije. Dvočestično–dvošupljinske konfiguracije sudjeluju s ukupno oko $\mathcal{N}_2 \simeq 3.7\%$, pri čemu nijedna pojedinačna 2p–2h komponenta ne prelazi

0.3%. Stoga se može zaključiti da postupak suptrakcije u ovom slučaju ne mijenja kvalitativnu strukturu stanja, već prvenstveno uzrokuje pomak energije pobuđenja uz očuvanje dominantnog protonskog prijelaza $(1p_{3/2})^\pi \rightarrow (2p_{3/2})^\pi$.

Tablica 6.13: Dominantne jednočestično–jednošupljinske (1p–1h) i dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije s doprinosima normi za RSSRPA(d) 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 22.72$ MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$(2p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.77522
$(2p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.11062
$(3p_{3/2})^\nu (1p_{3/2})^\nu$	0.01795
$(3p_{3/2})^\pi (1p_{3/2})^\pi$	0.01706
$(2s_{1/2})^\nu (1s_{1/2})^\nu$	0.01068
Broj 1p–1h konfiguracija:	108
U rasponu [0.1 – 0.9999]	2 (0.88584)
U rasponu [0.01 – 0.1]	3 (0.04568)
U rasponu [0.001 – 0.01]	6 (0.02480)
U rasponu [≤ 0.001]	97 (0.00386)
$[(2s_{1/2}, 2s_{1/2})_\pi^0 (1p_{1/2}, 1p_{1/2})_\pi^0]^0$	0.00228
$[(1d_{5/2}, 1d_{5/2})_\pi^0 (1p_{3/2}, 1p_{3/2})_\pi^0]^0$	0.00211
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_\pi^2 (1p_{1/2}, 1p_{3/2})_\pi^2]^0$	0.00117
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.001 – 0.01]	3 (0.00556)
U rasponu [≤ 0.001]	7418 (0.03176)

6.10 Mikroskopski opis niskoležećih stanja

Nastavno na prethodne mikroskopske analize, ovo potpoglavlje fokusira se na mikroskopski opis niskoležećih stanja u jezgri ^{16}O koja se u okviru RSRPA formalizma pojavljuju kao gotovo čista dvočestično-dvošupljinska pobuđenja. U tablici 6.14 prikazane su dominantne dvočestično-dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije za najniže pobuđeno stanje 0^+ u jezgri ^{16}O , dobiveno RSRPA izračunom na energiji od 3.91 MeV. Rezultati jasno ukazuju na to da je promatrano stanje gotovo u potpunosti opisano 2p–2h konfiguracijama, čiji ukupni doprinos normi stanja premašuje 99%. Najveće težine pripadaju konfiguracijama koje uključuju orbitale $(2s_{1/2}, 1d_{5/2})$ u kombinaciji s protonskim i neutronskim parovima u ljuskama $(1p_{1/2}, 1p_{3/2})$ i $(1p_{3/2}, 1p_{3/2})$, što naglašava snažnu povezanost između sd -ljuske i pobuđenja iz p -ljuske. Četiri dominantne konfiguracije s doprinosima većim od 0.1 zajedno nose oko 72% ukupne norme, čime određuju osnovnu strukturu stanja. Dodatni, ali još uvijek značajni doprinosi potječu od konfiguracija koje uključuju orbitalu $1d_{3/2}$, s pojedinačnim težinama reda veličine nekoliko postotaka. Konfiguracije viših energija, poput onih koje uključuju orbitalu $3d_{3/2}$, doprinose tek na razini promila, ali ukazuju na široku konfiguracijsku raspodjelu. Konfiguracije s udjelima većim od 10^{-3} nose najveći dio norme, dok se uključivanjem preostalih 2p–2h konfiguracija obuhvaća

gotovo cjelokupna norma navedenog niskoležećeg stanja ($N_2 \approx 99.3\%$). Takva raspodjela potvrđuje izrazito 2p–2h obilježje pobuđenog stanja i zanemariv utjecaj 1p–1h komponenti. Ovi rezultati ukazuju na složenu, ali stabilnu konfiguracijsku strukturu.

Tablica 6.14: Dominantne 2p–2h konfiguracije i njihovi doprinosi normi u slučaju RSRPA za pobuđeno 0^+ stanje u ^{16}O na 3.91 MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.21081
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.19066
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.16633
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.14944
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.05352
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.05084
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.04205
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.03940
$[(2s_{1/2}, 3d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.00561
$[(2s_{1/2}, 3d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.00488
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.1 – 0.9999]	4 (0.71724)
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.18581)
U rasponu [0.001 – 0.01]	24 (0.05600)
U rasponu [< 0.001]	7358 (0.03443)

U tablici 6.15 prikazana je mikroskopska struktura pandana prethodno analiziranog stanja, izračunata primjenom RSSRPA formalizma, odnosno uz uključenu metodu suptrakcije. Usporedbom ovih rezultata s onima iz tablice 6.14 (dobivenih bez metode suptrakcije), uočava se da osnovna konfiguracijska struktura pobuđenog stanja na energiji 3.97 MeV, ostaje kvalitativno nepromijenjena unatoč promjeni teorijskog pristupa. U oba slučaja dominiraju iste četiri konfiguracije tipa $(2s_{1/2}, 1d_{5/2})$ u kombinaciji s parovima $(1p_{1/2}, 1p_{3/2})$ i $(1p_{3/2}, 1p_{3/2})$, pri čemu se njihovi udjeli u normi razlikuju tek marginalno, na razini nekoliko promila. Također, doprinosi konfiguracija koje uključuju orbitalu $1d_{3/2}$ zadržavaju sličan poredak i udio u normi, bez pojave novih dominantnih komponenti. Statistika po rasponima potvrđuje da konfiguracije s doprinosima većim od 0.1 i dalje nose otprilike 70% ukupne norme, dok se raspodjela preostalog doprinosa po nižim rasponima praktički ne mijenja. Ovakva stabilnost raspodjele upućuje na to da primjena suptrakcije na niskoležećem 0^+ stanju ne dovodi do reorganizacije konfiguracijskog prostora, već samo do blage promjene pojedinih amplituda X i Y . Stoga se može zaključiti da je struktura stanja robusna u odnosu na razmatrane varijacije modela (sa i bez suptrakcije) te da se njegova interpretacija kao izrazito 2p–2h pobuđenog stanja zadržava bez kvalitativnih promjena.

Tablica 6.15: Dominantne 2p–2h konfiguracije i njihovi doprinosi normi u slučaju RSSRPA za pobuđeno 0^+ stanje u ^{16}O na 3.97 MeV.

Konfiguracija	Udio u normi
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.20976
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.18938
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.16700
$[(2s_{1/2}, 1d_{5/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.14997
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.05502
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.05229
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.04270
$[(2s_{1/2}, 1d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{3/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.03995
$[(2s_{1/2}, 3d_{3/2})_{\pi}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\pi}^2]^0$	0.00574
$[(2s_{1/2}, 3d_{3/2})_{\nu}^2(1p_{1/2}, 1p_{3/2})_{\nu}^2]^0$	0.00501
Broj 2p–2h konfiguracija:	7421
U rasponu [0.1 – 0.9999]	4 (0.71612)
U rasponu [0.01 – 0.1]	4 (0.18997)
U rasponu [0.001 – 0.01]	24 (0.05704)
U rasponu [< 0.001]	7389 (0.03403)

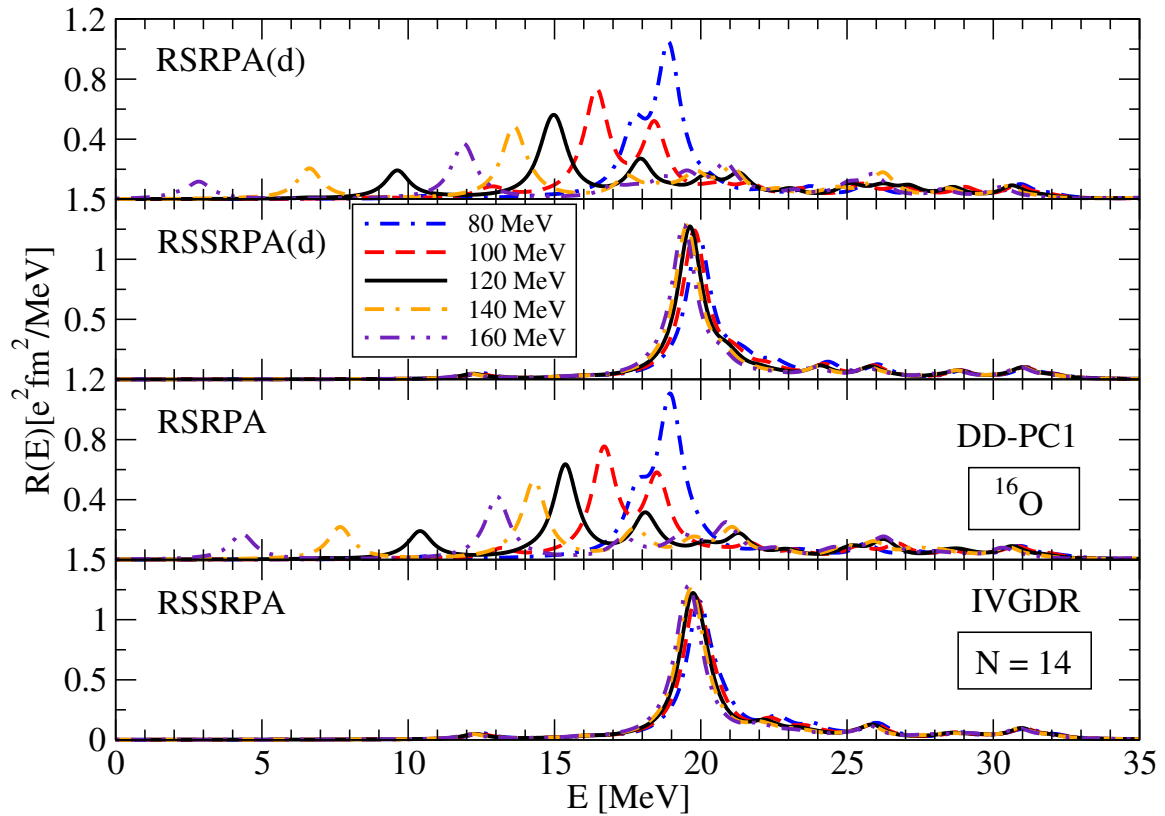
6.11 Raspodjela prijelazne snage za IVGDR

U ovom potpoglavlju predstavljani su rezultati za izovektorsku gigantsku dipolnu rezonanciju (IVGDR) u ^{16}O , izračunatu unutar nekoliko varijanti RSRPA metode. Energije jednočestičnih stanja u osnovnom stanju, zajedno s gornjim i donjim komponentama Diracovih spinora, dobivene su u relativističkoj Hartree aproksimaciji rješavanjem Diracove jednadžbe u bazi sferičnog harmoničkog oscilatora [66]. Za ovu analizu uključene su ljuske oscilatora do glavnih kvantnih brojeva $N = 14$ i $N = 20$. Veličina konfiguracijskog prostora odabrana je tako da osigura razuman kompromis između točnosti konvergencije i računalnih zahtjeva, a njezin utjecaj na dobivene središnje energije detaljno je raspravljen u sljedećim potpoglavljima. Energijski odsječak isti je kao i u slučaju GMR-a i GQR-a, odnosno neperturbirane 1p–1h prijelazne energije razmatrane su do 200 MeV, dok su 1α –1h konfiguracije koje uključuju prijelaze u negativno-energijska stanja Diracovog mora uključene do 2000 MeV. Za 2p–2h konfiguracije, energijski odsječak E_{cutoff} sustavno se mijenja kako bi se ispitao njezin utjecaj na fragmentaciju i energijske momente IVGDR-a unutar proširenog konfiguracijskog prostora.

6.11.1 Slučaj $N = 14$

Slika 6.11 prikazuje raspodjelu prijelazne snage u slučaju IVGDR za ^{16}O ugađenu lorentz-
janom širine 1 MeV za četiri varijante RSRPA, odnosno dijagonalnog i potpunog oblika, bez i s primjenom metode suptrakcije. U slučaju RSRPA(d) i RSRPA dolazi do snažne fragmentacije

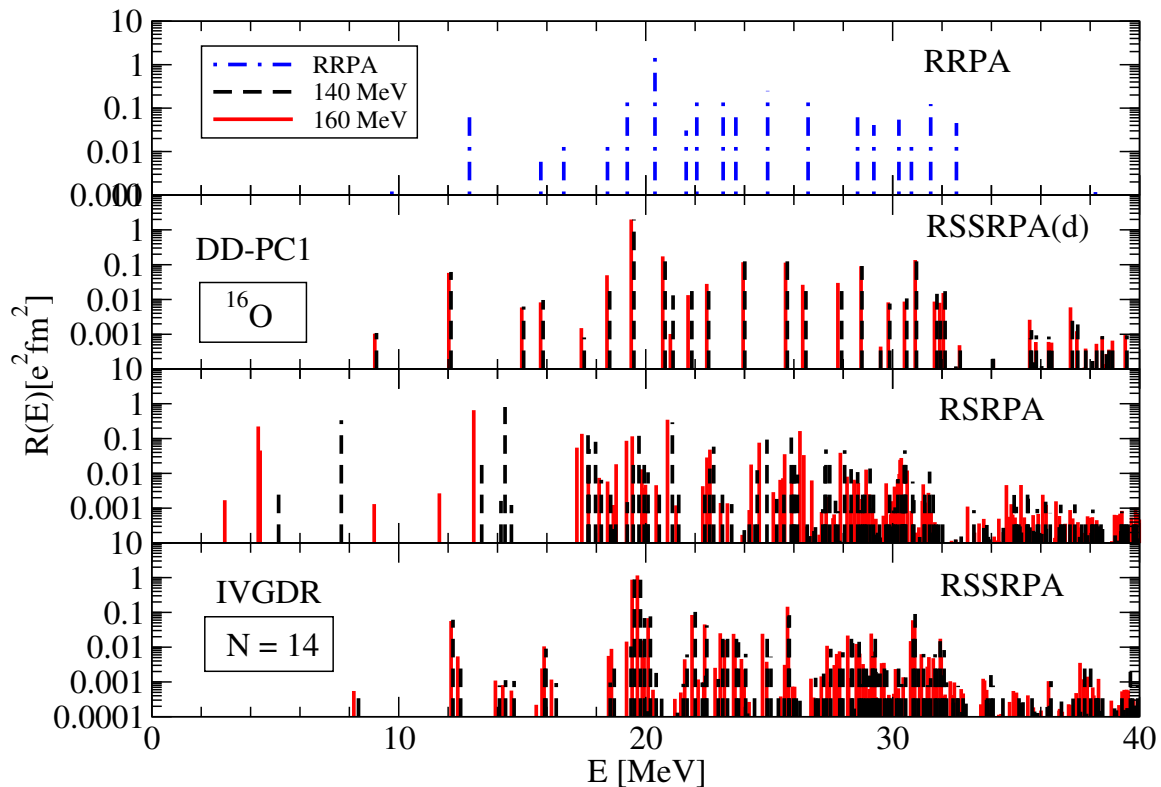
i pomicanja energijskog spektra prema nižim energijama s povećanjem energijskog odsječka. Pored spomenutog, s uključivanjem većeg broja 2p–2h konfiguracija najprije dolazi do raspada jednog dominantnog vrha na dva ($E_{\text{cutoff}} \approx 80$ MeV), dok na energijama $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 120$ MeV dolazi i do sve snažnijeg razdvajanja dva susjedna dominantna vrha. S druge strane, energijski spektar dobiven pomoću RSSRPA(d) i RSSRPA je okarakteriziran umjerenim pomicanjem spektra prema nižim energijama koji se stabilizira na energijama odsječka 2p–2h konfiguracija većim od 120 MeV.



Slika 6.11: Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 14$.

Slika 6.12 prikazuje diskretnu raspodjelu prijelazne snage IVGDR-a dobivenu u okviru RRP, RSSRPA(d), RSRPA i potpunog RSSRPA formalizma. Za prikazane energijske odsječke RSRPA spektar pokazuje izraženu fragmentaciju i značajno pomicanje položaja svojstvenih vrijednosti prema nižim energijama pobuđenja. Pri tome se osobito ističe da se stanja koja su u RRP imala najniže energije (ispod 25 MeV), uključivanjem 2p–2h konfiguracija pomiču najviše, u nekim slučajevima i do desetak MeV. Suprotno tome, primjena suptrakcijske metode osigurava stabilnost spektra i konvergentno ponašanje položaja stanja, pri čemu se u dijagonalnoj aproksimaciji pojavljuje manji broj diskretnih stanja u usporedbi s potpunim RSSRPA formalizmom. Neovisno o odabranoj varijanti, uočava se pomicanje predominantno 1p–1h i miješanih stanja u odnosu na ona dobivena pomoću RRP, no ta su pomicanja ograničena na približno 1 MeV. Potpuniji opis spektra pruža RSSRPA, budući da uključuje veći broj 2p–2h stanja koja se pojavljuju između spomenutih stanja, a koja, zajedno s Landauovim gušenjem prisutnim već

na standardnoj RRPAA razini, doprinose realističnoj širini rezonancije povezanoj s miješanjem s 2p–2h konfiguracijama (širini raspršenja).

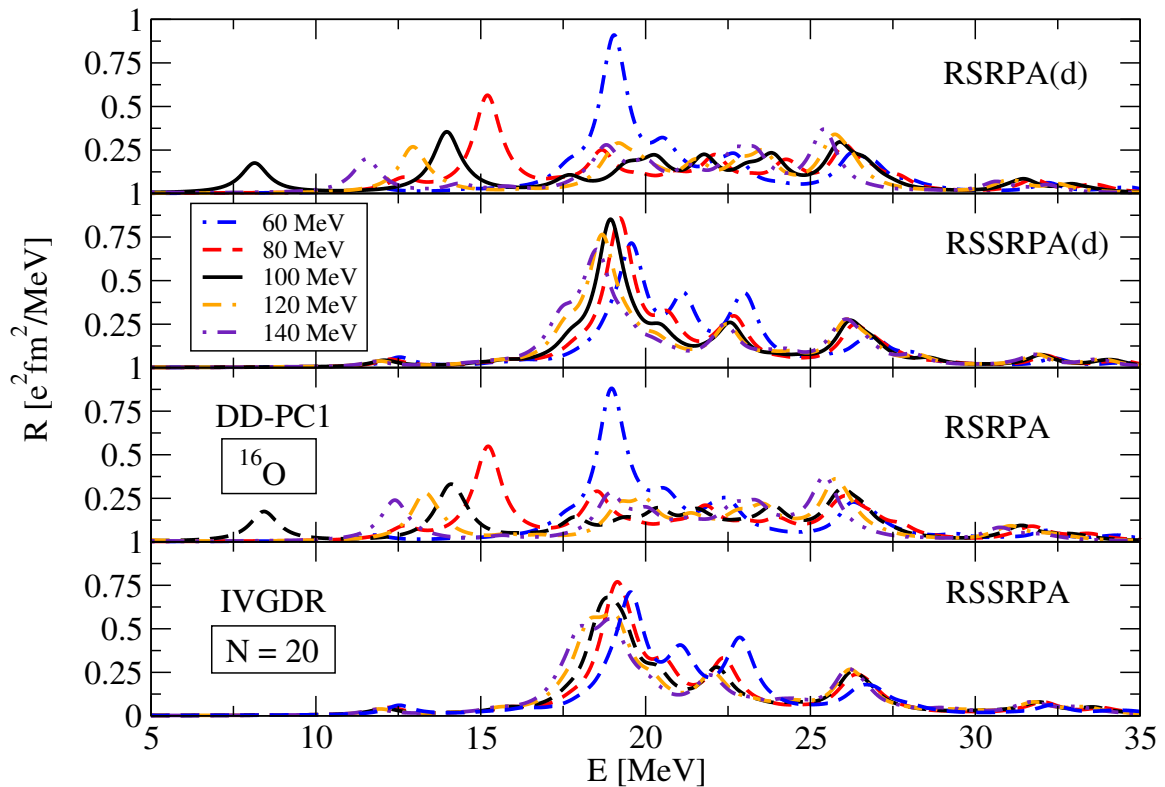


Slika 6.12: Isto kao na slici 6.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 14$.

6.11.2 Slučaj $N = 20$

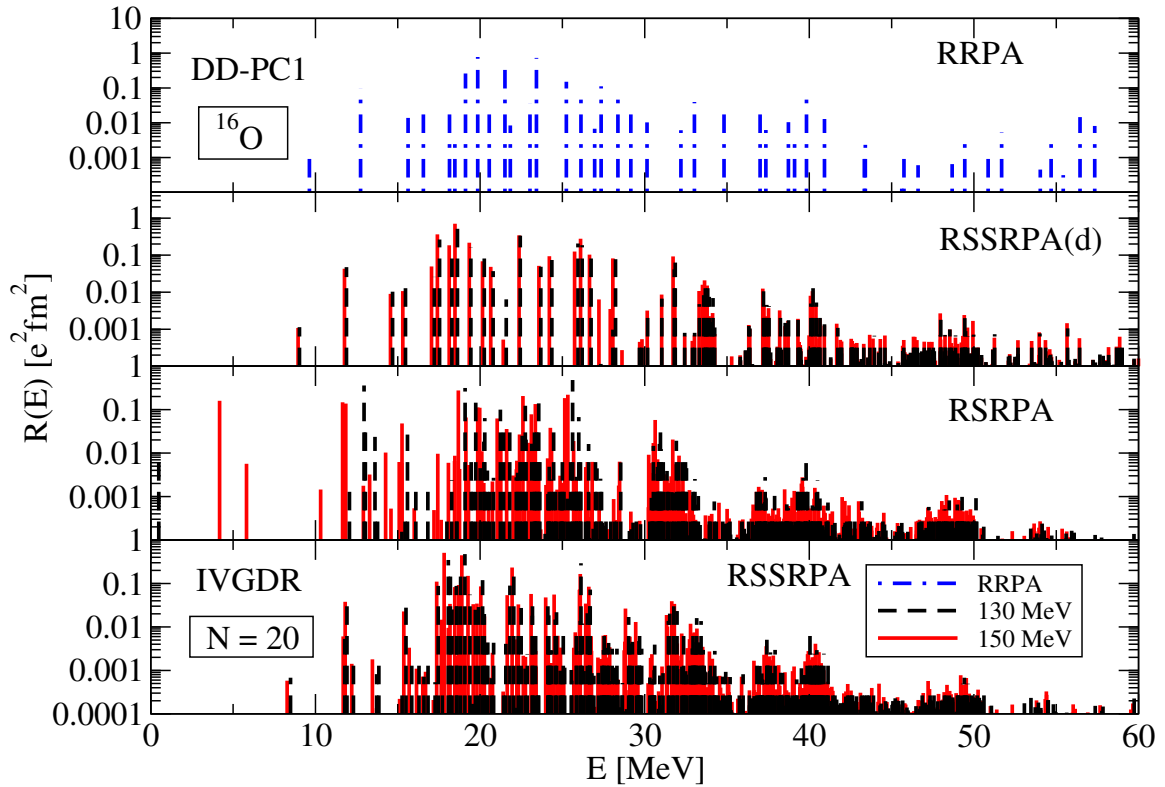
Slika 6.13 prikazuje raspodjelu prijelazne snage u slučaju izovektorske gigantske dipolne rezonancije (IVGDR) za jezgru ^{16}O , izračunatu uz primjenu glavnog kvantnog broja $N = 20$. Spektar je uglađen lorentzijanom širine 1 MeV za četiri varijante RSRPA modela kao i u prethodnom potpoglavlju. Povećanje konfiguracijskog prostora rezultira znatno bogatijom spektralnom gustoćom i izraženijom finom strukturom u usporedbi s prethodno analiziranim slučajevima za $N = 14$. U varijantama RSRPA(d) i RSRPA, uključivanje većeg broja 2p–2h konfiguracija uzrokuje izraženiju fragmentaciju prijelazne snage te sustavno i snažno pomicanje energijskog spektra prema nižim energijama s porastom energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija. Dok je pri manjim vrijednostima glavnog kvantnog broja dominirao proces razdvajanja jednog vrha na dva, odnosno tri vrha, u ovom slučaju veća gustoća stanja dovodi do formiranja složenije strukture već pri $E_{\text{cutoff}} \approx 80$ MeV. Pri energijama $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 120$ MeV, dolazi do djelomične redistribucije snage u područje ispod $E \lesssim 15$ MeV. S druge strane, energijski spektri dobiveni primjenom metode suptrakcije, odnosno pomoću RSSRPA(d) i RSSRPA, pokazuju

visoku razinu numeričke stabilnosti unatoč znatno većem broju dostupnih konfiguracija. Iako je spektar karakteriziran većim brojem vrhova i bogatijom dinamikom nego u slučaju izračuna s $N = 14$, primjena metode suptrakcije uspješno kompenzira umjetno snižavanje energija izazvano proširenjem oscilatorske baze modela. Položaj glavnog područja rezonancije razumno konvergira i stabilizira se za vrijednosti energijskog odsječka iznad 120 MeV, čime se potvrđuje relevantnost postupka suptrakcije i njegova vrlo slaba ovisnost o dimenziji konfiguracijskog prostora.



Slika 6.13: Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 20$.

Na slici 6.14 analizirana je diskretna raspodjela prijelazne snage IVGDR-a unutar različitih teorijskih pristupa, pri čemu proširenje oscilatorske baze na glavni kvantni broj $N = 20$ rezultira znatno gušćim i bogatijim spektrom stanja nego za $N = 14$ slučaj obrađen ranije. Povećanje broja dostupnih konfiguracija dovodi do još intenzivnije fragmentacije, naročito kod RSRPA spektra gdje se uočava znatniji pomak energijskih stanja prema niže. Slično kao i prije, primjena suptrakcijske metode (RSSRPA) ključna je za očuvanje stabilnosti i konvergencije rješenja unatoč povećanoj kompleksnosti sustava, dok potpuni formalizam, u usporedbi s dijagonalnom aproksimacijom, generira dodatni broj 2p–2h stanja koja imaju nezanemariv doprinos u prijelaznoj snazi ($R \gtrsim 10^{-4} \text{ e}^2 \text{ fm}^4$). Iako se dominantno 1p–1h i miješana stanja u svim varijantama stabilno pomiču za oko 1 MeV u odnosu na polazna RRPA rješenja, upravo ta dodatna gustoća stanja kod RSSRPA omogućuje detaljniji opis razmatranih pobuđenja.



Slika 6.14: Isto kao na slici 6.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 20$.

6.12 Energijski momenti, centroid energije, širina raspodjele i iscrpljenost sumacijskog pravila za IVGDR

Tablica 6.16 prikazuje karakteristične energije za IVGDR u jezgri ^{16}O izračunate iz energijskih momenata prijelazne snage (vidjeti poglavlje 4.9) dobivene u RSSRPA formalizmu, pri čemu je razmatran isključivo pozitivni dio energijskog spektra koji uključuje svojstvene vrijednosti do $E \leq 130$ MeV. Energijski odsječak 2p–2h konfiguracija zadržan je na $E_{\text{cutoff}} = 140$ MeV, čime se osigurava konzistentan opis visokoenergijskih korelacija unutar proširenog konfiguraacijskog prostora. Rezultati su prikazani za dva različita prostora stanja, odnosno glavne kvantne brojeve $N = 14$ i $N = 20$, u dijagonalnom i punom obliku RSSRPA. Razlike između RSSRPA(d) i punog RSSRPA formalizma postaju izraženije, osobito u višim momentima, što ukazuje na važnu ulogu nedijagonalnih korelacija u redistribuciji snage na velikim energijama.

Centroid energije, definiran omjerom momenata m_1/m_0 , u IVGDR poprima vrijednost od 24.6 MeV u slučaju RSSRPA za bazu $N = 20$. Položaj centroida nalazi se neznatno iznad ranije razmatranog djelomičnog eksperimentalnog konsenzusa (vidjeti poglavlje 2.4.2), koji se za ovu jezgru kreće u rasponu od 23.4 do 23.9 MeV. Ovo odstupanje odražava činjenicu da je m_1/m_0 izrazito osjetljiv na visokoenergijski rep spektra, koji u stvarnim eksperimentalnim uvjetima nije izmjeran. Najizraženiji efekt visokoenergijskih doprinosa očituje se u omjeru momenata $\sqrt{m_3/m_1}$, koji poprima znatno veće vrijednosti i pokazuje snažnu ovisnost o aproksimaciji i

veličini baze. To potvrđuje da su omjeri koji uključuju više momente posebno osjetljivi na doprinose prijelazne snage RSSRPA spektra na višim energijama.

Izuzme li se iz razmatranja omjer $\sqrt{m_3/m_1}$, varijacije ostalih karakterističnih energija pri proširenju baze postaju gotovo zanemarive. Relativni pomaci za $N = 20$ od svega 0.4% do 0.5% u odnosu na $N = 14$ slučaj za omjere $\sqrt{m_1/m_{-1}}$ i m_1/m_0 sugeriraju da su ove vrijednosti, primarno osjetljive na položaj glavnog rezonantnog vrha, postigle numeričku konvergenciju već pri bazi $N = 14$. To ukazuje na to da daljnje povećanje konfiguracijskog prostora ne donosi značajne promjene u opisu globalnih svojstava rezonancije, već primarno utječe na finu strukturu spektra pobuđenja, što se vidi iz analize raspodjele prijelazne snage opisane u prothodnom poglavlju. Iako nije eksplicitno prikazano u tablici, iscrpljenost TRK sumacijskog pravila u slučaju IVGDR-a za bazu $N = 20$ iznosi 126.9% u RRPA i 128.8% u RSSRPA(d), dok je u slučaju RSSRPA vrijednost povećana za približno 28% u odnosu na RRPA izračun. Takvo pojačanje pokazuje da međudjelovanje između 2p–2h konfiguracija ima značajan učinak na redistribuciju izovektorske dipolne snage i povećanje ukupne iscrpljenosti TRK sumacijskog pravila.

Tablica 6.16: Karakteristične energije za IVGDR u ^{16}O za energijski odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 140$ MeV za pozitivni dio energijskog spektra, za glavne kvantne brojeve $N = 14$ i $N = 20$.

	$N = 14$		$N = 20$	
	RSSRPA(d)	RSSRPA	RSSRPA(d)	RSSRPA
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	23.424	23.141	23.329	23.100
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	45.263	42.400	43.075	40.077
m_1/m_0 [MeV]	25.236	24.694	25.005	24.564

Prethodni se rezultati prvenstveno koriste kao dijagnostički alat za analizu strukture proširenog (pozitivnog) dijela spektra, dok se za izravnu usporedbu s eksperimentom preferiraju momenti izračunati unutar eksperimentalno relevantnog energijskog intervala, koji je odabran kao i u ranijim poglavljima. Tablica 6.17 prikazuje karakteristične energije za IVGDR u jezgri ^{16}O dobivene u RSSRPA formalizmu, ali unutar energijskog prozora 11–40 MeV. Rezultati su također prikazani za dvije različite oscilatorske baze, odnosno za glavne kvantne brojeve $N = 14$ i $N = 20$, te za dijagonalni i puni RSSRPA formalizam. Time se omogućuje procjena stabilnosti karakterističnih energija s obzirom na veličinu baze i uključenost rezidualnog međudjelovanja između 2p–2h parova. Centroidi energije pokazuju sustavan, ali umjeren porast s povećanjem glavnog kvantnog broja s $N = 14$ na $N = 20$ (pomak za oko 0.6 MeV prema višim energijama), kao i blago povećanje pri prelasku s dijagonalne aproksimacije na puni RSSRPA izračun (približno 140 keV za $N = 14$ i oko 200 keV za $N = 20$). Za najveći promatrani prostor ($N = 20$) dobivena vrijednost $m_1/m_0 = 21.88$ MeV pokazuje visoko slaganje s ranijim eksperimentalnim rezultatima (vidjeti tablicu 2.1), posebice onima Burgova *et al.* iz 1963. godine [2], koji su ukazivali na nešto niži položaj rezonancije u usporedbi s modernim fotoapsorpcijskim mjerenjima.

Ovakvo slaganje unutar ograničenog energijskog intervala (11–40 MeV) dodatno potvrđuje tezu da su niže vrijednosti centroida u starijim eksperimentima bile uvjetovane upravo limitiranim energijskim dosegom tadašnjih mjerenja. Iako nije eksplicitno navedeno u tablici, RRPA u promatranom energijskom prozoru daje centroid energije 22.304 MeV za $N = 14$, odnosno 22.557 MeV za $N = 20$. Drugim riječima, uključivanje 2p–2h konfiguracija manifestira se u pomicanju položaja centroida prema nižim energijama za 0.7–1 MeV u odnosu na RRPA.

Tablica 6.17: Slično kao u tablici 6.16, ali izračunato unutar energijskog prozora 11–40 MeV.

	$N = 14$		$N = 20$	
	RSSRPA(d)	RSSRPA	RSSRPA(d)	RSSRPA
$\sqrt{m_1/m_{-1}}$ [MeV]	20.876	21.009	21.286	21.394
$\sqrt{m_3/m_1}$ [MeV]	22.331	22.471	23.404	23.609
m_1/m_0 [MeV]	21.183	21.318	21.753	21.877
Γ [MeV]	3.904	3.924	4.804	4.925
EWSR [%]	103.4	106.3	109.7	111.5

Širina rezonancije Γ pokazuje znatniju ovisnost o veličini baze te blago raste unutar punog RSSRPA formalizma, no i dalje ostaje niža od eksperimentalno utvrđenih vrijednosti koje se, prema radovima Ahrensa [8] i Bezića [6], kreću u rasponu od 5.4 do 5.5 MeV. Sve dostupne eksperimentalne vrijednosti, uključujući i one koje su već ranije spomenute, objedinjene su i prikazane u tablici 2.1. To upućuje na činjenicu da, iako uključivanje 2p–2h korelacija u RSSRPA formalizmu dovodi do povećanja fragmentacije i prigušenja rezonancije, za cjelovit opis eksperimentalnih podataka nužno je eksplicitno uzeti u obzir i širinu bijega ($\Gamma^\uparrow$). Naime, kod lakih sustava poput ^{16}O , vezanje na kontinuum i izravna emisija nukleona predstavljaju važan mehanizam širenja koji, uz konfiguracije višeg reda (3p–3h), mogu imati nezanemarlivu ulogu u potpunom opisu eksperimentalne širine IVGDR-a u ^{16}O .

Udio iscrpljenog energijski ponderiranog sumacijskog pravila (EWSR) unutar promatranog energijskog prozora iznosi između približno 103% i 112%, ovisno o veličini baze i odabranoj aproksimaciji. Navedeni rezultati su u dobrom su slaganju s eksperimentalnim procjenama koje se kreću u granicama od 98% do 102% (vidjeti tablicu 2.1), što potvrđuje da se glavnina IVGDR snage u ^{16}O doista nalazi unutar analiziranog intervala. Vrijednosti veće od 100% odražavaju poznato TRK-pojačanje (engl. *TRK-enhancement*), kao i činjenicu da se glavnina IVGDR snage u ^{16}O nalazi unutar promatranog energijskog intervala, dok nekoliko desetaka posto odnose pobuđenja na višim energijama.

6.13 *Spuriozno stanje u slučaju GDR*

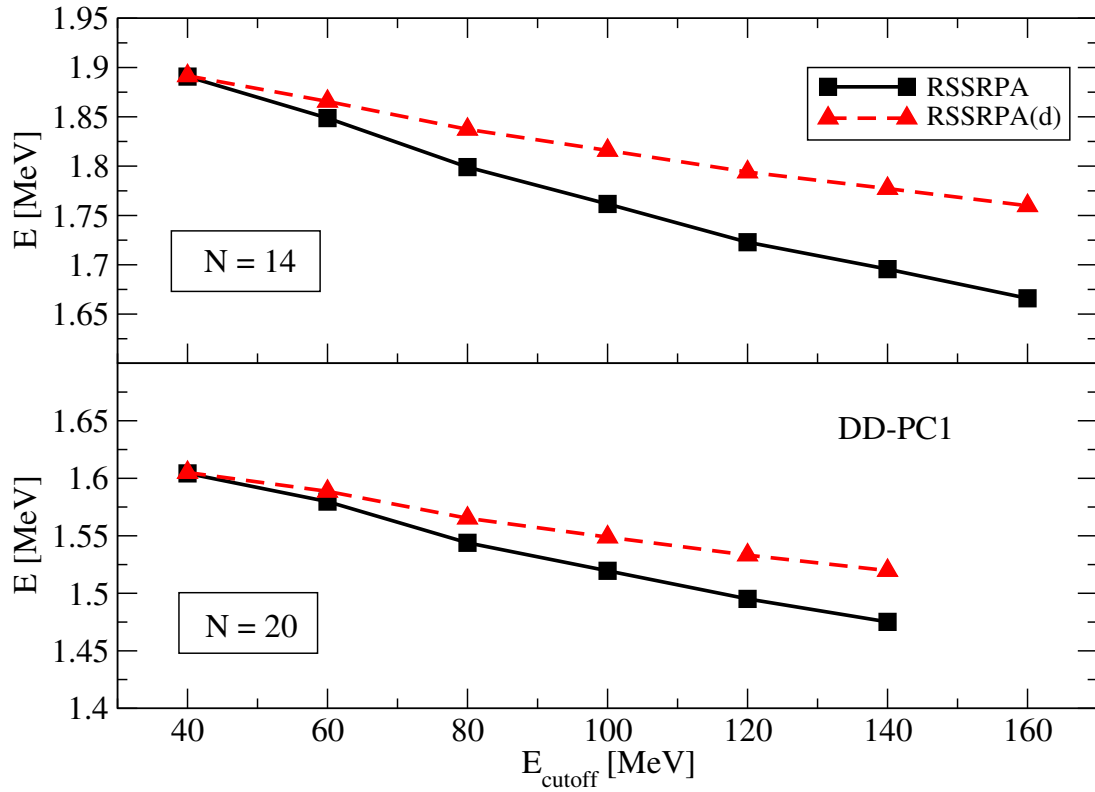
Opis dipolnih pobuđenja ($\Delta L = 1$) u okviru RPA i njezinih proširenja (RSRPA i RSSRPA), neraskidivo je povezan s problemom narušenja translacijske invarijantnosti. Budući da se nuk-

learní potencijal fiksira u laboratorijskom sustavu, dolazi do pojave nefizikalnog moda gibanja koji odgovara translaciji cijele jezgre kao krutog tijela, odnosno tzv. spurioznog stanja [74]. Kako je detaljno opisano u teorijskom dijelu rada (vidjeti poglavlje 2.4.2), ISGDR operator (izraz (2.10)) po definiciji uključuje korekcijski član višeg reda kako bi se osigurala ortogonalnost na nefizikalno gibanje središta mase. U sustavima poput ^{16}O , svako miješanje spuriozne komponente s niskoležećim ili rezonantnim dipolnim stanjima može dovesti do pogrešne interpretacije fragmentacije GDR-a i precijenjivanja prijelazne snage na niskim energijama. Stoga se u nastavku detaljno analizira separacija spurioznog moda, uz promatranje evolucije njegova položaja pri povećanju dvočestično-dvošupljinskog konfiguracijskog prostora.

Na slici 6.15 prikazano je ponašanje spurioznog stanja u izoskalarnom kanalu gigantske dipolne rezonancije (ISGDR) u okviru RSSRPA i njezine dijagonalne varijante RSSRPA(d). Prikazana je ovisnost energije spurioznog stanja o energijskom odsječku E_{cutoff} 2p–2h konfiguracijskog prostora, za dvije vrijednosti glavnog kvantnog broja ($N = 14$ i $N = 20$), za DD-PC1 parametrizaciju relativističkog energijskog funkcionala gustoće. U idealno samosuglasnom i translacijski invarijantnom formalizmu spuriozno stanje, povezano s narušenjem translacijske simetrije na razini srednjeg polja, trebalo bi se pojaviti na nultoj energiji i biti potpuno odvojeno od fizičkog spektra. Međutim, zbog konačnosti konfiguracijskog prostora i numeričkih aproksimacija, u stvarnim izračunima ono se pojavljuje na niskim energijama. U nerelativističkim SSRPA izračunima, ovisno o primijenjenoj parametrizaciji, to se nefizikalno stanje nalazi na energijama od 3.5 MeV za SGII, odnosno 3.7 MeV u slučaju SLy4 parametrizacije [115].

U punoj RSSRPA aproksimaciji uočava se izražena ovisnost energije spurioznog stanja o veličini 2p–2h prostora, pri čemu njegova energija monotono opada s porastom E_{cutoff} . Takvo ponašanje upućuje na postupno vraćanje translacijske simetrije kako se uključuje sve veći broj 2p–2h korelacija. S druge strane, u dijagonalnoj aproksimaciji RSSRPA(d), u kojoj je matrica A_{22} reducirana na dijagonalni oblik s elementima jednakim razlikama jednočestičnih energija, pad energije spurioznog stanja znatno je sporiji. Time se jasno pokazuje da zanemarivanje nedijagonalnih elemenata u 2p–2h sektoru narušava mehanizam kolektivnog poništavanja spuriozne komponente.

Dodatno, usporedba rezultata za $N = 14$ i $N = 20$ pokazuje da proširenje 2p–2h prostora sustavno snižava energiju spurioznog stanja u obje aproksimacije, no razlika između RSSRPA i RSSRPA(d) ostaje jasno izražena. Ovaj rezultat potvrđuje da je puni oblik, odnosno međudjelovanje među 2p–2h konfiguracijama ključno za ispravno razdvajanje spurioznih i fizičkih dipolnih pobuđenja u relativističkom formalizmu.

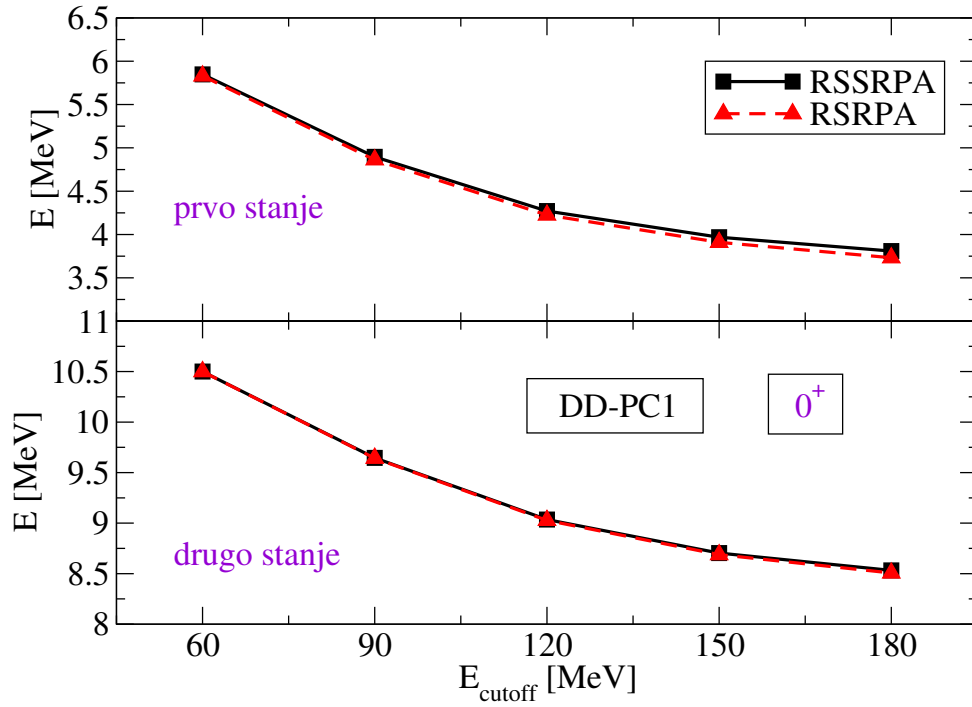


Slika 6.15: Evolucija spurioznog stanja za RSSRPA i RSSRPA(d) za ISGDR u jezgri ^{16}O , prikazana za dvije baze harmoničkog oscilatora, $N = 14$ i $N = 20$.

6.14 Evolucija niskoležećih stanja u slučaju GMR-a i GQR-a

Na slici 6.16 prikazana je evolucija položaja prva dva niskoležeća stanja u energijskom spektru jezgre ^{16}O za slučaj 0^+ prijelaza za energijske odsječke 2p–2h konfiguracija od 60 do 180 MeV. Energija prvog niskoležećeg stanja sustavno opada s povećanjem energijskog odsječka E_{cutoff} . Pri promjeni odsječka sa 60 na 180 MeV, položaj stanja se pomiče s 5.83 MeV na 3.73 MeV u RSRPA formalizmu, odnosno s 5.85 MeV na 3.81 MeV u RSSRPA izračunu. Pritom se energijski pomak pobuđenog stanja (ΔE_x) drastično smanjuje s povećanjem konfiguracijskog prostora. Dok pri promjeni E_{cutoff} sa 60 na 90 MeV ona iznosi oko 1 MeV u oba slučaja, u području između 150 i 180 MeV taj se pomak stabilizira na svega 170 keV za RSRPA, odnosno 160 keV za RSSRPA. Snaga prvog niskoležećeg stanja za RSSRPA iznosi 0.11 fm^4 ($E_{\text{cutoff}} = 150 \text{ MeV}$) i dvostruko je manja od eksperimentalne vrijednosti od 0.23 fm^4 [234]. S druge strane teorijska predviđanja nerelativističke SSRPA za Skyrme međudjelovanje daje red veličine veću snagu od 3.66 fm^4 [119]. Usporede li se položaji u energijskom spektru za vrijednost 2p–2h energijskog odsječka $E_{\text{cutoff}} = 60 \text{ MeV}$, onda u slučaju Skyrme međudjelovanja imamo $\approx 6.1 \text{ MeV}$ [119], dok je za RSSRPA dobivena vrijednost od 5.85 MeV. Za mikroskopski opis strukture najnižeg 0^+ stanja u RSRPA i RSSRPA potrebno je pogledati poglavlje 6.10.

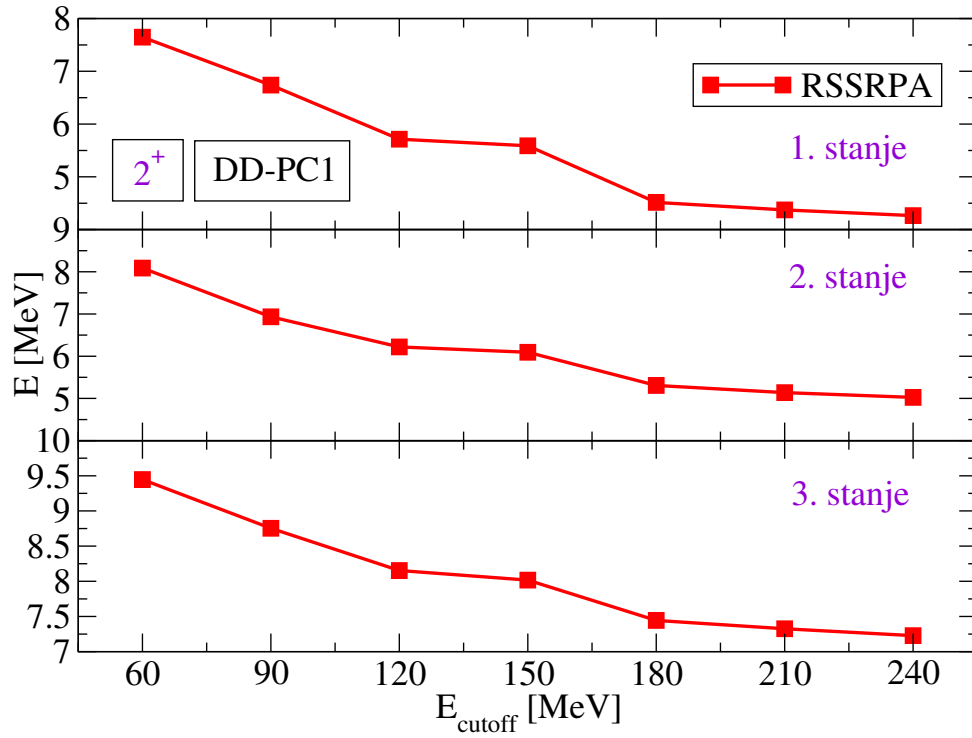
Za drugo niskoležeće stanje uočava se slična ovisnost energije pobuđenja o energijskom



Slika 6.16: Evolucija položaja prva dva niskoležeća stanja 2p–2h prirode s porastom energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija za 0^+ pobuđenja u ^{16}O .

odsječku 2p–2h konfiguracija kao i za prvo stanje (vidjeti sliku 6.16). Pri najmanjem razmatranom odsječku, $E_{\text{cutoff}} = 60$ MeV, položaj stanja u RSRPA i RSSRPA formalizmu gotovo je jednak i iznosi približno 10.50 MeV, što pokazuje da suptrakcijski postupak na nižim energijama odsječka 2p–2h konfiguracija ne utječe značajno na ovo niskoležeće 0^+ stanje. Povećanjem odsječka energija se sustavno snižava te za $E_{\text{cutoff}} = 180$ MeV iznosi 8.50 MeV u RSRPA, odnosno 8.53 MeV u RSSRPA formalizmu. Razlika između navedenih rezultata iznosi svega nekoliko desetaka keV. Najizraženiji pomak javlja se pri povećanju odsječka sa 60 na 90 MeV, gdje se energija pobuđenja smanjuje za približno 700 keV u oba formalizma. Za veće vrijednosti E_{cutoff} pomaci se postupno smanjuju te pri prijelazu sa 150 na 180 MeV iznose oko 180 keV u RSRPA i oko 170 keV u RSSRPA formalizmu. Slično kao i kod najnižeg 0^+ stanja, takav trend upućuje na konvergenciju položaja stanja s povećanjem 2p–2h konfiguracijskog prostora, pri čemu suptrakcija ne mijenja osnovno ponašanje, nego tek neznatno korigira konačnu energiju.

Prva tri niskoležeća stanja 2^+ prijelaza u jezgri ^{16}O prikazana su na slici 6.17. Iako eksplicitno nije prikazivan konfiguracijskih sastav navedenih stanja, slično kao i najniža 0^+ stanja, ona su karakterizirana 2p–2h prirodom s $\mathcal{N}_2 \approx 0.99$. Analiza ukazuje na izraženu ovisnost RSSRPA rezultata o energijskom odsječku, uz napomenu da se konvergencija proračuna postiže pri vrijednostima $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 180$ MeV. Položaj prvog 2p–2h stanja pomiče se s 7.64 MeV za $E_{\text{cutoff}} = 60$ MeV na 4.27 MeV za $E_{\text{cutoff}} = 240$ MeV. Energijska razlika između prvog pobuđenog stanja 0^+ i stanja 2^+ u ovom modelu iznosi 0.46 MeV, što donekle odstupa od eksperimentalno utvrđenog razmaka od 0.87 MeV [234]. Međutim, ključna razlika proizlazi iz činjenice da se odgovarajuća



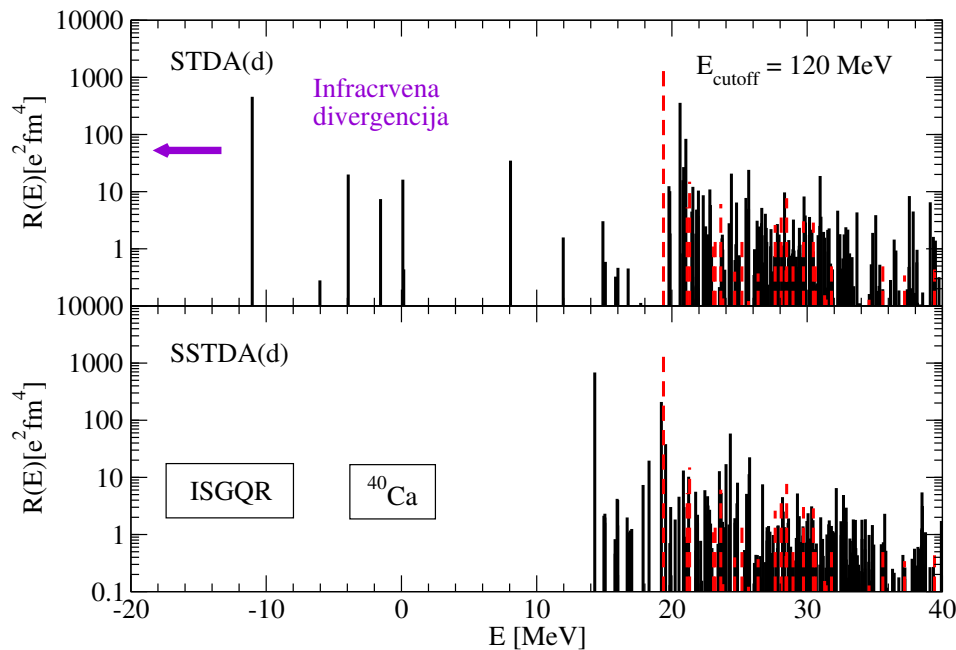
Slika 6.17: Evolucija položaja prva tri niskoležeća stanja 2p–2h prirode s porastom energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija za 2^+ prijelaze u RSSRPA računu za ^{16}O .

niskoležeća stanja ne mogu reproducirati bez primjene postupka suptrakcije, čak ni kada se koristi dijagonalna aproksimacija sa i bez navedenog postupka. Drugim riječima, sama prisutnost 2p–2h konfiguracija nije dovoljna za pojavu tih niskoležećih stanja te je nužno uključiti dvočestično rezidualno međudjelovanje unutar 2p–2h prostora u dijagonalnim i nedijagonalnim elementima bloka A_{22} , koje omogućuje njihovo međusobno miješanje i pomak kolektivnih rješenja prema nižim energijama. Pritom treba uzeti u obzir razliku u definiciji dijagonalne aproksimacije u ovoj disertaciji u odnosu na onu kakva je navedena u nerelativističkim SSRPA modelima (za detalje pogledati radove [117, 119] ili poglavlje s teorijskim opisom 4.8 i rezultatima 6.1). Drugo i treće pobuđeno 2^+ stanje također pokazuju snažnu osjetljivost na proširenje konfiguracijskog prostora. Za $E_{\text{cutoff}} = 60$ MeV njihove energije iznose 8.09 MeV i 9.45 MeV, dok se s daljnjim povećanjem granične energije značajno spuštaju na 5.02, odnosno 7.23 MeV. Daljnjim proširenjem prostora energije se stabiliziraju te za $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 180$ MeV pokazuju dobru konvergenciju. Ovakvo ponašanje ukazuje na to da su dominantne korelacije relevantne za opis ovih 2^+ pobuđenja učinkovito uključene već pri srednjim vrijednostima E_{cutoff} , dok dodatne konfiguracije dobivene pri većim energijama 2p–2h odsječka imaju zanemariv utjecaj na položaj stanja.

7 USPOREDNA ANALIZA I DISKUSIJA

7.1 Usporedba energijskih spektara

U okviru standardnih RSTDA i RSRPA pristupa, bez primjene suptrakcijske metode, nije moguće postići numeričku konvergenciju energijskog spektra pri povećanju energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija. Ni za jedan od analiziranih modova, odnosno ISGMR, IVGMR, IVGDR, ISGQR ni IVGQR, svojstvene vrijednosti energija pobuđenja, a samim time ni fragmentacija snage i položaj centroida ne stabiliziraju se pri povećanju energijske granice 2p–2h konfiguracija. Umjesto toga, dolazi do sustavnog spuštanja snage prema nižim energijama, što ukazuje na narušenu konzistenciju modela. Takvo ponašanje posljedica je dvostrukog brojanja korelacija (engl. *double counting*) i gubitka samosuglasnosti između osnovnog stanja i pobuđenih modova, čime se narušava fizikalna interpretacija rezultata. U slučaju RSTDA, infracrvena divergencija [146, 224] manifestira se kao sustavno spuštanje svojstvenih energija prema nuli, pri čemu za nešto veće vrijednosti 2p–2h energijskog odsječka, tipično iznad 120 MeV u slučaju ISGQR, pojedina stanja prelaze i u negativno energijsko područje, što nema fizikalno objašnjenje u okviru navedene aproksimacije (vidjeti sliku 7.1). U RSRPA se spomenuta nestabilnost pojavljuje na drugačiji način, tako da najniže svojstvene vrijednosti mogu prijeći u kompleksnu ravninu (za vrijednosti $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 210$ MeV), što signalizira gubitak dinamičke stabilnosti [213].



Slika 7.1: Problem infracrvene nestabilnosti u ^{40}Ca za ISGQR. Preuzeto iz rada [223] i prilagođeno na hrvatski jezik, u skladu s licencom *Creative Commons Attribution 4.0 (CC BY 4.0)*.

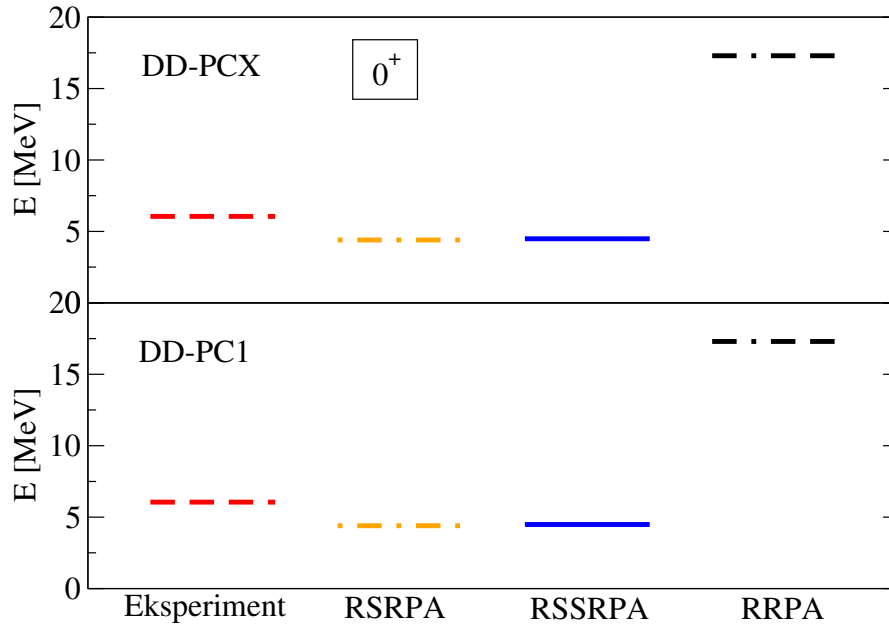
Primjena metode suptrakcije (donji panel slike 7.1), s druge strane, osigurava numeričku i fizikalnu stabilnost izračuna uklanjanjem dvostrukog brojanja korelacija koje nastaje uključ-

vanjem 2p–2h stupnja slobode na temelju već koreliranog funkcionala. U konkretnim rezultatima, modeli sa suptrakcijom, odnosno RSSTDA i RSSRPA, ostvaruju konvergenciju za monopole pri energijama odsječka 2p–2h konfiguracija većim od 150 MeV za ISGMR i iznad 180 MeV za ISGQR, dok je za IVGDR stabilizacija spektra zabilježena već u rasponu 130–150 MeV. Omjeri energijskih momenata, položaji energija i prijelazna snaga, a time i fragmentacija spektra postaju neosjetljivi na dodatno povećanje konfiguracijskog prostora, čime se potvrđuje uloga suptrakcije kao ključnog uvjeta za teorijsku konzistenciju. Osim toga, rezultati dobiveni ovim pristupom ostaju usklađeni s eksperimentalnim opažanjima unutar uobičajenih odstupanja, što dodatno potvrđuje valjanost metode. U kontekstu križne usporedbe modela i parametrizacija, suptrahirani pristupi omogućuju dosljednu interpretaciju rezultata neovisno o energijskom odsječku 2p–2h konfiguracija, o čemu je riječ u idućim potpoglavljima.

7.2 Položaji niskoležećih stanja

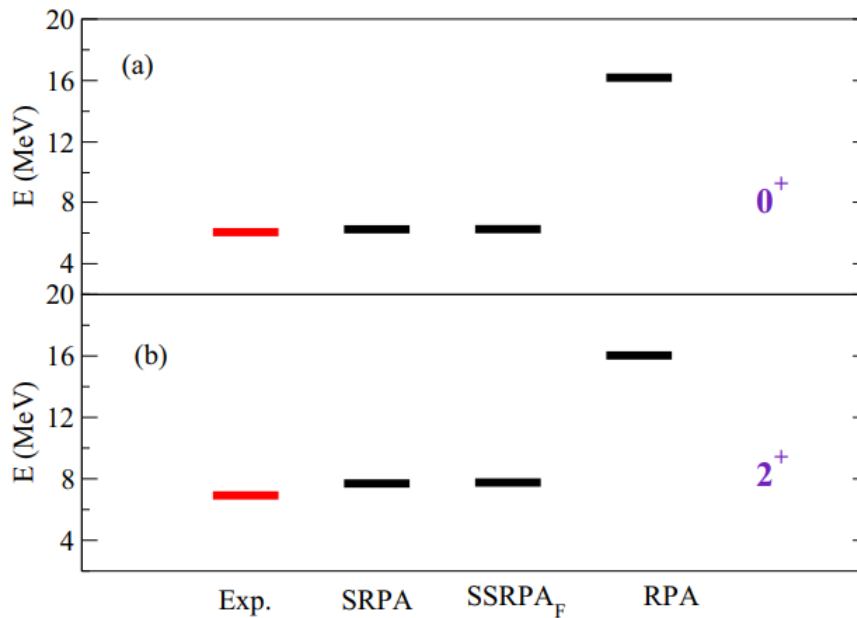
Položaji niskoležećih izoskalarnih 0^+ stanja u jezgri ^{16}O pokazuju izrazito različite obrasce među promatranim teorijskim pristupima (RRPA, RSRPA, RSSRPA), što je prikazano na slici 7.2. U osnovnoj RRPA, prvo 0^+ stanje predviđeno je na znatno višim energijama od eksperimentalne vrijednosti od 6.05 MeV [234], što odražava ograničenu sposobnost 1p–1h konfiguracija da reproduciraju pojedinačna niskoležeća stanja u lakim jezgrama. Suprotno tome, prošireni modeli koji uključuju 2p–2h konfiguracije, poput RSRPA i RSSRPA, dovode do značajnog spuštanja energija prvog 0^+ stanja te na taj način uspijevaju zahvatiti bitna obilježja eksperimentalne strukture. Predviđene energije u tim pristupima ostaju nešto niže od eksperimentalne vrijednosti, ali reprodukcija relativnih razlika i kolektivne prirode pobuđenja znatno je uvjerljivija nego u slučaju RRPA. Istodobno, vrlo male razlike između RSRPA i RSSRPA u niskoležećim 0^+ stanjima ukazuju na to da je sam učinak suptrakcije zanemariv na stanjima dominantno 2p–2h prirode u tom dijelu spektra (vidjeti poglavlje 6.14). S druge strane, situacija je bitno drugačija za niskoležeća 2^+ stanja, budući da jedino RSSRPA uspijeva vjerno reproducirati njihove eksperimentalne vrijednosti, dok dijagonalna aproksimacija, sa i bez suptrakcije, predviđa previsoke energije i ne uspijeva opisati njihovu kolektivnu prirodu. RSRPA pak, zbog izostanka suptrakcije, spušta ova stanja prenisko u energiji. Posljedično, pri korištenju visokih energijskih odsječaka 2p–2h konfiguracija (iznad 210 MeV), svojstvene vrijednosti dobivene dijagonalizacijom RSRPA matrice mogu postati nestabilne i pasti u kompleksno područje [213]. Ovi rezultati potvrđuju da je uključivanje viših konfiguracija nužan preduvjet za kvantitativan opis niskoležećih monopola u ^{16}O te da takvi modovi predstavljaju osjetljiv test samosuglasnosti proširenih teorijskih aproksimacija.

Slično ponašanje niskoležećih izoskalarnih 0^+ stanja u jezgri ^{16}O uočeno je u slučaju nerelativističkih modela sa Skyrme međudjelovanjem [117]. Jedina razlika jest u tome što su položaj najnižeg stanja u slučaju SRPA i SSRPA nešto viši od eksperimentalne vrijednosti (vidjeti sliku



Slika 7.2: Položaji prvog niskoležećeg 0^+ stanja u ^{16}O izračunati pomoću različitih teorijskih pristupa (RSRPA, RSSRPA i RRPA), u usporedbi s eksperimentalnim rezultatom iz ref. [234].

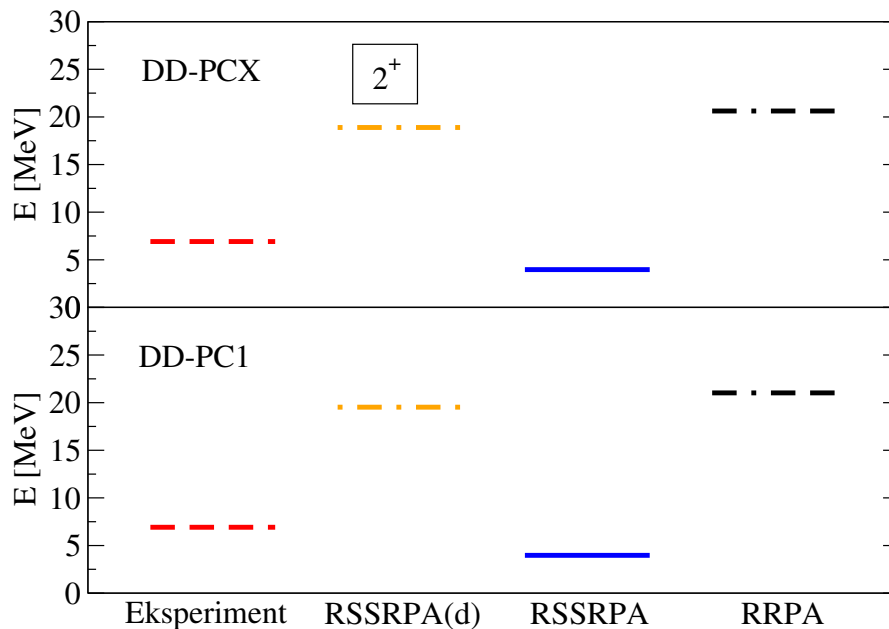
7.3), dok je kod relativističkog pristupa u pravilu riječ o vrijednostima koje su približno 2 MeV niže od eksperimentalnih rezultata. S druge strane, razlika energija pobuđenja prvog 0^+ stanja između standardne SRPA i suptrahirane varijante pokazala se malenom u relativističkim i nerelativističkim modelima.



Slika 7.3: Usporedba položaja najnižih stanja u slučaju 0^+ i 2^+ prijelaza u ^{16}O . Preuzeto uz dopuštenje iz [117]. Copyright (2015) by the American Physical Society.

Na slici 7.4 prikazana je usporedba energije najnižeg pobuđenog 2^+ stanja u jezgri ^{16}O

dobivenog u okviru različitih teorijskih pristupa (RSSRPA(d), RSSRPA i RRPA), za dvije vrste kontaktnog međudjelovanja, odnosno parametrizacije DD-PCX i DD-PC1. Radi usporedbe, prikazana je i eksperimentalna vrijednost najnižeg 2^+ stanja, smještenog na 6.92 MeV [234]. Standardna RRPA aproksimacija u oba slučaja značajno precjenjuje energiju pobuđenja, dajući vrijednosti između 20 i 22 MeV, što jasno ukazuje na ograničenja opisa unutar čistog 1p–1h konfiguracijskog prostora. U suptrahiranoj SRPA u dijagonalnoj aproksimaciji, RSSRPA(d), u kojoj matrica A_{22} sadrži isključivo razlike neperturbiranih 2p–2h energija, dolazi do djelomičnog sniženja energije najnižeg 2^+ stanja, no dobivene vrijednosti i dalje ostaju znatno iznad eksperimentalne. Tek u punoj RSSRPA aproksimaciji, gdje je dinamičko vezanje između 1p–1h i 2p–2h, ali i unutar 2p–2h konfiguracija u potpunosti uključeno, dolazi do snažnog pomaka najnižeg 2^+ stanja prema nižim energijama, uz nešto niže vrijednosti od eksperimentalnih. Ovi rezultati jasno naglašavaju ključnu ulogu višekonfiguracijskih korelacija i njihove dosljedne implementacije za ispravan opis niskoležećih kvadrupolnih pobuđenja u ^{16}O .



Slika 7.4: Položaji niskoležećih pobuđenih 2^+ stanja u ^{16}O izračunati pomoću RSSRPA(d), RSSRPA i RRPA, prikazani za DD-PCX i DD-PC1 parametrizacije EDF-a, u usporedbi s eksperimentalnim rezultatom iz ref. [234].

7.3 Križna analiza momenata distribucije

7.3.1 Usporedba momenata m_0 , m_{-1} i m_1 za ISGMR

Kao što je prikazano u tablici 7.1, usporedba energijskih momenata m_0 za ISGMR u različitim aproksimacijama i dvjema relativističkim parametrizacijama otkriva nekoliko dosljednih

obrazaca. Prvo, vrijednosti m_0 unutar RTDA ili RRPDA predstavljaju referentne vrijednosti za procjenu efekta uključivanja 2p–2h konfiguracija. Uvođenje dijagonalne aproksimacije i potpunih RSSTDA i RSSRPA formalizama dovodi tek do vrlo malih promjena ukupnog neponderiranog momenta. Uz navedeno, razlike između dijagonalne aproksimacije i potpunog oblika ostaju relativno male, što upućuje na to da izostavljanje međudjelovanja unutar 2p–2h konfiguracija ne utječe bitno na ukupnu raspodjelu snage. Treće, parametrizacija DD-PCX sustavno daje nešto više vrijednosti m_0 u odnosu na DD-PC1, neovisno o teorijskom pristupu, što odražava razliku u parametrizaciji funkcionala. Nadalje, teorijska predviđanja m_0 dobivena unutar eksperimentalnog prozora energija od 11 do 40 MeV iz [23] za jezgru ^{16}O sustavno su manja od vrijednosti koje uzimaju u obzir cijeli pozitivni dio spektra. To pokazuje da se dio neponderirane prijelazne snage nalazi izvan promatranog eksperimentalnog intervala, pri čemu je taj učinak izraženiji nakon uključivanja 2p–2h konfiguracija. Sveukupno, rezultati pokazuju da uključivanje kompleksnijih konfiguracija sustavno redistribuira snagu prema nižim energijama bez značajnijeg narušavanja m_0 momenta.

Tablica 7.1: Energijski moment m_0 za ISGMR u ^{16}O u različitim aproksimacijama (RTDA/RRPA, dijagonalna aproksimacija i puni oblik RSSTDA i RSSRPA), za DD-PCX i DD-PC1 parametrizaciju. U zagradama su prikazane vrijednosti unutar eksperimentalnog prozora iz [23].

Pristup	Parametrizacija	RTDA / RRPDA [fm ⁴]	Dijag. aproks. [fm ⁴]	Potpuni oblik [fm ⁴]
RSSTDA	DD-PCX	28.38 (27.50)	28.38 (26.58)	28.38 (26.03)
	DD-PC1 [146]	27.59 (26.34)	27.58 (25.23)	27.58 (24.32)
RSSRPA	DD-PCX [213]	29.79 (28.78)	29.80 (27.74)	29.84 (27.24)
	DD-PC1	27.98 (26.68)	28.01 (25.48)	28.06 (24.52)

Svi teorijski pristupi prikazuju porast m_1 za 0^+ prijelaz u ^{16}O uključivanjem 2p–2h konfiguracija, što je prikazano u tablici 7.2, pri čemu su rezultati punog oblika RSSRPA (RSSTDA) u pravilu nešto viši od dijagonalne aproksimacije kad se uzme u obzir kompletan pozitivni dio energijskog spektra. Sličan je trend uočen u slučaju nerelativističkih modela kod primjene Skyrme međudjelovanja [117, 119] uz nešto više vrijednosti m_1 u slučaju dijagonalne aproksimacije u odnosu na puni oblik RSSRPA. Međutim, valja napomenuti da suptrahirana varijanta dijagonalne aproksimacije (RSSRPA(d)) u slučaju nerelativističkih modela nije u potpunosti istovjetna onoj u relativističkim pristupima zbog razlike u tretiranju A_{22} matrice u koracima suptrakcije. Za detalje o RSTDA(d) i RSSTDA(d) te njihovoj razlici u odnosu na nerelativističku inačicu, potrebno je pogledati poglavlje 4.10 ili rad [146], dok se slična rasprava za RSRPA(d) i RSSRPA(d) nalazi u poglavljima 4.8 i 6.1 ili radu [213]. S druge strane, upravo puni oblik RSSRPA (RSSTDA) doživljava najveću redukciju m_1 unutar prethodno navedenog eksperimentalnog prozora.

Detaljna usporedba energijskih momenata m_{-1} u različitim relativističkim aproksimacijama, prikazana u tablici 7.3, omogućuje procjenu osjetljivosti inverznog energijskog momenta na

Tablica 7.2: Slično kao u tablici 7.1, ali za energijski moment m_1 za ISGMR u ^{16}O .

Pristup	Parametrizacija	RTDA / RRPA [MeVfm ⁴]	Dijag. aproks. [MeVfm ⁴]	Potpuni oblik [MeVfm ⁴]
RSSTDA	DD-PCX	660.4 (616.6)	726.0 (581.5)	736.1 (566.9)
	DD-PC1 [146]	691.2 (629.1)	758.3 (583.9)	774.1 (556.5)
RSSRPA	DD-PCX [213]	726.4 (680.3)	790.1 (638.4)	801.7 (625.0)
	DD-PC1	720.9 (661.2)	787.5 (611.2)	804.8 (581.3)

uključivanje 2p–2h konfiguracija i korelacijskih učinaka. Razlike između dijagonalne i pune verzije RSSTDA pristupa iznimno su male, odnosno manje od $0.001 \text{ MeV}^{-1}\text{fm}^4$, što ukazuje da nedijagonalni doprinosi A_{22} matričnih elemenata imaju zanemariv utjecaj na inverzni moment, dok su u RSSRPA nešto izraženije, premda još uvijek vrlo ograničenog intenziteta. Razlika između RRPA i oba RSSRPA pristupa iznosi oko $0.01 \text{ MeV}^{-1}\text{fm}^4$. Parametrizacija DD-PCX daje nešto veće vrijednosti m_{-1} u odnosu na DD-PC1 kroz sve aproksimacije, što je u skladu s trendovima već uočenima za m_0 i odražava tvrdu efektivnu interakciju.

Tablica 7.3: Slično kao u tablici 7.1, ali za energijski moment m_{-1} za ISGMR u ^{16}O .

Pristup	Parametrizacija	RTDA / RRPA [MeV ⁻¹ fm ⁴]	Dijag. aproks. [MeV ⁻¹ fm ⁴]	Potpuni oblik [MeV ⁻¹ fm ⁴]
RSSTDA	DD-PCX	1.274 (1.255)	1.274 (1.247)	1.274 (1.233)
	DD-PC1 [146]	1.162 (1.135)	1.162 (1.124)	1.162 (1.104)
RSSRPA	DD-PCX [213]	1.276 (1.254)	1.276 (1.243)	1.277 (1.230)
	DD-PC1	1.142 (1.113)	1.143 (1.100)	1.143 (1.079)

7.3.2 Usporedba centroida energije za ISGMR

U tablici 7.4 prikazane su vrijednosti energije centroida danog omjerom m_1/m_0 za raspodjelu prijelazne snage u izoskalarnoj monopolnoj rezonanciji (ISGMR) dobivenu standardnim (RTDA i RRPA) i proširenim pristupima (RSSTDA i RSSRPA), koji uključuju 2p–2h konfiguracije. Općenito, u energijskom spektru jasno se vidi da puni oblik postupka suptrakcije u svim slučajevima daje veće vrijednosti omjera m_1/m_0 od dijagonalne aproksimacije, što odražava snažniji kolektivni odziv i izraženiji utjecaj međukonfiguracijskih korelacija kada su svi elementi bloka A_{22} uključeni u izračun. Razlike su izraženije pri uporabi DD-PC1 funkcionala, što pokazuje veću osjetljivost na proširenje konfiguracijskog prostora i redistribuciju snage povezanu s kompresijskim stupnjem slobode. U cijelom pozitivnom dijelu spektra uključivanje (2p–2h) konfiguracija dovodi do povećanja centroida energije u odnosu na RRPA (RTDA), pri čemu su položaji centroida nešto viši kod RSSRPA (RSSTDA) nego u slučaju primjene dijagonalne aproksimacije. Vrijednosti u zagradama prikazuju rezultate unutar eksperimentalnog prozora, pri čemu su obuhvaćene samo one svojstvene energije koje izravno doprinose opaženoj

ISGMR rezonanciji. U promatranom energijskom rasponu centroidi raspodjela prijelazne snage dobiveni u okviru RSSRPA (RSSTDA) pomaknuti su prema nižim energijama u odnosu na odgovarajuće rezultate RRPA (RTDA), dok se rezultati dobiveni u dijagonalnoj aproksimaciji nalaze između položaja centroida ta dva slučaja. Time se jasno pokazuje da način tretiranja bloka A_{22} ne utječe isključivo na opću raspodjelu prijelazne snage i visokoenergijske dijelove spektra, već značajno oblikuje i onu komponentu odziva koja se nalazi unutar eksperimentalno relevantnog energijskog prozora ISGMR rezonancije. Drugim riječima, uključivanje pune strukture bloka A_{22} dovodi do redistribucije snage i unutar energijskog područja koje izravno ulazi u usporedbu s eksperimentalno opaženim centroidom energije 21.13 MeV [23], što potvrđuje da dijagonalna aproksimacija nije dovoljna za kvantitativan opis monopola u ^{16}O .

Tablica 7.4: Slično kao u tablici 7.1, ali za energiju centroida (omjer m_1/m_0) za ISGMR u ^{16}O . Eksperimentalna vrijednost preuzeta je iz rada [23].

Pristup	Parametrizacija	RTDA / RRPA [MeV]	Dijag. aproks. [MeV]	Potpuni oblik [MeV]	Eksp. [23] [MeV]
RSSTDA	DD-PCX	23.27 (22.43)	25.59 (21.88)	25.94 (21.78)	21.13 ± 0.49
	DD-PC1 [146]	25.06 (23.88)	27.50 (23.15)	28.07 (22.89)	
RSSRPA	DD-PCX [213]	24.38 (23.64)	26.52 (23.02)	26.87 (22.95)	
	DD-PC1	25.76 (24.78)	28.11 (23.98)	28.68 (23.70)	

Usporedba RSSTDA i RSSRPA pokazuje da oba pristupa, unatoč razlikama u formalizmu, predviđaju slične trendove u ponašanju izoskalarnog monopola, pri čemu RSSRPA daje nešto ujednačeniji i manje parametrizacijski osjetljiv odgovor. RSSTDA u pravilu rezultira nešto većim vrijednostima omjera m_1/m_0 u potpunom obliku, što odražava snažniji kolektivni odziv kao posljedicu uključivanja koherentnih 2p–2h konfiguracija unutar RTDA pristupa. Suprotno tome, RSSRPA pokazuje stabilniji porast centroida energije, no s manjim odstupanjima između DD-PCX i DD-PC1 parametrizacija, što sugerira da je ovaj pristup robusniji u pogledu izbora funkcionala. Kada se usporede dijagonalne aproksimacije RSSTDA(d) i RSSRPA(d), uočava se da su razlike među modelima još manje, pri čemu oba pristupa pokazuju gotovo identične energijske pomake unutar eksperimentalnog prozora. To ukazuje da se glavnina razlika među metodama pojavljuje tek pri uvođenju pune strukture bloka A_{22} , dok je u dijagonalnoj aproksimaciji utjecaj međukonfiguracijskih korelacija reduciran i zajednički svim modelima. U cjelini, RSSRPA se pokazuje nešto stabilnijim i manje osjetljivim na detalje parametarskog skupa, dok RSSTDA pruža izraženije pomake centroida energije u punoj aproksimaciji, naglašavajući ulogu konfiguracijskog povezivanja u opisu kolektivne dinamike ISGMR prijelaza.

7.3.3 Usporedba momenata m_0 , m_{-1} i m_1 za ISGQR

Tablica 7.5 prikazuje energijski moment m_0 za ISGQR u jezgri ^{16}O . Rezultati su dani za standardne (RTDA i RRPA) i proširene teorijske pristupe (RSSTDA i RSSRPA), koristeći dvije

efektivne interakcije, DD-PCX i DD-PC1. U svim slučajevima uočeno je da prijelaz iz RRPA u dijagonalnu aproksimaciju dovodi do značajnog smanjenja vrijednosti m_0 , što odražava redistribuciju prijelazne snage uslijed uključenja 2p–2h konfiguracija. Uvođenje punog oblika matrice A_{22} dodatno korigira rezultate, no te su promjene u pravilu umjerenije, što upućuje na stabilnost kolektivnih svojstava ISGQR-a u odnosu na detalje višekonfiguracijskog miješanja. Usporedba RSSTDA i RSSRPA pokazuje da RSSRPA sustavno daje veće vrijednosti m_0 , što je posljedica potpunijeg uključenja povratnih korelacija i miješanja p–h i 2p–2h konfiguracija. Vrijednosti u zgradama označavaju m_0 momente izračunate u ograničenom području energija (11–40 MeV) koje je dosad bilo dostupno eksperimentima [23], te ilustriraju osjetljivost energijskog momenta na spomenuto rezanje energijskog spektra, pri čemu se opći trendovi zadržavaju neovisno o parametrizaciji interakcije.

U slučaju nerelativističke SSRPA sa Skyrme funkcionalom [117], momenti m_{-1} , m_0 i m_1 za ISGQR prikazani su na slici 7.5. Za vrlo male energije odsječka 2p–2h konfiguracija, odnosno $E_{\text{cutoff}} = 40$ MeV, kod navedenog je modela uočeno relativno povećanje m_0 u odnosu na RPA vrijednost od oko 0.7%. Daljnjim povećanjem energije odsječka vrijednost m_0 se postupno smanjuje te za $E_{\text{cutoff}} = 50$ MeV povećanje iznosi svega 0.5% u odnosu na RPA. S druge strane, u slučaju RSSTDA, odnosno RSSRPA, vrijednosti m_0 momenta uvijek su niže u odnosu na RTDA, odnosno RRPA (vidjeti tablicu 7.5). Za RSSTDA relativno smanjenje iznosi približno 3.7–4.2% za cijeli pozitivni dio spektra, dok unutar energijskog prozora 11–40 MeV relativno smanjenje iznosi 11.8–13.9%. Slično ponašanje dobiva se i u RSSRPA pristupu, gdje je m_0 globalno smanjen za približno 3.4–4.7%, odnosno za oko 11.1–13.7% za vrijednosti unutar navedenog energijskog prozora. Takav trend upućuje na to da proširenje konfiguracijskog prostora na 2p–2h stupnjeve slobode ne mijenja samo raspodjelu kvadrupolne snage, nego dovodi i do umjerene redukcije ukupne snage, pri čemu je ta redukcija izraženija u izračunima unutar energijskog prozora 11–40 MeV.

Tablica 7.5: Slično kao u tablici 7.1, samo za energijski moment m_0 za ISGQR u ^{16}O .

Pristup	Parametrizacija	RTDA / RRPA [fm ⁴]	Dijag. aproks. [fm ⁴]	Potpuni oblik [fm ⁴]
RSSTDA	DD-PCX	345.6 (344.1)	331.1 (299.5)	332.6 (303.4)
	DD-PC1 [146]	337.8 (336.6)	325.3 (289.8)	325.0 (293.6)
RSSRPA	DD-PCX [213]	382.6 (381.0)	364.6 (331.9)	369.3 (338.8)
	DD-PC1	378.6 (377.2)	364.6 (325.6)	365.9 (331.1)

Detaljna analiza utjecaja višekonfiguracijskih korelacija na ponderiranu raspodjelu prijelazne snage prikazana je u tablici 7.6. Za razliku od slučaja energijskog momenta m_0 , ovdje se uočava izraženiji porast vrijednosti m_1 pri prijelazu s RRPA na dijagonalnu aproksimaciju, što odražava pomicanje značajnog dijela prijelazne snage prema višim energijama uslijed uključenja 2p–2h konfiguracija. Uvođenje potpunog oblika matrice A_{22} dodatno povećava vrijednosti m_1 , osobito unutar RSSRPA pristupa, što upućuje na važnu ulogu međusobnog miješanja konfiguracija i

povratnih korelacija u određivanju visokenergijskog repa spektralne raspodjele. Usporedba RSSTDA i RSSRPA pokazuje da RSSRPA sustavno daje veće vrijednosti energijskog momenta m_1 , što je konzistentno s jačim fragmentacijskim učinkom i većim doprinosom viših pobuđenih stanja. Vrijednosti navedene u zgradama odgovaraju energijskom prozoru 11–40 MeV iz [23], unutar kojeg se kvalitativni trendovi zadržavaju neovisno o odabranoj parametrizaciji efektivne interakcije.

Za cijeli pozitivni dio energijskog spektra, uočava se da u slučaju RSSRPA modela dolazi do relativnog porasta momenta m_1 u odnosu na RPA vrijednosti, koji iznosi oko 8.0% (2.3% za dijagonalnu aproksimaciju) za DD-PCX, odnosno 12.7% (7.8% za dijagonalnu aproksimaciju) za DD-PC1 parametrizaciju (vidjeti tablicu 7.6). S druge strane, unutar odabranog energijskog prozora (11–40 MeV) [23], vrijednosti momenta m_1 u potpunoj RSSRPA se smanjuju za približno 14.1% (DD-PCX) i 15.1% (DD-PC1) u odnosu na odgovarajuće RPA proračune. Nerelativistički model sa Skyrme međudjelovanjem [117] (vidjeti sliku 7.5) pokazuje monotoni porast m_1 s povećanjem energije odsječka 2p–2h konfiguracija, pri čemu za $E_{\text{cutoff}} = 40$ MeV relativno povećanje iznosi oko 10%, a za $E_{\text{cutoff}} = 50$ MeV oko 15% u odnosu na RPA vrijednost, što ukazuje na slično ponašanje kao u slučaju relativističkih modela. Slični nerelativistički modeli [119] s uključenim tenzorskim međudjelovanjem za odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 60$ MeV daju relativno povećanje za SSRPA(d) približno 17.4%, a za SSRPA oko 12.5%, u odnosu na RPA vrijednosti.

Tablica 7.6: Slično kao u tablici 7.1, samo za energijski moment m_1 za ISGQR u ^{16}O .

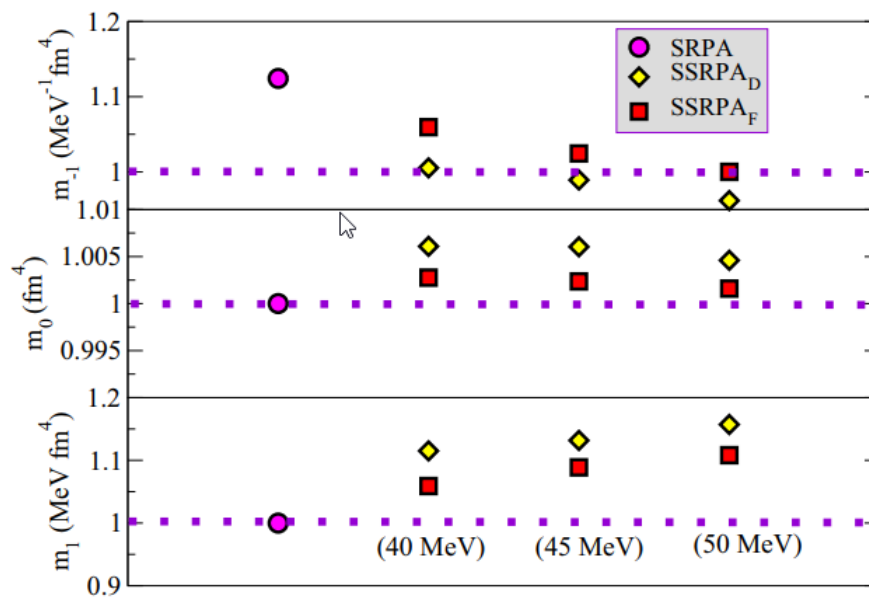
Pristup	Parametrizacija	RTDA / RPA [MeVfm ⁴]	Dijag. aproks. [MeVfm ⁴]	Potpuni oblik [MeVfm ⁴]
RSSTDA	DD-PCX	8243 (8128)	8868 (6471)	9109 (6925)
	DD-PC1 [146]	8074 (7980)	8935 (6260)	9193 (6755)
RSSRPA	DD-PCX [213]	9151 (9057)	9357 (7206)	9882 (7783)
	DD-PC1	9061 (8977)	9767 (7046)	10208 (7624)

Tablica 7.7 prikazuje energijski moment m_{-1} za ISGQR, koji je izravno povezan s kvadrupolnom polarizabilnošću jezgre i naglašava doprinos niskoenergijskog dijela spektra. Unutar svakog teorijskog formalizma uočava se vrlo dobra konzistentnost između rezultata dobivenih u referentnim izračunima (RTDA ili RPA), dijagonalnoj aproksimaciji i potpunom obliku RS-SRPA ili RSSTDA, pri čemu su razlike u vrijednostima m_{-1} tipično ispod 1%. To pokazuje da je polarizabilnost slabo osjetljiva na način tretmana korelacija unutar istog formalizma, odnosno da je ukupna raspodjela prijelazne snage stabilna s obzirom na uključivanje ili zanemarivanje međudjelovanja unutar 2p–2h konfiguracija. Vrijednosti dane u zgradama, koje odgovaraju integriranju prijelazne snage unutar eksperimentalno dostupnog energijskog prozora ekscitacijskog spektra (11–40 MeV) [23], sustavno su nešto manje od vrijednosti koje uključuju cijeli pozitivni dio spektra, što je očekivana posljedica izostanka visokoležećih doprinosa. Nerelativistički modeli također pokazuju sačuvanje m_{-1} između potpune SRPA i RPA za odsječke

2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} \gtrsim 50$ MeV [117, 119], dok dijagonalna aproksimacija u oba slučaja pokazuje pad m_{-1} u odnosu na vrijednost dobivenu RPA izračunom, pri čemu u SRPA(d) relativan pad iznosi nešto manje od 5% (vidjeti sliku 7.5), dok je u istovjetnom modelu s tenzorskim međudjelovanjem uočen relativan pad od približno 6.7% [119]. Navedena se razlika može pripisati različitoj definiciji dijagonalne aproksimacije u ovom radu u odnosu na onu korištenu u radovima [117, 119] (za detalje vidjeti poglavlje 4.8 ili rad [213]).

Tablica 7.7: Slično kao u tablici 7.1, samo za energijski moment m_{-1} za ISGQR u ^{16}O .

Pristup	Parametrizacija	RTDA / RRPA [MeV ⁻¹ fm ⁴]	Dijag. aproks. [MeV ⁻¹ fm ⁴]	Potpuni oblik [MeV ⁻¹ fm ⁴]
RSSTDA	DD-PCX	14.69 (14.66)	14.62 (14.11)	14.63 (14.04)
	DD-PC1 [146]	14.29 (14.27)	14.23 (13.63)	14.23 (13.60)
RSSRPA	DD-PCX [213]	16.17 (16.14)	16.13 (15.55)	16.23 (15.59)
	DD-PC1	15.96 (15.94)	15.97 (15.28)	16.04 (15.32)



Slika 7.5: Momenti raspodjele za SRPA, SSRPA i SSRPA(d) za ISGQR. Preuzeto uz dopuštenje iz [117]. Copyright (2015) by the American Physical Society.

7.3.4 Usporedba centroida energije za ISGQR

Tablica 7.8 omogućuje kvantitativnu analizu odstupanja centroida energije ISGQR-a unutar pojedinog formalizma te njihovu usporedbu. Unutar RSSTDA formalizma prijelaz s referentnog RTDA izračuna na RSSTDA(d) dovodi do porasta centroida energije za približno 2.9–3.6 MeV,

što odgovara relativnom povećanju od oko 12–15%, dok uključivanje potpunog oblika RSSTDA uzrokuje dodatni pomak od 0.6–0.8 MeV. Sličan obrazac uočen je i unutar RSSRPA formalizma, gdje razlika između polaznog RRPA rezultata i dijagonalne aproksimacije iznosi 1.7–2.9 MeV (otprilike 7–12%), no prijelaz na potpuni račun rezultira znatno izraženijim skokom od čak 1.1 MeV za obje parametrizacije. Ovakva dinamika sugerira da je u oba formalizma primarni pomak centroida prema višim energijama uvjetovan samim proširenjem konfiguracijskog prostora s 2p–2h parovima, dok međudjelovanje između 2p–2h konfiguracija ima sekundarnu, ali i dalje značajnu ulogu. Razlika između RSSTDA i RSSRPA rezultata može se povezati s uvođenjem matrice B koja sadrži povratne korelacije i pripadajuće Y amplituda koje se kreću unatrag u vremenu (engl. *backward-going*) u RSSRPA formalizmu, čime se opis pobuđenja proširuje u odnosu na jednostavniju RSSTDA strukturu zasnovanu na matrici A i X amplitudama. U slučaju DD-PCX parametrizacije potpuni RSSRPA rezultat nalazi se za 0.63 MeV niže od odgovarajućeg RSSTDA centroida, dok je za DD-PC1 ta razlika manja. To pokazuje da učinak prelaska s RSSTDA na RSSRPA djelomično ovisi i o odabranoj parametrizaciji relativističkog funkcionala gustoće. Pored spomenutog, sve aproksimacije sustavno precjenjuju eksperimentalnu vrijednost od 19.76 MeV [23]. Međutim, restrikcija integriranja na mjerljivi energijski prozor (11–40 MeV) znatno reducira to odstupanje, svodeći teorijske vrijednosti unutar uskog i stabilnog raspona između 21.6 MeV i 23.0 MeV, dok referentni RTDA i RRPA rezultati ostaju nešto viši, s vrijednostima 23.6–23.8 MeV. Nerelativistički modeli pokazuju povećanje centroida energije dobivenog pomoću SSRPA za oko 14% u odnosu na RPA (slika 7.5), dok je u slučaju relativističkih modela (RSSTDA i RSSRPA) relativna razlika u odnosu na RRPA između 12% i 18%.

Tablica 7.8: Slično kao u tablici 7.1, ali za centroid energije (omjer m_1/m_0) za ISGQR u ^{16}O . Eksperimentalna vrijednost preuzeta je iz rada [23].

Pristup	Parametrizacija	RTDA / RRPA [MeV]	Dijag. aproks. [MeV]	Potpuni oblik [MeV]	Eksp. [23] [MeV]
RSSTDA	DD-PCX	23.85 (23.62)	26.79 (21.61)	27.39 (22.83)	19.76 ± 0.22
	DD-PC1 [146]	23.90 (23.71)	27.47 (21.60)	28.29 (23.01)	
RSSRPA	DD-PCX [213]	23.92 (23.77)	25.66 (21.71)	26.76 (22.97)	
	DD-PC1	23.93 (23.80)	26.79 (21.64)	27.90 (23.03)	

7.3.5 Odabir odgovarajućeg funkcionala

Na temelju prethodne usporedne analize energijskih momenata, energija centroida raspodjele prijelazne snage te strukture pobuđenih stanja ISGMR-a i ISGQR-a u jezgri ^{16}O , može se zaključiti da izbor optimalnog funkcionala ne ovisi samo o apsolutnom slaganju pojedine veličine s eksperimentalnim podacima, nego i o stabilnosti rezultata pri proširenju konfiguracijskog prostora s $1p-1h \oplus 1\alpha-1h$ na $1p-1h \oplus 1\alpha-1h \oplus 2p-2h$ konfiguracije. U tom smislu, DD-PCX

parametrizacija energijskih funkcionala gustoće pokazuje sustavno stabilno ponašanje u oba proširena formalizma (RSSTDA i RSSRPA), pri čemu u pravilu daje nešto veće vrijednosti m_0 i m_{-1} u odnosu na DD-PC1. Unutar svakog pojedinog formalizma, usporedba referentnih RTDA, odnosno RRPA rezultata s dijagonalnom aproksimacijom i potpunim oblikom RSSTDA, odnosno RSSRPA, pokazuje da relativna odstupanja energijskih momenata ovise o promatranom momentu i o energijskom području integracije raspodjele prijelazne snage. Za cijeli pozitivni dio spektra odstupanja su vrlo mala za m_0 u ISGMR-u, gdje ne prelaze približno 0.3%, te za m_{-1} u ISGMR-u i ISGQR-u, gdje ostaju ispod približno 0.1%, odnosno 0.5%. Nešto izraženija, ali još uvijek umjerena odstupanja dobivaju se za m_0 u ISGQR-u, gdje iznose približno 3.4–4.7%, dok moment m_1 pokazuje znatno veću osjetljivost na uključivanje 2p–2h konfiguracija. Opća usporedba formalizama dodatno pokazuje da RSSRPA u pravilu daje veće vrijednosti momenata m_0 i m_1 u odnosu na RSSTDA, dok se za m_{-1} razlike između formalizama pokazuju slabije izraženima i ovise o promatranom modu i funkcionalu. Navedena razlika, osobito u vrijednostima m_0 i m_1 , u skladu je s činjenicom da uključivanje B matrice mijenja strukturu odziva i redistribuira prijelaznu snagu između različitih dijelova spektra pobuđenja. Istodobno, razlike između relativističkih funkcionala s DD-PCX i DD-PC1 parametrizacijom ostaju pretežno kvantitativne naravi te ne dovode do značajne promjene kvalitativne slike strukture pobuđenih stanja.

Unatoč tome što uključivanje rezidualnog međudjelovanja u matrici A_{22} ima sekundarni efekt u odnosu na primarni pomak uzrokovan samim proširenjem konfiguracijskog prostora, oba efekta su kvantitativno mjerljiva i nužni za predviđanje spektra unutar eksperimentalnog prozora [23]. Na temelju prikazanih rezultata može se zaključiti da, unatoč tome što jednostavniji RSSTDA formalizam unutar eksperimentalnog prozora ostvaruje numerički bolje slaganje s eksperimentalnim centroidima za oba promatrana moda, potpuni RSSRPA formalizam u kombinaciji s DD-PCX parametrizacijom predstavlja metodološki optimalan izbor za sustavne mikroskopske proračune kolektivnih modova pobuđenja u lakim jezgrama. Budući da su u postupak optimizacije ovog funkcionala izravno ugrađeni eksperimentalni podaci za kolektivna pobuđenja i dipolnu polarizabilnost, DD-PCX u konačnim proračunima pruža fizikalno utemeljeniju raspodjelu prijelazne snage te sustavno reducira precjenjivanje energija centroida u usporedbi s DD-PC1 parametrizacijom.

7.4 Problem jednostavnog (nekoreliranog) osnovnog stanja

U proračunima prezentiranim u ovom radu osnovno stanje jezgre ^{16}O opisano je relativističkom Hartreejevom (RH) aproksimacijom (vidjeti poglavlje 3.4), što predstavlja efektivni model srednjeg samosuglasnog polja bez eksplicitnih korelacija među nukleonima. Takav pristup vrlo je blizak nezavisnom čestičnom modelu u kojem se pretpostavlja da se svaki nukleon giba u srednjem polju, za razliku od sofisticiranijih metoda poput Brueckner-Hartree-Focka (BHF) koje uključuju dvočestične korelacije u osnovnom stanju. Posljedično, RH opis zanemaruje kvantne

korelacije koje mogu utjecati na preciznost predviđanja pobuđenih stanja. Primjerice, u nekoreliranom osnovnom stanju sva vezana jednočestična stanja su potpuno popunjena (popunjenost ≈ 1), dok su orbitale iznad Fermijeve površine potpuno prazne (popunjenost ≈ 0). Korelirani pristupi dopustili bi djelomičnu popunjenost i pojavu korelirane dvočestične matrice gustoće. Uključivanje takvih korelacija može dovesti do pomaka energija pobuđenja i razlika u raspodjeli snage u odnosu na pristupe koji ih ne uključuju eksplicitno.

Analiza M. Tohyame na primjeru jezgre ^{16}O pokazala je koliki učinak korelacije osnovnog stanja mogu imati na spektar kolektivnih pobuđenja [235]. Primjenom proširene aproksimacije slučajnih faza (engl. *extended random phase approximation* (ERPA)) zasnovane na vremenski ovisnoj teoriji matrice gustoće, uključene su korelacije osnovnog stanja, što je rezultiralo znatnim promjenama u energijskim položajima i raspodjeli snage određenih modova [235]. Posebno se ističe pomak prvog 3^- (oktupalnog) stanja. Uz uračunavanje korekcija vlastite energije proizašlih iz korelacija, 3^- stanje pomiče se prema višim energijama u odnosu na standardnu RPA (s nekoreliranim osnovnim stanjem), dok daljnje uključivanje vezanja s $2p-2h$ konfiguracijama snižava energiju natrag prema eksperimentalnoj vrijednosti [235]. Nadalje, djelomična popunjenost jednočestičnih stanja u koreliranom osnovnom stanju dovodi do fragmentacije dipolne ($E1$) snage po spektru [235]. Ipak, položaj glavnog vrha GDR ostao je približno neizmijenjen u odnosu na RPA rezultat, budući da se dva suprotna efekta, s jedne strane povećanje energije čestica-šupljina (uslijed korekcija vlastitih energija), a s druge strane vezanje s $2p-2h$ konfiguracijama, u velikoj mjeri međusobno poništavaju [235].

7.5 Metodološka ograničenja

Iako razvijene teorijske varijante RSTDA i RSRPA predstavljaju značajan iskorak u odnosu na standardne pristupe koji ne uključuju kompleksne konfiguracije, njihovo je glavno metodološko ograničenje što je konfiguracijski prostor sveden isključivo na jednočestično-jednošupljinska ($1p-1h$) i dvočestično-dvošupljinska ($2p-2h$) pobuđenja. U trenutačnoj formulaciji, modeli ne uključuju doprinose konfiguracija višeg reda, poput tročestično-trošupljinskih ($3p-3h$) i složenijih stanja, što može biti relevantno za precizniji opis fine strukture spektralnih raspodjela i za iscrpljenost energijski ponderiranog sumacijskog pravila. Formalizam razvijen u ovom radu u potpunosti je utemeljen na relativističkom funkcionalu gustoće i tretira postupak suptrakcije u skladu s pripadnim lagrangijanom. Ipak, uključivanje antičestičnog doprinosa, odnosno rješenja negativnih energija iz Diracova mora, poput $1p-1\alpha-2h$ i $2\alpha-2h$, kao i dosljedan tretman suptrakcije u navedenim slučajevima ostaje otvoreno pitanje. Planirano je da se ti aspekti detaljnije istraže u budućnosti.

Ograničenja u računalnim resursima trenutačno ograničavaju proučavanje isključivo na lake jezgre, pri čemu dimenzije matrica koje se u tom slučaju mogu obraditi, odnosno dijagonalizirati, dosežu približno $50\,000 \times 50\,000$. Složeniji izračuni, uključujući atomske jezgre ^{40}Ca i ^{48}Ca , kao

i proračuni GDR i GQR već u ^{16}O u okviru RSTDA formalizma, te gotovo svi izračuni u slučaju RSRPA, osim onih za male konfiguracijske prostore, zahtijevaju znatno veće količine RAM-a (od 16 do 128 GB RAM-a). U tim se slučajevima koriste LAPACK-ovi solveri [236, 237], čiji su dijelovi algoritma paralelizirani, što omogućuje značajno ubrzanje procesa dijagonalizacije. Međutim, oni računaju cjelokupni spektar vlastitih vrijednosti, što dodatno povećava računalni zahtjev. Postupak popunjavanja matričnih elemenata u svim numeričkim implementacijama ostavljen je kao korisnički izbor te može biti izveden serijski ili paralelno, ovisno o dostupnim računalnim resursima i željenoj učinkovitosti izračuna, odnosno brzini.

8 ZAKLJUČAK

U ovom radu razvijen je potpuno samosuglasni teorijski formalizam i numerička implementacija druge Tamm-Dancoff aproksimacije, kao i druge aproksimacije slučajnih faza, zasnovanih na relativističkom energijskom funkcionalu gustoće s kontaktim međudjelovanjem s DD-PC1 i DD-PCX parametrizacijama. U okviru oba teorijska pristupa razvijene su po četiri varijante modela koje uključuju doprinose jednočestično-jednošupljinskih (1p–1h) i dvočestično-dvošupljinskih (2p–2h) konfiguracija, uz njihova međusobna vezanja. Modeli se međusobno razlikuju s obzirom na dva ključna kriterija: (i) uključivanje međudjelovanja unutar samih 2p–2h konfiguracija (primjena punog oblika ili dijagonalne aproksimacije), te (ii) primjenu metode suptrakcije u svrhu eliminacije dvostrukog brojanja korelacija. U okviru rada izvedeni su općeniti izrazi za matrične elemente oba formalizma koji nisu ograničeni na specifični oblik međudjelovanja. Time je omogućena primjena razvijenog teorijskog formalizma na najzastupljenije relativističke modele, od onih s kontaktim međudjelovanjem do modela s izmjenom mezona. Osim razvoja teorijskog formalizma, izvedena je numerička implementacija modela za izračune monopolnih, dipolnih i kvadrupolnih pobuđenja u lakim jezgrama, s naglaskom na atomsku jezgru ^{16}O . U okviru razvijenih varijanti modela istražene su raspodjele prijelazne snage za gigantske monopolne, dipolne i kvadrupolne rezonancije. Za navedena su pobuđenja sustavno izračunati energijski položaji centroida, pripadajuće širine te postotak iscrpljenosti energijski ponderiranog sumacijskog pravila. Na temelju navedenog, glavni znanstveni doprinos ovog rada proizlazi iz dosljednog povezivanja teorijske formulacije s njezinom izravnom primjenom u predviđanju ključnih spektralnih svojstava, uz potpuno očuvanje samosuglasnosti i bez uvođenja ikakvih dodatnih fenomenoloških parametara prilagodbe.

Rezultati istraživanja pokazuju da uvođenje 2p–2h konfiguracija unutar druge Tamm-Dancoff aproksimacije i druge aproksimacije slučajnih faza dovodi do karakteristične fragmentacije prijelazne snage i pomaka energija pobuđenja prema nižim vrijednostima. Dobiveni rezultati pokazuju kvalitativnu sličnost s onima iz nerelativističkih SRPA pristupa koji koriste Skyrme i Gogny interakcije [112, 116], kao i s modelima temeljenima na realističnim nukleon-nukleon potencijalima [110, 111]. Iako se kod RSTDA i RSRPA uočava prividno bolje slaganje s eksperimentom za ISGMR za energije odsječka 2p–2h konfiguracija ispod 180 MeV, takvo slaganje nije stabilno svojstvo modela, jer položaji vlastitih vrijednosti ne konvergiraju pri povećavanju 2p–2h konfiguracijskog prostora. To ograničenje postaje posebno izraženo u slučaju ISGQR, gdje prošireni formalizmi dovode do nefizikalnog premještanja dijela prijelazne snage prema negativnim energijama ili do pojave kompleksnih vlastitih vrijednosti. U RSTDA i RSTDA(d) pristupu nestabilnost se očituje ponajprije prijelazom najnižih vlastitih vrijednosti u negativni dio spektra, dok se u RSRPA formalizmu pri visokim energijama odsječka 2p–2h konfiguracija pojavljuju kompleksna rješenja. Iz navedenog slijedi da je pojava nestabilnosti u RSRPA formalizmu okarakterizirana drugačije nego u RSTDA modelu, iako je u oba slučaja

uzrokovana dvostrukim brojanjem korelacija.

U okviru ovog istraživanja prvi put je primijenjena metoda suptrakcije na relativističke teorijske pristupe koji uz 1p–1h uključuju i 2p–2h konfiguracije. Pokazano je da RSSTDA i RSSRPA rezultati pokazuju stabilnost i zadovoljavajuću konvergenciju za sve tri promatrane vrste rezonancija. Primijenjena metoda uspješno otklanja infracrvene divergencije i dvostruko brojanje korelacija već implicitno sadržanih u funkcionalu gustoće. Istodobno je u statičkoj granici očuvan odziv polazne aproksimacije (RTDA ili RTDA), uz zadržavanje dinamičkih učinaka složenijih konfiguracija. Dobivene raspodjele snage pokazuju obrasce fragmentacije usporedive s rezultatima nerelativističkih modela [117, 119], a ponašanje ukupne snage i energijski ponderiranih momenata (EWSR) slijedi očekivane trendove. GMR i GQR spektri dobiveni pomoću RSSTDA i RSSRPA dodatno poboljšavaju usporedivost s eksperimentom, s glavnim vrhovima koji su za približno 1 MeV niži u odnosu na RTDA i RRPA rezultate. Nadalje, za pozitivni dio spektra pokazano je da je moment m_{-1} očuvan između RTDA, RSSTDA i RSSTDA(d) za ISGMR i ISQGR. Sličan zaključak vrijedi, iako uz odstupanje do najviše 1%, između RRPA, RSSRPA i RSSRPA(d), dok su u nerelativističkim formulacijama zabilježena mala odstupanja, odnosno oko 2% između RPA i SRPA(d), uz očuvanje navedenog momenta između RPA i SRPA [119]. Navedena se razlika tumači činjenicom da se u relativističkoj formulaciji dijagonalna aproksimacija dosljedno koristi tijekom cijelog postupka suptrakcije, za razliku od nerelativističkih modela gdje se primjenjuje samo pri inverziji matrice A_{22} . Nadalje, očuvanje m_{-1} izravno implicira očuvanje nuklearne kompresibilnosti vezano uz ISGMR, odnosno polarizabilnosti kod ISGQR. Istraživanje gigantske dipolne rezonancije potvrdilo je da je u energijskom intervalu od 11 do 40 MeV TRK sumacijsko pravilo u potpunosti zadovoljeno, dok je u cijelom pozitivnom dijelu spektra za približno 28% veće od RRPA vrijednosti. Iako su dobiveni rezultati u načelnom suglasju s većinom dostupnih podataka, važno je napomenuti da određena eksperimentalna mjerenja, kao i njihove naknadne analize, pokazuju zamjetna međusobna odstupanja koja onemogućuju postizanje potpunog znanstvenog konsenzusa. Analiza energijskih spektara za GDR u ^{16}O za glavne kvantne brojeve $N = 14$ i $N = 20$ ukazuje na to da proširenje 2p–2h konfiguracijskog prostora sustavno pomiče energiju spurioznog stanja prema nižim vrijednostima. Razlika između RSSRPA i RSSRPA(d) rezultata jasno naglašava nužnost uključivanja međudjelovanja unutar 2p–2h potprostora kao bitan čimbenik za postizanje bolje separacije spurioznih modova od stvarnih dipolnih pobuđenja u izovektorskom kanalu. Pritom nije uočena nikakva fragmentacija samog spurioznog moda na zasebne komponente, što ukazuje na njegovu stabilnost unutar korištene oscilatorske baze. Pored spomenutog, centroidi energije za IVGDR načelno opadaju u RSSRPA u usporedbi s RRPA rješenjem, pri čemu je energijski spektar za $N = 14$ karakteriziran znatno manjom gustoćom stanja koja doprinose prijelaznoj snazi iznad $10^{-4} \text{ e}^2\text{fm}^2$ u odnosu na slučaj za $N = 20$. Naposljetku, odabir glavnog kvantnog broja oscilatorske baze presudno utječe na sam intenzitet fragmentacije spektra, a ujedno i na samu širinu rezonancije, pri čemu slučaj $N = 20$ rezultira rezonancijom širom za otprilike 1 MeV u odnosu na izračune s $N = 14$, te se postiže veće podudaranje s dostupnim eksperimental-

nim rezultatima. Preostala odstupanja djelomično se mogu pripisati sustavnim neodređenostima zbog upotrebe funkcionala s različitim parametrizacijama, kao i primjeni relativističke Hartree aproksimacije pri opisu osnovnog stanja. Dodatni izvor neodređenosti su ograničenja na veličinu baze harmoničkog oscilatora korištene u izračunu osnovnog stanja. Primjerice, u opisu ISGQR, korištena je vrijednost glavnog kvantnog broja $N = 10$, zbog sporije konvergencije RH+TDA, odnosno RH+RPA. Iako je taj izbor bio prvenstveno tehnički uvjetovan, on može doprinijeti blago precijenjenim energijama pobuđenja.

Oba pristupa s primjenom suptrakcije, RSSTDA i RSSRPA, uspješno reproduciraju većinu niskoležećih stanja kolektivne prirode za 0^+ i 2^+ prijelaze. Za niže vrijednosti energijskih odsječaka 2p–2h konfiguracija, poput $E_{\text{cutoff}} = 60$ MeV, rezultati relativističkih i nerelativističkih modela za najniža stanja pokazuju vrlo dobro međusobno slaganje s razlikama do oko 1 MeV, a ujedno su u dobrom slaganju s eksperimentalnim vrijednostima. Međutim, s daljnjim povećanjem vrijednosti energijskih odsječaka te razlike postaju nešto izraženije u odnosu na nerelativističke modele i eksperimentalne podatke, iako položaji niskoležećih stanja konvergiraju, postupno se pomičući prema nižim energijama. Pritom relativna razlika između najnižeg 0^+ i 2^+ stanja iznosi oko 0.5 MeV za RSSRPA, dok je eksperimentalna vrijednost 870 keV [234]. Usporedna analiza rezultata ukazuje na to da RSTDA i RSRPA formalizmi, uz Landauovo gušenje, koje je inherentno već na RTDA i RRPA razini, uspješno obuhvaćaju i efekte miješanja 1p–1h s 2p–2h konfiguracijama, ali i miješanje unutar 2p–2h konfiguracija kod potpune RSTDA i RSRPA, što se makroskopski manifestira kroz značajno povećanje širine nuklearnih rezonancija. Uvođenje 2p–2h konfiguracija unutar RSTDA i RSRPA osigurava dodatni mehanizam disipacije energije, čime se postiže realističniji opis širine raspada i cjelokupne dinamike nuklearnih pobuđenja u usporedbi s jednostavnijim modelima.

Zaključci ovog rada upućuju na potrebu za dodatnim poboljšanjima samog međudjelovanja ili drugačijim opisom osnovnog stanja kako bi se postigla bolja sukladnost s eksperimentom. Unatoč tome, model bez dodatnih fenomenoloških parametara pokazuje visoku prediktivnu moć, čime se potvrđuje njegova vrijednost kao teorijskog okvira za buduća istraživanja kolektivnih pobuđenja u atomskim jezgrama. U tom kontekstu, ovo istraživanje postavlja temelje za daljnji razvoj potpuno samosuglasne relativističke SRPA formulacije, odnosno njenog proširenja, koja bi uključivala kompleksnije korelacije osnovnog stanja omogućujući još precizniji opis nuklearnih pobuđenja kroz cijeli nuklearni spektar. Posebna pažnja bit će posvećena opisu niskoležećih stanja i *pygmy* dipolne snage, određene dominantno prijelazima neutrona iz vanjskih orbitala, te pojavi α -struktura u laganim jezgrama poput ^{16}O , koje se mogu dodatno proučiti uključivanjem tenzorskog međudjelovanja i korekcija izvan aproksimacije srednjeg polja. Pored spomenutog predviđena je i kvazičestična nadogradnja razvijenog teorijskog okvira, čime bi se omogućilo proširenje formalizma na jezgre s otvorenim ljuskama uz eksplicitno uključivanje korelacija sparivanja.

Popis slika

1.1	Usporedba raspodjele snage magnetskih M1 prijelaza u jezgrama ^{60}Ni i ^{136}Ba dobivene pomoću Hartree-Fock (HF) + RPA, Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) + QRPA i modela Ijusaka (SM). Preuzeto uz dopuštenje iz [80]. <i>Copyright (2024) by the American Physical Society.</i>	2
1.2	Raspodjela snage za Gamow-Tellerove prijelaze izračunate pomoću RPA i RPA + PVC modela za jezgru ^{60}Ni . Preuzeto uz dopuštenje iz [90]. <i>Copyright (2012) by the American Physical Society.</i>	3
1.3	a) Izoskalarni monopolni odziv za ^{16}O za Gogny međudjelovanje za slučajeve RPA i SRPA za kontinuiranu raspodjelu snage za različite vrijednosti dvočestično-dvošupljinskih (2p–2h) graničnih energija. b) Slično kao i prethodni slučaj, ali za SRPA račun bez miješanih neutron–proton dvočestično-dvošupljinskih konfiguracija (SRPA*). Preuzeto uz dopuštenje iz [116]. <i>Copyright (2012) by the American Physical Society.</i>	5
2.1	Fotoneutronske udarne presjke na atomskoj jezgri ^{16}O do 30 MeV. Preuzeto uz dopuštenje iz [3]. <i>Copyright (1964) by the American Physical Society.</i>	9
2.2	Fotoapsorpcijske udarne presjke za različite Zr izotope. Preuzeto uz dopuštenje iz [10]. <i>Copyright (1975) by the American Physical Society.</i>	13
2.3	Prikazani su doprinosi ukupnoj širini gigantske rezonancije. $\Gamma^\uparrow$ označava širinu koja dolazi od izravnog ili poluizravnog raspada u otvorene emisijske kanale, dok $\Gamma^\downarrow$ označava širinu koja dolazi od početnog miješanja kolektivnog pobuđenja s 2p–2h konfiguracijama. Daljnje širenje snage prema 3p–3h i složenijim mp–mh konfiguracijama opisuje se doprinosom $\Gamma^\uparrow$, nakon čega sustav prelazi u gusto raspoređena stanja složene jezgre i deekscitira se statistički.	17
2.4	Shematski prikaz izoskalarne i izovektorske GMR.	20
2.5	Eksperimentalna raspodjela snage za izoskalarne monopolne (ISGMR), izoskalarne dipolne (ISGDR) i izoskalarne kvadrupolne prijelaze (ISGQR) za ^{16}O dobivena neelastičnim raspršenjem α -čestica pri malim kutovima. Preuzeto uz dopuštenje iz [23]. <i>Copyright (2001) by the American Physical Society.</i>	21
2.6	Shematski prikaz izovektorske i izoskalarne GDR.	23
2.7	Shematski prikaz izoskalarne i izovektorske GQR.	27
5.1	Raspodjela snage ISGMR prijelaza za jezgru ^{16}O , dobivena korištenjem različitih varijanti RSTDA (vidjeti u tekstu). Zelena točkasta linija označava referentni RTDA račun, dok preostale linije predstavljaju izračune za različite vrijednosti energijskog odsječka (engl. <i>cutoff</i>) neperturbiranih dvočestično-dvošupljinskih (2p–2h) konfiguracija: 60, 90, 120, 150 i 180 MeV.	84
5.2	Diskretna raspodjela snage ISGMR za jezgru ^{16}O	85

5.3	Isto kao na slici 5.1, ali za raspodjelu snage IVGMR.	89
5.4	Isto kao na slici 5.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGMR.	90
5.5	Isto kao na slici 5.1, ali za raspodjelu snage ISGQR.	91
5.6	Isto kao na slici 5.2, ali za diskretnu raspodjelu snage ISGQR.	91
5.7	Isto kao na slici 5.1, ali za IVGQR raspodjelu snage.	95
5.8	Isto kao na slici 5.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGQR.	95
5.9	Kumulativna prijelazna snaga za ISGMR i IVGMR u jezgri ^{16}O za RTDA, RSTDA i RSSTDA kao funkcije energije pobuđenja E , pri čemu su uključene neperturbirane 2p–2h konfiguracije do $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV.	96
5.10	Isto kao i za 5.9, ali za ISGQR i IVGQR u jezgri ^{16}O , pri čemu su uključene neperturbirane 2p–2h konfiguracije do $E_{\text{cutoff}} = 210$ MeV.	97
6.1	Raspodjela snage ISGMR prijelaza za jezgru ^{16}O , dobivena korištenjem različitih varijanti RSRPA (vidjeti u tekstu). Zelena točkasta linija označava referentni RRPA račun, dok preostale linije predstavljaju izračune za različite vrijednosti energijskog odsječka (engl. <i>cutoff</i>) neperturbiranih dvočestično-dvošupljinskih (2p–2h) konfiguracija: 60, 90, 120, 150 i 180 MeV.	110
6.2	Diskretna raspodjela snage ISGMR za jezgru ^{16}O	111
6.3	Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGMR.	115
6.4	Isto kao na slici 6.2, ali za raspodjelu snage IVGMR.	116
6.5	Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage ISGQR.	117
6.6	Isto kao na slici 6.2, ali za raspodjelu snage ISGQR.	118
6.7	Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGQR.	122
6.8	Isto kao na slici 6.2, ali za raspodjelu snage IVGQR.	123
6.9	Kumulativna snaga u slučaju ISGMR i IVGMR u jezgri ^{16}O	124
6.10	Kumulativna snaga u slučaju ISGQR i IVGQR u jezgri ^{16}O	125
6.11	Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 14$	137
6.12	Isto kao na slici 6.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 14$	138
6.13	Isto kao na slici 6.1, ali za raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 20$	139
6.14	Isto kao na slici 6.2, ali za diskretnu raspodjelu snage IVGDR u ^{16}O za $N = 20$	140
6.15	Evolucija spurioznog stanja za RSSRPA i RSSRPA(d) za ISGDR u jezgri ^{16}O , prikazana za dvije baze harmoničkog oscilatora, $N = 14$ i $N = 20$	144
6.16	Evolucija položaja prva dva niskoležeća stanja 2p–2h prirode s porastom energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija za 0^+ pobuđenja u ^{16}O	145
6.17	Evolucija položaja prva tri niskoležeća stanja 2p–2h prirode s porastom energijskog odsječka 2p–2h konfiguracija za 2^+ prijelaze u RSSRPA računu za ^{16}O	146
7.1	Problem infracrvene nestabilnosti u ^{40}Ca za ISGQR. Preuzeto iz rada [223] i prilagođeno na hrvatski jezik, u skladu s licencom <i>Creative Commons Attribution 4.0 (CC BY 4.0)</i>	147

7.2	Položaji prvog niskoležećeg 0^+ stanja u ^{16}O izračunati pomoću različitih teorijskih pristupa (RSRPA, RSSRPA i RRPA), u usporedbi s eksperimentalnim rezultatom iz ref. [234].	149
7.3	Usporedba položaja najnižih stanja u slučaju 0^+ i 2^+ prijelaza u ^{16}O . Preuzeto uz dopuštenje iz [117]. <i>Copyright (2015) by the American Physical Society.</i> . . .	149
7.4	Položaji niskoležećih pobuđenih 2^+ stanja u ^{16}O izračunati pomoću RSSRPA(d), RSSRPA i RRPA, prikazani za DD-PCX i DD-PC1 parametrizacije EDF-a, u usporedbi s eksperimentalnim rezultatom iz ref. [234].	150
7.5	Momenti raspodjele za SRPA, SSRPA i SSRPA(d) za ISGQR. Preuzeto uz dopuštenje iz [117]. <i>Copyright (2015) by the American Physical Society.</i>	156

Popis tablica

2.1	Eksperimentalno određeni parametri izovektorske gigantske dipolne rezonancije (IVGDR) za ^{16}O . Navedeni su centroid energije E_0 , širina Γ , udio ispunjenja TRK (EWSR) i energijski prozor integracije. Navedeni parametri IVGDR-a preuzeti su iz kompilacije Plujka i suradnika [38].	25
3.1	Parametrizacija DD-PC1 za kontakti oblik funkcionala [45], gdje se a_i , b_i , c_i i d_i odnosi na funkcionalnu ovisnost četverofermionskog vezanja o gustoći, a δ_i na konstante vezanja derivativnih članova. Oznake S, V i TV označavaju izoskalaro-skalarni, izoskalaro-vektorski i izovektorsko-vektorski kanal. . . .	45
3.2	Parametri vezanja za kontakti oblik funkcionala DD-PCX. Oznake S, V i TV imaju isto značenje kao u tablici 3.1. Vrijednost mase nukleona je 939.0 MeV, a gustoća saturacije postavljena je na 0.152 fm^{-3} . Jakosti sparivanja opisanog separabilnim međudjelovanjem za neutrone i protone označene su s G_n i G_p [51].	48
4.1	Osnovni Diracovi bilineari i njihovi pripadni operatori.	68
5.1	Energijski momenti izoskalarinih 0^+ prijelaza dobiveni pomoću RTDA, RSS-TDA(d) i RSSTDA za ^{16}O primjenom DD-PCX kontaktnog međudjelovanja. Za RSSTDA(d) i RSSTDA korišten je energijski odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 150 \text{ MeV}$. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	86
5.2	Slično kao u tablici 5.1, ali unutar energijskog prozora pobuđenja od 11 do 40 MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	86
5.3	Slično kao u tablici 5.1, ali za ISGQR u ^{16}O . Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	93
5.4	Slično kao u tablici 5.2, ali za ISGQR u ^{16}O , izračunato u energijskom intervalu od 11 do 40 MeV dostupnom eksperimentu. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	93
5.5	Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) parova i njihovi udjeli u normi u slučaju RTDA za 0^+ stanje na $E = 17.30 \text{ MeV}$	98
5.6	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA za 0^+ stanje na $E = 14.64 \text{ MeV}$.	99
5.7	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA za 0^+ stanje na $E = 16.83 \text{ MeV}$.	100
5.8	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA za 0^+ stanje na $E = 21.91 \text{ MeV}$.	101
5.9	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA za 0^+ stanje na $E = 21.61 \text{ MeV}$.	102

5.10	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 15.09$ MeV.	104
5.11	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 23.01$ MeV.	105
5.12	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 16.91$ MeV.	105
5.13	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSTDA(d) za 0^+ stanje na $E = 21.84$ MeV.	106
5.14	Dominantne 2p–2h konfiguracije i pojedinačni doprinosi normi RSTDA stanja na $E = 4.41$ MeV.	107
5.15	Dominantne 2p–2h konfiguracije i pojedinačni doprinosi normi RSSTDA stanja na $E = 4.49$ MeV.	108
6.1	Energijski momenti izoskalarnih monopolnih prijelaza (0^+) dobiveni pomoću RRPA, RSSRPA(d) i RSSRPA za ^{16}O primjenom DD-PC1 kontaktnog međudjelovanja. Za RSSRPA(d) i RSSRPA korišten je energijski odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 150$ MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	113
6.2	Slično kao u tablici 6.1, ali unutar energijskog prozora pobuđenja od 11 do 40 MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	113
6.3	Slično kao u tablici 6.1, ali za ISGQR u ^{16}O . Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	119
6.4	Slično kao u tablici 6.1, ali za ISGQR unutar energijskog prozora pobuđenja od 11 do 40 MeV. Eksperimentalne vrijednosti preuzete su iz [23].	120
6.5	Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) parova i njihovi doprinosi u slučaju RRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 17.66$ MeV.	126
6.6	Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) i dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije te njihovi doprinosi normi u slučaju RSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 14.86$ MeV.	127
6.7	Konfiguracije čestica–šupljina (1p–1h) i dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije te njihovi doprinosi normi u slučaju RSSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 17.08$ MeV.	128
6.8	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično–dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 21.21$ MeV.	129

6.9	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično-dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSRPA za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 22.42$ MeV.	130
6.10	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično-dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSRPA(d) za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 15.51$ MeV.	131
6.11	Jednočestično–jednošupljinske (p–h) i dvočestično-dvošupljinske konfiguracije (2p–2h) s doprinosima normi u slučaju RSSRPA(d) za 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 17.28$ MeV.	132
6.12	Dominantne 1p–1h i 2p–2h konfiguracije s doprinosima normi za RSRPA(d) 0^+ pobuđeno stanje u ^{16}O na $E_x = 21.28$ MeV.	133
6.13	Dominantne jednočestično–jednošupljinske (1p–1h) i dvočestično–dvošupljinske (2p–2h) konfiguracije s doprinosima normi za RSSRPA(d) 0^+ stanje u ^{16}O na $E_x = 22.72$ MeV.	134
6.14	Dominantne 2p–2h konfiguracije i njihovi doprinosi normi u slučaju RSRPA za pobuđeno 0^+ stanje u ^{16}O na 3.91 MeV.	135
6.15	Dominantne 2p–2h konfiguracije i njihovi doprinosi normi u slučaju RSSRPA za pobuđeno 0^+ stanje u ^{16}O na 3.97 MeV.	136
6.16	Karakteristične energije za IVGDR u ^{16}O za energijski odsječak 2p–2h konfiguracija $E_{\text{cutoff}} = 140$ MeV za pozitivni dio energijskog spektra, za glavne kvantne brojeve $N = 14$ i $N = 20$	141
6.17	Slično kao u tablici 6.16, ali izračunato unutar energijskog prozora 11–40 MeV.	142
7.1	Energijski moment m_0 za ISGMR u ^{16}O u različitim aproksimacijama (RT-DA/RRPA, dijagonalna aproksimacija i puni oblik RSSTDA i RSSRPA), za DD-PCX i DD-PC1 parametrizaciju. U zagradama su prikazane vrijednosti unutar eksperimentalnog prozora iz [23].	151
7.2	Slično kao u tablici 7.1, ali za energijski moment m_1 za ISGMR u ^{16}O	152
7.3	Slično kao u tablici 7.1, ali za energijski moment m_{-1} za ISGMR u ^{16}O	152
7.4	Slično kao u tablici 7.1, ali za energiju centroida (omjer m_1/m_0) za ISGMR u ^{16}O . Eksperimentalna vrijednost preuzeta je iz rada [23].	153
7.5	Slično kao u tablici 7.1, samo za energijski moment m_0 za ISGQR u ^{16}O	154
7.6	Slično kao u tablici 7.1, samo za energijski moment m_1 za ISGQR u ^{16}O	155
7.7	Slično kao u tablici 7.1, samo za energijski moment m_{-1} za ISGQR u ^{16}O	156
7.8	Slično kao u tablici 7.1, ali za centroid energije (omjer m_1/m_0) za ISGQR u ^{16}O . Eksperimentalna vrijednost preuzeta je iz rada [23].	157

Literatura

- [1] G. C. Baldwin and G. S. Klaiber, [Phys. Rev. **71**, 3 \(1947\)](#).
- [2] N. A. Burgov, G. V. Danilyan, B. S. Dolbilkin, L. E. Lazareva, and F. A. Nikolaev, Soviet Physics JETP **16**, 50 (1963), english translation of Zh. Eksp. Teor. Fiz.
- [3] R. L. Bramblett, J. T. Caldwell, R. R. Harvey, and S. C. Fultz, [Phys. Rev. **133**, B869 \(1964\)](#).
- [4] B. S. Dolbilkin, V. A. Zapevalov, V. I. Korin, L. E. Lazareva, and F. A. Nikolaev, Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Fizicheskaya **30**, 349 (1966), english translation: Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser. 30(2) (1966) 354.
- [5] J. M. Wyckoff, B. Ziegler, H. W. Koch, and R. Uhlig, [Phys. Rev. **137**, B576 \(1965\)](#).
- [6] N. Bezić, D. Brajnik, D. Jamnik, and G. Kernel, [Nucl. Phys. A **128**, 426 \(1969\)](#).
- [7] T. W. Phillips and R. G. Johnson, [Phys. Rev. C **20**, 1689 \(1979\)](#).
- [8] J. Ahrens, H. Borchert, H. B. Eppler, H. Gimm, and H. Gundrum, in *Proceedings of the International Conference on Nuclear Structure Studies Using Electron Scattering and Photoreaction* (Sendai, Japan, 1972) p. 213.
- [9] J. Ahrens, H. Borchert, K. Czock, H. Eppler, H. Gimm, H. Gundrum, M. Kröning, P. Riehn, G. Sita Ram, A. Zieger, and B. Ziegler, [Nucl. Phys. A **251**, 479 \(1975\)](#).
- [10] B. L. Berman and S. C. Fultz, [Rev. Mod. Phys. **47**, 713 \(1975\)](#).
- [11] M. Harakeh, A. Arends, M. De Voigt, A. Drentje, S. Van der Werf, and A. Van Der Woude, [Nucl. Phys. A **265**, 189 \(1976\)](#).
- [12] D. H. Youngblood, C. M. Rozsa, J. M. Moss, D. R. Brown, and J. D. Bronson, [Phys. Rev. Lett. **39**, 1188 \(1977\)](#).
- [13] M. Ulrickson, N. Benczer-Koller, J. R. MacDonald, and J. W. Tape, [Phys. Rev. C **15**, 186 \(1977\)](#).
- [14] A. Erell, J. Alster, J. Lichtenstadt, M. A. Moinester, J. D. Bowman, M. D. Cooper, F. Irom, H. S. Matis, E. Piasetzky, and U. Sennhauser, [Phys. Rev. C **34**, 1822 \(1986\)](#).
- [15] G. O’Keefe, M. Thompson, Y. Assafiri, R. Pywell, and K. Shoda, [Nucl. Phys. A **469**, 239 \(1987\)](#).
- [16] S. Nakayama, T. Yamagata, M. Tanaka, M. Inoue, K. Yuasa, T. Itahashi, H. Ogata, N. Koori, K. Shima, and M. B. Greenfield, [Phys. Rev. C **46**, 1667 \(1992\)](#).
- [17] I. Lhenry, [Nucl. Phys. A **599**, 245 \(1996\)](#), proceedings of the Groningnen Conference on Giant Resonances.

- [18] D. A. Sims, G. J. O’Keefe, R. P. Rassool, A. Kuzin, M. N. Thompson, J.-O. Adler, B.-E. Andersson, K. G. Fissum, K. Hansen, L. Isaksson, B. Nilsson, H. Ruijter, A. Sandell, B. Schröder, J. R. M. Annand, G. I. Crawford, P. D. Harty, J. C. McGeorge, and G. J. Miller, [Phys. Rev. C **55**, 1288 \(1997\)](#).
- [19] D. H. Youngblood, Y.-W. Lui, and H. L. Clark, [Phys. Rev. C **55**, 2811 \(1997\)](#).
- [20] T. Annakkage, J. Jänecke, J. Winfield, G. Berg, J. Brown, G. Crawley, S. Danczyk, M. Fujiwara, D. Mercer, K. Pham, D. Roberts, J. Stasko, and G. Yoo, [Nucl. Phys. A **648**, 3 \(1999\)](#).
- [21] S. Nakayama, H. Akimune, Y. Arimoto, I. Daito, H. Fujimura, Y. Fujita, M. Fujiwara, K. Fushimi, H. Kohri, N. Koori, K. Takahisa, T. Takeuchi, A. Tamii, M. Tanaka, T. Yamagata, Y. Yamamoto, K. Yonehara, and H. Yoshida, [Phys. Rev. Lett. **83**, 690 \(1999\)](#).
- [22] D. H. Youngblood, H. L. Clark, and Y.-W. Lui, [Phys. Rev. Lett. **82**, 691 \(1999\)](#).
- [23] Y.-W. Lui, H. L. Clark, and D. H. Youngblood, [Phys. Rev. C **64**, 064308 \(2001\)](#).
- [24] D. H. Youngblood, Y.-W. Lui, and H. L. Clark, [Phys. Rev. C **63**, 067301 \(2001\)](#).
- [25] D. H. Youngblood, Y.-W. Lui, and H. L. Clark, [Phys. Rev. C **64**, 049901 \(2001\)](#).
- [26] B. S. Ishkhanov, I. M. Kapitonov, E. I. Lileeva, E. V. Shirokov, V. A. Erokhova, M. A. Elkin, and A. V. Izotova, *Cross sections of photon absorption by nuclei with nucleon numbers 12–65*, Tech. Rep. MSU-INP-2002-27/711 (Institute of Nuclear Physics, Moscow State University, 2002) unpublished report.
- [27] T. Hartmann, J. Enders, P. Mohr, K. Vogt, S. Volz, and A. Zilges, [Phys. Rev. C **65**, 034301 \(2002\)](#).
- [28] V. A. Erokhova, M. A. Elkin, A. V. Izotova, B. S. Ishkhanov, I. M. Kapitonov, E. I. Lileeva, and E. V. Shirokov, *Izvestiya Rossiiskoi Akademii Nauk, Seriya Fizicheskaya* **67**, 1479 (2003).
- [29] M. Uchida, H. Sakaguchi, M. Itoh, M. Yosoi, T. Kawabata, Y. Yasuda, H. Takeda, T. Murakami, S. Terashima, S. Kishi, U. Garg, P. Boutachkov, M. Hedden, B. Kharraja, M. Koss, B. K. Nayak, S. Zhu, M. Fujiwara, H. Fujimura, H. P. Yoshida, K. Hara, H. Akimune, and M. N. Harakeh, [Phys. Rev. C **69**, 051301 \(2004\)](#).
- [30] D. H. Youngblood, Y.-W. Lui, H. L. Clark, B. John, Y. Tokimoto, and X. Chen, [Phys. Rev. C **69**, 034315 \(2004\)](#).
- [31] J. Guillot, [Phys. At. Nucl. **70**, 1392 \(2007\)](#).
- [32] A. Tamii, I. Poltoratska, P. von Neumann-Cosel, Y. Fujita, and T. t. Adachi, [Phys. Rev. Lett. **107**, 062502 \(2011\)](#).
- [33] Y.-W. Lui, D. H. Youngblood, S. Shlomo, X. Chen, Y. Tokimoto, Krishichayan, M. Anders, and J. Button, [Phys. Rev. C **83**, 044327 \(2011\)](#).

- [34] D. Savran, T. Aumann, and A. Zilges, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **70**, 210 (2013).
- [35] J. Birkhan, M. Miorelli, S. Bacca, S. Bassauer, C. A. Bertulani, G. Hagen, H. Matsubara, P. von Neumann-Cosel, T. Papenbrock, N. Pietralla, V. Y. Ponomarev, A. Richter, A. Schwenk, and A. Tamii, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 252501 (2017).
- [36] K. Howard, U. Garg, M. Itoh, H. Akimune, S. Bagchi, T. Doi, Y. Fujikawa, M. Fujiwara, T. Furuno, M. Harakeh, Y. Hijikata, K. Inaba, S. Ishida, N. Kalantar-Nayestanaki, T. Kawabata, S. Kawashima, K. Kitamura, N. Kobayashi, Y. Matsuda, A. Nakagawa, S. Nakamura, K. Nosaka, S. Okamoto, S. Ota, S. Weyhmler, and Z. Yang, *Phys. Lett. B* **801**, 135185 (2020).
- [37] R. W. Fearick, P. von Neumann-Cosel, S. Bacca, J. Birkhan, F. Bonaiti, I. Brandherm, G. Hagen, H. Matsubara, W. Nazarewicz, N. Pietralla, V. Y. Ponomarev, P.-G. Reinhard, X. Roca-Maza, A. Richter, A. Schwenk, J. Simonis, and A. Tamii, *Phys. Rev. Res.* **5**, L022044 (2023).
- [38] V. A. Plujko, O. M. Gorbachenko, R. Capote, and P. Dimitriou, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **123–124**, 1 (2018), "Extended and updated compilation of experimental IVGDR parameters based on photoabsorption data available up to June 2017".
- [39] B. S. Ishkhanov and I. M. Kapitonov, *Phys. Usp.* **64**, 141 (2021).
- [40] M. Goldhaber and E. Teller, *Phys. Rev.* **74**, 1046 (1948).
- [41] H. Steinwedel, J. H. D. Jensen, and P. Jensen, *Phys. Rev.* **79**, 1019 (1950).
- [42] S. Typel and H. Wolter, *Nucl. Phys. A* **656**, 331 (1999).
- [43] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Finelli, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **66**, 024306 (2002).
- [44] G. A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **71**, 024312 (2005).
- [45] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **78**, 034318 (2008).
- [46] H. Liang, *Nuclear charge-exchange excitations in a self-consistent covariant approach*, Ph.d. thesis, Université Paris Sud - Paris XI, France (2010), available at: <https://theses.hal.science/tel-00506913>.
- [47] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **66**, 519 (2011).
- [48] N. Paar, Y. F. Niu, D. Vretenar, and J. Meng, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 032502 (2009).
- [49] I. Daoutidis and P. Ring, *Phys. Rev. C* **83**, 044303 (2011).
- [50] Y. F. Niu, Z. M. Niu, G. Colò, and E. Vigezzi, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 142501 (2015).
- [51] E. Yüksel, T. Marketin, and N. Paar, *Phys. Rev. C* **99**, 034318 (2019).
- [52] E. G. Lanza, L. Pellegri, A. Vitturi, and M. V. Andrés, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **129**, 104006 (2023).
- [53] K. G. Balasi, K. Langanke, and G. Martínez-Pinedo, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **85**, 33 (2015).

- [54] K. Langanke and G. Martinez-Pinedo, [Eur. Phys. J. A **55**, 226 \(2019\)](#).
- [55] D. Vale, N. Paar, T. Nikšić, and Y. Niu, in *10. znanstveni sastanak Hrvatske fizičke djelatnosti* (Hrvatsko fizikalno društvo, Baška, Hrvatska, 2017) p. 93.
- [56] N. Paar, D. Vretenar, T. Marketin, and P. Ring, [Phys. Rev. C **77**, 024608 \(2008\)](#).
- [57] H. Đapo and N. Paar, [Phys. Rev. C **86**, 035804 \(2012\)](#).
- [58] D. Vale and N. Paar, in *AIP Conference Proceedings*, Vol. 1681 (American Institute of Physics, 2015) p. 050011.
- [59] D. Vale, T. Rauscher, and N. Paar, [J. Cosmol. Astropart. Phys. **2016** \(02\), 007](#).
- [60] N. Paar, T. Marketin, D. Vale, and D. Vretenar, [Int. J. Mod. Phys. E **24**, 1541004 \(2015\)](#).
- [61] D. Vale, Y. F. Niu, and N. Paar, [Phys. Rev. C **103**, 064307 \(2021\)](#).
- [62] T. Marketin, L. Huther, and G. Martínez-Pinedo, [Phys. Rev. C **93**, 025805 \(2016\)](#).
- [63] N. Popara, A. Ravlić, and N. Paar, [Phys. Rev. C **105**, 064315 \(2022\)](#).
- [64] J. D. Walecka, *Theoretical Nuclear and Subnuclear Physics*, 2nd ed., Oxford Studies in Nuclear Physics, Vol. 16 (Oxford University Press, 1995).
- [65] L. N. Savushkin and H. Toki, *The Atomic Nucleus as a Relativistic System*, Theoretical and Mathematical Physics (Springer, 2004).
- [66] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring, [Comp. Phys. Comm. **185**, 1808 \(2014\)](#).
- [67] T. Bürvenich, D. G. Madland, J. A. Maruhn, and P.-G. Reinhard, [Phys. Rev. C **65**, 044308 \(2002\)](#).
- [68] D. Bohm and D. Pines, [Phys. Rev. **82**, 625 \(1951\)](#).
- [69] D. Pines and D. Bohm, [Phys. Rev. **85**, 338 \(1952\)](#).
- [70] D. Bohm and D. Pines, [Phys. Rev. **92**, 609 \(1953\)](#).
- [71] J. Lindhard, *Matematisk-Fysiske Meddelelser* **28** (1954).
- [72] D. Pines and P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids: Normal Fermi Liquids* (W. A. Benjamin, New York, 1966).
- [73] D. J. Rowe, *Nuclear Collective Motion – Models and Theory* (Methuen and Co. Ltd., London, 1970).
- [74] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
- [75] V. O. Nesterenko, J. Kvasil, and P.-G. Reinhard, [Phys. Rev. C **66**, 044307 \(2002\)](#), sRPA applied to Skyrme density and current dependent functionals.

- [76] V. O. Nesterenko, J. Kvasil, and P.-G. Reinhard, in *Density Functional Methods in Physics*, edited by J. Dobaczewski and V. O. Nesterenko (World Scientific, 2005) pp. 202–221, formalism and analytical expressions for spherical and deformed systems.
- [77] J. Suhonen, *From Nucleons to Nucleus: Concepts of Microscopic Nuclear Theory*, Theoretical and Mathematical Physics (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007).
- [78] M. R. Anders, S. Shlomo, T. Sil, D. H. Youngblood, Y.-W. Lui, and Krishichayan, *Phys. Rev. C* **87**, 024303 (2013).
- [79] A. Repko, *Theoretical description of nuclear collective excitations*, *Ph.d. thesis*, Charles University in Prague (2016).
- [80] M. Frosini, W. Ryssens, and K. Sieja, *Phys. Rev. C* **110**, 014307 (2024).
- [81] N. N. Bogoliubov, *Journal of Physics (USSR)* **11**, 23 (1947).
- [82] J. G. Valatin, *Il Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).
- [83] A. P. Severyukhin, V. V. Voronov, C. Stoyanov, and N. V. Giai, *Phys. At. Nucl.* **66**, 1434 (2003).
- [84] N. Paar, P. Ring, T. Nikšić, and D. Vretenar, *Phys. Rev. C* **67**, 034312 (2003).
- [85] N. Paar, T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **69**, 054303 (2004).
- [86] N. Paar, D. Vretenar, T. Nikšić, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **74**, 037303 (2006).
- [87] I. Daoutidis and S. Goriely, *Phys. Rev. C* **86**, 034328 (2012), arXiv:1209.5956 [nucl-th] .
- [88] P.-G. Reinhard, V. O. Nesterenko, A. Repko, and J. Kvasil, *Phys. Rev. C* **89**, 024321 (2014).
- [89] E. V. Litvinova and A. V. Afanasjev, *Phys. Rev. C* **84**, 014305 (2011).
- [90] Y. F. Niu, G. Colò, M. Brenna, P. F. Bortignon, and J. Meng, *Phys. Rev. C* **85**, 034314 (2012).
- [91] P. Veselý, D. Denisova, F. Knapp, and F. Šimkovic, *Acta Phys. Polon. Supp.* **18**, 2 (2025).
- [92] V. G. Soloviev, *Theory of Atomic Nuclei: Quasiparticles and Phonons*, 1st ed. (CRC Press, 1992).
- [93] N. Tsoneva, H. Lenske, and C. Stoyanov, *Phys. Lett. B* **586**, 213 (2004).
- [94] N. Tsoneva and H. Lenske, *Phys. Rev. C* **77**, 024321 (2008).
- [95] G. De Gregorio, F. Knapp, N. Lo Iudice, and P. Veselý, *Phys. Rev. C* **93**, 044314 (2016).
- [96] G. De Gregorio, F. Knapp, N. Lo Iudice, and P. Veselý, *Phys. Rev. C* **97**, 034311 (2018).
- [97] G. De Gregorio, F. Knapp, N. Lo Iudice, and P. Veselý, *Phys. Lett. B* **821**, 136636 (2021).
- [98] N. Paar, D. Vretenar, E. Khan, and G. Colò, *Rep. Prog. Phys.* **70**, R02 (2007).

- [99] E. Litvinova, P. Ring, and V. Tselyaev, [Phys. Rev. Lett. **105**, 022502 \(2010\)](#).
- [100] G. Colò and P. F. Bortignon, [Nucl. Phys. A **696**, 427 \(2001\)](#).
- [101] J. D. Providência, [Nucl. Phys. **61**, 87 \(1965\)](#).
- [102] C. P. Yannouleas, *Nuclear Dissipation as Damping of Collective Motion in the Time-Dependent RPA and Extensions of It*, Ph.d. dissertation, University of Maryland, College Park, Department of Physics and Astronomy, College Park, Maryland 20742, U.S.A. (1982).
- [103] C. Yannouleas, M. Dworzecka, and J. J. Griffin, [Nucl. Phys. A **379**, 256 \(1982\)](#).
- [104] C. Yannouleas, M. Dworzecka, and J. J. Griffin, [Nucl. Phys. A **397**, 239 \(1983\)](#).
- [105] C. Yannouleas, [Phys. Rev. C **35**, 1159 \(1987\)](#).
- [106] B. Schwesinger and J. Wambach, [Phys. Lett. B **134**, 29 \(1984\)](#).
- [107] B. Schwesinger and J. Wambach, [Nucl. Phys. A **426**, 253 \(1984\)](#).
- [108] J. Wambach, [Rep. Prog. Phys. **51**, 989 \(1988\)](#).
- [109] S. Drozdz, S. Nishizaki, J. Speth, and J. Wambach, [Phys. Rep. **197**, 1 \(1990\)](#).
- [110] P. Papakonstantinou and R. Roth, 26th International Workshop on Nuclear Theory (2007), [arXiv:0709.3167 \[nucl-th\]](#).
- [111] P. Papakonstantinou and R. Roth, [Phys. Rev. C **81**, 024317 \(2010\)](#).
- [112] D. Gambacurta, M. Grasso, and F. Catara, [Phys. Rev. C **81**, 054312 \(2010\)](#).
- [113] D. Gambacurta, M. Grasso, and F. Catara, [Phys. Rev. C **84**, 034301 \(2011\)](#).
- [114] F. Minato, [Phys. Rev. C **93**, 044319 \(2016\)](#).
- [115] D. Gambacurta, M. Grasso, and O. Vasseur, [Phys. Lett. B **777**, 163 \(2018\)](#).
- [116] D. Gambacurta, M. Grasso, V. De Donno, G. Co', and F. Catara, [Phys. Rev. C **86**, 021304 \(2012\)](#).
- [117] D. Gambacurta, M. Grasso, and J. Engel, [Phys. Rev. C **92**, 034303 \(2015\)](#).
- [118] O. Vasseur, D. Gambacurta, and M. Grasso, [Phys. Rev. C **98**, 044313 \(2018\)](#).
- [119] M. J. Yang, C. L. Bai, H. Sagawa, and H. Q. Zhang, [Phys. Rev. C **103**, 054308 \(2021\)](#).
- [120] M. J. Yang, C. L. Bai, H. Sagawa, and H. Q. Zhang, [Phys. Rev. C **109**, 054319 \(2024\)](#).
- [121] D. Gambacurta, M. Grasso, and J. Engel, [Phys. Rev. Lett. **125**, 212501 \(2020\)](#).
- [122] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, [Phys. Rev. C **72**, 014312 \(2005\)](#).

- [123] J. Daoutidis, *Continuum Random Phase Approximation for Relativistic Point Coupling Models*, [Ph.d. thesis](#), Technische Universität München (2009), supervisor: P. Ring.
- [124] G. Kruzić, T. Oishi, D. Vale, and N. Paar, [Phys. Rev. C **102**, 044315 \(2020\)](#).
- [125] T. Oishi, G. Kruzić, and N. Paar, [J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **47**, 115106 \(2020\)](#).
- [126] T. Oishi, G. Kruzić, and N. Paar, [J. Phys. Conf. Ser. **1643**, 012153 \(2020\)](#).
- [127] M. Buenerd, P. Martin, P. de Saintignon, and J. M. Loiseaux, [Phys. Rev. C **14**, 1316 \(1976\)](#).
- [128] D. G. Mavis, H. F. Glavish, and D. C. Slater, in *Proceedings of the Fourth International Symposium on Polarization Phenomena in Nuclear Reactions*, edited by W. Grüebler and V. König (Birkhäuser Basel, Basel, 1976) pp. 749–750.
- [129] J. Rainwater, [Phys. Rev. **79**, 432 \(1950\)](#).
- [130] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **27**, 1 (1953).
- [131] The Nobel Foundation, The Nobel Prize in Physics 1975: Aage Bohr, Ben R. Mottelson, and James Rainwater, NobelPrize.org (1975), <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1975/summary/>.
- [132] M. N. Harakeh and A. van der Woude, *Giant Resonances: Fundamental High-Frequency Modes of Nuclear Excitation*, Oxford Studies in Nuclear Physics, Vol. 24 (Oxford University Press, Oxford, 2001).
- [133] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure: Nuclear Deformations (Vol. II)* (World Scientific Publishing Company, Singapore, 1998).
- [134] G. F. Bertsch and R. A. Broglia, *Oscillations in Finite Quantum Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- [135] T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuo, and K. Yabana, [Rev. Mod. Phys. **88**, 045004 \(2016\)](#).
- [136] G. F. Bertsch, P. F. Bortignon, and R. A. Broglia, [Rev. Mod. Phys. **55**, 287 \(1983\)](#).
- [137] J. Carter, L. Donaldson, H. Fujita, Y. Fujita, M. Jingo, C. Kureba, M. Latif, E. Litvinova, F. Nemulodi, P. von Neumann-Cosel, R. Neveling, P. Papakonstantinou, P. Papka, L. Pellegri, V. Ponomarev, A. Richter, R. Roth, E. Sideras-Haddad, F. Smit, J. Swartz, A. Tamii, R. Trippel, I. Usman, and H. Wibowo, [Phys. Lett. B **833**, 137374 \(2022\)](#).
- [138] E. Ramakrishnan, *Giant Dipole Resonance in Highly Excited ^{208}Pb Nuclei*, Ph.d. dissertation, Michigan State University, East Lansing, MI (1995), department of Physics and Astronomy.
- [139] T. Kibédi, B. Alshahrani, A. E. Stuchbery, A. C. Larsen, A. Görgen, S. Siem, M. Guttormsen, F. Giacoppo, A. I. Morales, E. Sahin, G. M. Tveten, F. L. B. Garrote, L. C. Campo, T. K. Eriksen, M. Klintefjord, S. Maharramova, H.-T. Nyhus, T. G. Tornyi, T. Renstrøm, and W. Paulsen, [Phys. Rev. Lett. **125**, 182701 \(2020\)](#).

- [140] K. A. Snover, [Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **36**, 545 \(1986\)](#).
- [141] K. Boretzky, A. Grünschloß, S. Ilievski, P. Adrich, T. Aumann, C. A. Bertulani, J. Cub, W. Dostal, B. Eberlein, T. W. Elze, H. Emling, M. Fallot, J. Holeczek, R. Holzmann, C. Kozhuharov, J. V. Kratz, R. Kulessa, Y. Leifels, A. Leistenschneider, E. Lubkiewicz, S. Mordechai, T. Ohtsuki, P. Reiter, H. Simon, K. Stelzer, J. Stroth, K. Sümmerer, A. Surowiec, E. Wajda, and W. Walus (LAND Collaboration), [Phys. Rev. C **68**, 024317 \(2003\)](#).
- [142] P. Chomaz, Collective excitations in nuclei, <https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/347319> (1998), lecture notes.
- [143] J. S. Dehesa, S. Krewald, J. Speth, and A. Faessler, [Phys. Rev. C **15**, 1858 \(1977\)](#).
- [144] D. H. Youngblood, P. Bogucki, J. D. Bronson, U. Garg, Y.-W. Lui, and C. M. Rozsa, [Phys. Rev. C **23**, 1997 \(1981\)](#).
- [145] D. Vretenar, Y. F. Niu, N. Paar, and J. Meng, [Phys. Rev. C **85**, 044317 \(2012\)](#).
- [146] D. Vale and N. Paar, [Phys. Rev. C **112**, 034327 \(2025\)](#).
- [147] K. A. Brueckner, [Phys. Rev. **97**, 1353 \(1955\)](#).
- [148] P. Danielewicz, [Ann. Phys. **152**, 239 \(1984\)](#).
- [149] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, 2nd ed., Course of Theoretical Physics, Vol. 6 (Pergamon Press, Oxford, 1987).
- [150] G. F. Bertsch and S. D. Gupta, [Phys. Rep. **160**, 189 \(1988\)](#).
- [151] W. Pauli, [Zeitschrift für Physik **31**, 765 \(1925\)](#).
- [152] P. von Neumann-Cosel, V. Y. Ponomarev, A. Richter, and J. Wambach, [Eur. Phys. J. A **55**, 224 \(2019\)](#).
- [153] C. Simenel, [Eur. Phys. J. A **48**, 152 \(2012\)](#), review article, [arXiv:1209.3375 \[nucl-th\]](#) .
- [154] V. Y. Ponomarev, [On "the authentic damping mechanism" of the phonon damping model. ii](#) (2002), arXiv preprint, [arXiv:nucl-th/0202058 \[nucl-th\]](#) .
- [155] D. Santonocito and Y. Blumenfeld, [Eur. Phys. J. A **30**, 183 \(2006\)](#).
- [156] G. Rusev, N. Tsoneva, F. Dönau, S. Frauendorf, R. Schwengner, A. P. Tonchev, A. S. Adekola, S. L. Hammond, J. H. Kelley, E. Kwan, H. Lenske, W. Tornow, and A. Wagner, [Phys. Rev. Lett. **110**, 022503 \(2013\)](#).
- [157] M. Jingo, E. Z. Buthelezi, J. Carter, G. R. J. Cooper, R. W. Fearick, S. V. Förtsch, C. O. Kureba, A. M. Krumbholz, P. von Neumann-Cosel, R. Neveling, P. Papka, I. Poltoratska, V. Y. Ponomarev, A. Richter, E. Sideras-Haddad, F. D. Smit, J. A. Swartz, A. Tamii, and I. T. Usman, [Eur. Phys. J. A **54**, 234 \(2018\)](#).

- [158] L. D. Landau, *Journal of Physics (USSR)* **10**, 25 (1946).
- [159] I. Poltoratska, R. W. Fearick, A. M. Krumbholz, E. Litvinova, H. Matsubara, P. von Neumann-Cosel, V. Y. Ponomarev, A. Richter, and A. Tamii, *Phys. Rev. C* **89**, 054322 (2014).
- [160] I. Usman, Z. Buthelezi, J. Carter, G. Cooper, R. Fearick, S. Förtsch, H. Fujita, Y. Fujita, Y. Kalmikov, P. von Neumann-Cosel, R. Neveling, P. Papakonstantinou, A. Richter, R. Roth, A. Shevchenko, E. Sideras-Haddad, and F. Smit, *Phys. Lett. B* **698**, 191 (2011).
- [161] A. Bahini, P. von Neumann-Cosel, J. Carter, I. T. Usman, N. N. Arsenyev, A. P. Severyukhin, E. Litvinova, R. W. Fearick, R. Neveling, P. Adsley, N. Botha, J. W. Brümmer, L. M. Donaldson, S. Jongile, T. C. Khumalo, M. B. Latif, K. C. W. Li, P. Z. Mabika, P. T. Molema, C. S. Moodley, S. D. Olorunfunmi, P. Papka, L. Pellegri, B. Rebeiro, E. Sideras-Haddad, F. D. Smit, S. Triambak, M. Wiedeking, and J. J. van Zyl, *Phys. Rev. C* **109**, 014325 (2024).
- [162] S. Edwards, D. Robson, T. L. Talley, W. J. Thompson, and M. F. Werby, *Phys. Rev. C* **8**, 456 (1973).
- [163] P. D. Kunz and E. Rost, in *Computational Nuclear Physics 2 — Nuclear Reactions*, edited by K. Langanke, J. A. Maruhn, and S. E. Koonin (Springer, 1993) pp. 88–107.
- [164] N. Keeley, K. W. Kemper, and D. T. Khoa, *Nucl. Phys. A* **726**, 159 (2003).
- [165] G. Potel, F. Barranco, E. Vigezzi, and R. A. Broglia, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 172502 (2010).
- [166] J. Nolen, J. Schiffer, and N. Williams, *Phys. Lett. B* **27**, 1 (1968).
- [167] A. Tamii, P. von Neumann-Cosel, and I. Poltoratska, *Eur. Phys. J. A* **50**, 28 (2014).
- [168] A. Bracco, E. Lanza, and A. Tamii, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **106**, 360 (2019).
- [169] J. Carter, H. Diesener, U. Helm, G. Herbert, P. von Neumann-Cosel, A. Richter, G. Schrieder, and S. Strauch, *Nucl. Phys. A* **696**, 317 (2001).
- [170] T. N. Leite and N. Teruya, *Braz. J. Phys.* **36**, 1149 (2006).
- [171] G. Scamps and D. Lacroix, *Phys. Rev. C* **88**, 044310 (2013).
- [172] U. Garg and G. Colò, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **101**, 55 (2018).
- [173] N. Tsoneva and H. Lenske, *Phys. Lett. B* **695**, 174 (2011).
- [174] S. S. Henshaw, M. W. Ahmed, G. Feldman, A. M. Nathan, and H. R. Weller, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 222501 (2011).
- [175] K. S. Krane, *Introductory Nuclear Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1987).
- [176] J. P. Blaizot, *Phys. Rep.* **64**, 171 (1980).
- [177] U. Garg and G. Colò, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **101**, 55 (2018).

- [178] S. Goriely, [Phys. Lett. B](#) **436**, 10 (1998).
- [179] O. Bohigas, A. M. Lane, and J. Martorell, [Phys. Rep.](#) **51**, 267 (1979).
- [180] P. Hohenberg and W. Kohn, [Phys. Rev.](#) **136**, B864 (1964).
- [181] W. Koch and M. C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2nd ed. (Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2001) print length: 313 pages.
- [182] W. Kohn, [Rev. Mod. Phys.](#) **71**, 1253 (1999).
- [183] R. G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (Oxford University Press, New York, 1989).
- [184] W. Kohn and L. J. Sham, [Phys. Rev.](#) **140**, A1133 (1965).
- [185] P. M. W. Gill and K. A. Perrin, [J. Chem. Phys.](#) **124**, 174101 (2006).
- [186] K. Capelle, [Braz. J. Phys.](#) **36**, 1318–1343 (2006).
- [187] D. Vautherin and D. M. Brink, [Phys. Rev. C](#) **5**, 626 (1972).
- [188] M. Beiner, H. Flocard, N. Van Giai, and P. Quentin, [Nucl. Phys. A](#) **238**, 29 (1975).
- [189] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, [Rev. Mod. Phys.](#) **75**, 121 (2003).
- [190] D. Gogny, [Nucl. Phys. A](#) **237**, 399 (1975).
- [191] J. Dechargé and D. Gogny, [Phys. Rev. C](#) **21**, 1568 (1980).
- [192] P. Ring, [Prog. Part. Nucl. Phys.](#) **37**, 193 (1996).
- [193] J. D. Walecka, [Ann. Phys.](#) **83**, 491 (1974).
- [194] P. G. Reinhard, [Rep. Prog. Phys.](#) **52**, 439 (1989).
- [195] I. Picek, *Fizika elementarnih čestica*, Udžbenici Sveučilišta u Zagrebu (Hinus, Zagreb, 1997).
- [196] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*, 3rd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg, 2000).
- [197] B. D. Serot and J. D. Walecka, *Advances in Nuclear Physics* **16**, 1 (1986).
- [198] D. Vretenar, A. V. Afanasjev, G. A. Lalazissis, and P. Ring, [Phys. Rep.](#) **409**, 101 (2005).
- [199] M. Serra, *Field Theoretical Description of Exchange Terms and Pairing Correlations in Nuclear Systems*, Phd thesis, Technische Universität München, Munich, Germany (2001).
- [200] D. Vale, *Istraživanje tokova neutrina sa supernove i neutrinских svojstava na temelju neutrino-jezgra reakcija*, Diplomski rad, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (2013), mentor: Nils Paar; CROSBID: 383234.

- [201] J. Boguta and A. Bodmer, [Nucl. Phys. A **292**, 413 \(1977\)](#).
- [202] S. Kubis and M. Kutschera, [Phys. Lett. B **399**, 191 \(1997\)](#).
- [203] X. Roca-Maza, X. Viñas, M. Centelles, P. Ring, and P. Schuck, [Phys. Rev. C **84**, 054309 \(2011\)](#).
- [204] H. Liang (2012), working notes, RIKEN Nishina Center, Wako, Japan and School of Physics, Peking University, China.
- [205] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 2000).
- [206] Y. Tian, Z. yu Ma, and P. Ring, [Phys. Lett. B **676**, 44 \(2009\)](#).
- [207] A. Tamii, I. Poltoratska, P. von Neumann-Cosel, Y. Fujita, T. Adachi, C. A. Bertulani, J. Carter, M. Dozono, H. Fujita, K. Fujita, K. Hatanaka, D. Ishikawa, M. Itoh, T. Kawabata, Y. Kalmykov, A. M. Krumbholz, E. Litvinova, H. Matsubara, K. Nakanishi, R. Neveling, H. Okamura, H. J. Ong, B. Özel-Tashenov, V. Y. Ponomarev, A. Richter, B. Rubio, H. Sakaguchi, Y. Sakemi, Y. Sasamoto, Y. Shimbara, Y. Shimizu, F. D. Smit, T. Suzuki, Y. Tameshige, J. Wambach, R. Yamada, M. Yosoi, and J. Zenihiro, [Phys. Rev. Lett. **107**, 062502 \(2011\)](#).
- [208] J. Piekarewicz, B. K. Agrawal, G. Colò, W. Nazarewicz, N. Paar, P.-G. Reinhard, X. Roca-Maza, and D. Vretenar, [Phys. Rev. C **85**, 041302\(R\) \(2012\)](#).
- [209] J. Zenihiro, H. Sakaguchi, T. Murakami, M. Yosoi, Y. Yasuda, S. Terashima, Y. Iwao, H. Takeda, M. Itoh, H. P. Yoshida, and M. Uchida, [Phys. Rev. C **82**, 044611 \(2010\)](#).
- [210] J.-P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (MIT Press, Cambridge, MA, 1986).
- [211] G. Bertsch and S. Tsai, [Phys. Rep. **18**, 125 \(1975\)](#).
- [212] D. J. ROWE, [Rev. Mod. Phys. **40**, 153 \(1968\)](#).
- [213] D. Vale, G. Saxena, and N. Paar, [Phys. Rev. C **113**, 054313 \(2026\)](#).
- [214] D. J. Thouless, [Nucl. Phys. **21**, 225 \(1960\)](#).
- [215] D. J. Thouless, [Nucl. Phys. **22**, 78 \(1961\)](#).
- [216] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, [Phys. Rev. C **66**, 064302 \(2002\)](#).
- [217] A. J. Coleman, [Can. Math. Bull. **4**, 209 \(1961\)](#).
- [218] A. J. Coleman, [Rev. Mod. Phys. **35**, 668 \(1963\)](#).
- [219] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, 2nd ed., Dover Books on Physics and Chemistry (Dover Publications, New York, 1992).
- [220] J. F. Dawson and R. J. Furnstahl, [Phys. Rev. C **42**, 2009 \(1990\)](#).

- [221] P. Ring, Z.-Y. Ma, N. Van Giai, D. Vretenar, A. Wandelt, and L.-G. Cao, *Nucl. Phys. A* **694**, 249 (2001).
- [222] D. Gambacurta, M. Grasso, and F. Catara, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **38**, 035103 (2011).
- [223] D. Vale and N. Paar, *EPJ Web Conf.* **342**, 01028 (2025).
- [224] D. Vale and N. Paar, in *Nuclear Theory, Vol. 42*, edited by M. Gaidarov and N. Minkov (Heron Press, Sofia, 2025) pp. 213–222.
- [225] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [226] B. H. Brandow, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 771 (1967).
- [227] D. Vale and N. Paar, *Zbornik Istarskog veleučilišta - Rivista dell' Università Istriana di scienze applicate* **2**, 1 (2023).
- [228] D. Vale, Y. F. Niu, and N. Paar, *Phys. Rev. C* **103**, 064307 (2021).
- [229] J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics*, 1st ed. (Springer-Verlag, New York, 1979).
- [230] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure, Vol. I: Single-Particle Motion*, reprint ed. (World Scientific, Singapore, 1998).
- [231] S. P. Pandya, *Phys. Rev.* **103**, 956 (1956).
- [232] V. I. Tselyaev, *Phys. Rev. C* **75**, 024306 (2007).
- [233] E. Runge and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997 (1984).
- [234] D. Tilley, H. Weller, and C. Cheves, *Nucl. Phys. A* **564**, 1 (1993).
- [235] M. Tohyama, *Phys. Rev. C* **87**, 054330 (2013).
- [236] LAPACK Development Team, LAPACK release notes, https://www.netlib.org/lapack/release_notes.html (2026), accessed: 13 March 2026.
- [237] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen, *LAPACK Users' Guide*, 3rd ed. (Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 1999) ISBN 0-89871-447-8.

Životopis autora

Deni Vale rođen je 13. kolovoza 1989. godine u Puli. Akademski put započinje na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu (PMF) Sveučilišta u Zagrebu, gdje je 2013. godine diplomirao na istraživačkom smjeru studija fizike. Neposredno nakon diplome, 2014. godine, upisuje doktorski studij fizike, smjer nuklearna fizika, na istom fakultetu. Svoju pedagošku kompetenciju dodatno osnažuje 2020. godine završetkom pedagoško-psihološko-didaktičko-metodičke izobrazbe na Filozofskom fakultetu u Osijeku.

Njegova profesionalna karijera obuhvaća širok raspon od fundamentalnih znanstvenih istraživanja do primijenjene nastave u visokom obrazovanju. Od 2014. do 2019. godine radio je kao asistent i doktorand na Fizičkom odsjeku PMF-a u Zagrebu, gdje je sudjelovao u izvođenju nastave iz ključnih kolegija poput Nuklearne fizike I i II, Numeričkih metoda, Osnova programiranja, Računarstva i praktikuma, Početnog fizičkog praktikuma te Praktikuma iz fizike za kemičare. Danas djeluje u nastavnom zvanju predavača na Istarskom veleučilištu u Puli. Kao nositelj niza kolegija, uključujući Primijenjenu matematiku, Fiziku, Modeliranje dinamičkih sustava i Projektiranje ugrađenih računalnih sustava na prijediplomskom studiju Mehatronika te kolegija Neuronske mreže i Programiranje ugradbenih sustava na diplomskom studiju Mehatronika, aktivno oblikuje kurikulum i obrazuje buduće inženjere, povezujući teorijska znanja s praktičnim primjenama.

Znanstvenu izvrsnost potvrđuje kroz dugogodišnju suradnju na međunarodnim i domaćim projektima. Bio je suradnik na projektu Hrvatske zaklade za znanost „Struktura i dinamika egzotičnih femto-sustava” (STRUDEF) pod vodstvom prof. dr. sc. Nilsa Paara, te na međunarodnom DAAD projektu u suradnji s Technische Universität Darmstadt. Trenutačno je voditelj razvojnog projekta Jadranko v2.0-3.0, financiranog od tvrtke Calucem d.o.o. Njegova istraživačka aktivnost uključuje brojne znanstvene boravke na prestižnim institucijama kao što su Charles University u Pragu, ELI-NP u Bukureštu, Institute for Basic Science u Južnoj Koreji te CERN u Ženevi. Redovito izlaže na međunarodnim znanstvenim skupovima (Italija, Bugarska, Slovačka, Slovenija i Južna Koreja), a bio je i korisnik potpore Sveučilišta u Zagrebu za istraživanja doktoranda. U svom se radu specijalizirao za razvoj mikroskopskih teorijskih modela unutar relativističke teorije energijskih funkcionala gustoće.

Popis objavljenih radova

Izvorni znanstveni radovi u časopisima

1. D. Vale, G. Saxena i N. Paar, *Relativistic second random-phase approximation: Formalism and applications to giant resonances*, Phys. Rev. C 113, 054313 (2026).
2. D. Vale i N. Paar, *Subtracted second Tamm-Dancoff approximation in the relativistic point-coupling model*, Phys. Rev. C 112, 034327 (2025).
3. D. Vale i N. Paar, *Mathematical properties and algorithm for fast calculation of full Wick's contractions in quantum many-body fermion systems*, Zbornik Istarskog veleučilišta 2, 1–23 (2023).
4. D. Vale, Y. F. Niu i N. Paar, *Nuclear charge-exchange excitations based on a relativistic density-dependent point-coupling model*, Phys. Rev. C 103, 064307 (2021).
5. G. Kružić, T. Oishi, D. Vale i N. Paar, *Magnetic dipole excitations based on the relativistic nuclear energy density functional*, Phys. Rev. C 102, 044315 (2020).
6. D. Vale, T. Rauscher i N. Paar, *Hybrid method to resolve the neutrino mass hierarchy by supernova (anti)neutrino induced reactions*, J. Cosmol. Astropart. Phys. 02, 007 (2016).
7. N. Paar, T. Marketin, D. Vale i D. Vretenar, *Modeling nuclear weak-interaction processes with relativistic energy density functionals*, Int. J. Mod. Phys. E 24, 1541004 (2015).

Stručni radovi u časopisima

1. I. Simetić, E. Špada, D. Ivančić i D. Vale, *Calculation of mechanical wear of material during sample preparation for metallographic analysis*, Polytechnic and Design 12, 272–279 (2025).
2. P. Radolović, L. Žužić, E. Špada i D. Vale, *Ispitivanje udarne radnje loma termoplastike*, Zbornik Istarskog veleučilišta 4, 69–77 (2025).
3. L. Žužić i D. Vale, *Razvoj nadzornog sustava za lovce s prijenosom podataka na daljinu*, Zbornik Istarskog veleučilišta 3, 34–49 (2024).
4. I. Lorencin, N. Anđelić, D. Vale i M. Mavrinac, *Credit Card Fraud Detection Using Machine Learning Algorithms*, Zbornik Istarskog veleučilišta 2, 138–161 (2023).

Radovi sa skupova

1. D. Vale i N. Paar, *The first applications of the relativistic Second Tamm-Dancoff approximation in doubly-magic nuclei*, EPJ Web Conf. 342, 01028 (2025).
2. D. Vale i N. Paar, *Advancing the microscopic relativistic description of nuclear excitations: From Second Tamm-Dancoff approximation to Second Random Phase Approximation*, Nuclear Theory 42, 229–238 (2025).
3. D. Vale i N. Paar, *Rearrangement terms in relativistic point coupling models in Second Tamm-Dancoff approximation*, Nuclear Theory 41, 2–10 (2024).
4. M. Glučina, D. Vale, S. Grbac Babić i I. Lorencin, *Application of AI in waste management*, Technological Forum 2023, Prag, 85–87 (2023).
5. D. Vale, M. Glučina, I. Lorencin i S. Grbac Babić, *Earthquake magnitude prediction using LSTM*, Technological Forum 2023, Prag, 328–332 (2023).
6. D. Vale i N. Paar, *Resolving neutrino mass hierarchy*, AIP Conf. Proc. 1681, 050011 (2015).

Ocjenski radovi kao mentor

Završni radovi (stručni)

1. L. Čerpnjak, *Projektiranje i implementacija sigurnosnog sustava za obiteljsku kuću primjenom Raspberry Pi mikroračunala*, Istarsko veleučilište, Pula (2025), mentor D. Vale.
2. I. Krenek, *Princip rada i upravljanje modernim sustavima grijanja i hlađenja*, Istarsko veleučilište, Pula (2025), mentor D. Vale.
3. R. Maras, *Izrada 3D pisača upravljanog Arduino mikroupravljačem*, Istarsko veleučilište, Pula (2025), mentor D. Vale.
4. A. Pišak, *Projektiranje sustava za video nadzor s ESP32-CAM razvojnom pločicom i Raspberry Pi mikroračunalom*, Istarsko veleučilište, Pula (2025), mentor D. Vale.
5. D. Vrtačić, *Razvoj mobilne meteorološke stanice temeljene na ESP32 mikroupravljaču*, Istarsko veleučilište, Pula (2025), mentor D. Vale.
6. S. Vukas Popović, *Projektiranje tableta za multimediju*, Istarsko veleučilište, Pula (2025), mentor D. Vale.

7. R. Pertić, *Projektiranje uređaja za pripravljanje toplih napitaka*, Istarsko veleučilište, Pula (2024), mentor D. Vale.
8. S. Shafi, *Projektiranje kvadkoptera sa sustavom upravljanja na daljinu*, Istarsko veleučilište, Pula (2024), mentor D. Vale.
9. L. Žužić, *Razvoj sustava za praćenje divljih životinja primjenom Raspberry Pi mikroracunala*, Istarsko veleučilište, Pula (2024), mentor D. Vale.

Diplomski radovi pod mentorstvom

1. P. Radolović, *Programiranje autonomnog vozila za prijevoz tereta*, Istarsko veleučilište, Pula (2025), mentor D. Vale.