

Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki

Michał Kosmulski
nr albumu: 186 539

Analiza pasm rotacyjnych w jądrach zwierciadlanych w samozgodnym modelu Skyrme'a-Hartree-Focka

Praca licencjacka
na kierunku: Fizyka
w zakresie: Metody Komputerowe Fizyki

praca wykonana pod kierunkiem
dr. hab. Wojciecha Satuły, prof. UW
Katedra Teorii Struktury Jąder Atomowych
Instytut Fizyki Teoretycznej

Warszawa, kwiecień 2007

Oświadczenie kierującego pracą

Oświadczam, że niniejsza praca została przygotowana pod moim kierunkiem i stwierdzam, że spełnia ona warunki do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

Data

Podpis kierującego pracą

Oświadczenie autora pracy

Świadom odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przez mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

Oświadczam również, że przedstawiona praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem tytułu zawodowego w wyższej uczelni.

Oświadczam ponadto, że niniejsza wersja pracy jest identyczna z załączoną wersją elektroniczną.

Data

Podpis autora pracy

Streszczenie

W pracy podjęto próbę odtworzenia w samozgodnym modelu Skyrme'a-Hartree-Focka (SHF) znanej z doświadczenia struktury energetycznej wybranych par jąder zwierciadlanych z przedziału masowego $A \sim 45$. Oddziaływanie pairing uwzględniono poprzez zastosowanie metody Hartree-Focka-Bogoliubowa (HFB). Analizując zmienność w funkcji spinu wielkości MED (*Mirror Energy Difference*) i TED (*Triplet Energy Difference*), zbadano zachowanie sił Skyrme'a w kanałach izowektorowym oraz izotensorowym. Obliczenia numeryczne pokazały, że pairing w badanych jądrach ma w przeważającym stopniu objętościowy charakter. Wykazano ponadto istnienie w modelu SHF zjawisk powodujących niefizyczne naruszenie symetrii izobarycznej, uniemożliwiających odtworzenie eksperymentalnej struktury energetycznej badanych jąder.

Słowa kluczowe

jądra zwierciadlane, pasma rotacyjne, HF, HFB, oddziaływanie Skyrme'a, MED, TED

Dziedzina pracy (kody wg programu Socrates-Erasmus)

13.2 fizyka

Klasyfikacja tematyczna (PACS)

20. NUCLEAR PHYSICS
21.10.Hw Spin, parity, and isobaric spin
21.10.Pc Single-particle levels and strength functions
21.10.Sf Coulomb energies
21.60.Jz Hartree-Fock and random-phase approximations
27.40.+z 39(less-than-or-equal-to)A(less-than-or-equal-to)58

Tytuł pracy w języku angielskim

Analysis of rotational bands in mirror nuclei in the self-consistent Skyrme-Hartree-Fock model

Spis treści

1	Wstęp	9
2	Modele i metody fizyki jądrowej	15
2.1	Metoda Hartree-Focka	16
2.2	Oddziaływanie Skyrme'a	19
2.3	Korelacje nadprzewodnikowe i równania HFB	21
3	Obliczenia w modelu Hartree-Focka	25
3.1	Symulacje z wyłączonym oddz. kulomb.	29
3.2	Symulacje z uwzględnieniem oddz. kulomb.	29
4	Obliczenia w modelu HFB	39
4.1	Dobór parametrów i rodzaju pairingu	39
4.2	Obliczenia MED w modelu HFB	42
5	Podsumowanie	49
6	Załącznik A – kod programu interpol	51
	Bibliografia	53

Rozdział 1

Wstęp

Silne oddziaływania jądrowe są w dobrym przybliżeniu niezależne od typu oddziałujących nukleonów. Oznacza to, że w danym kanale oddziaływania, czyli dla określonych wartości całkowitego momentu pędu, orbitalnego momentu pędu oraz spinu, oddziaływanie neutron-neutron (v_{nn}) jest praktycznie takie samo jak oddziaływanie proton-proton (v_{pp}), czy też neutron-proton (v_{np}). Własność taką nazywamy niezależnością ładunkową silnych oddziaływań jądrowych. Nieco słabsze pojęcie symetrii ładunkowej wymaga jedynie by $v_{pp} = v_{nn}$. Ponieważ neutron i proton posiadają niemal równą masę i oddziałują ze sobą w bardzo podobny sposób, można formalnie rozpatrywać te dwie cząstki jako dwa stany tej samej cząstki zwanej nukleonem. Poprzez analogię z pojęciem spinu $s = \frac{1}{2}$ i przestrzeni spinowej, wygodnie jest wprowadzić abstrakcyjne pojęcie izospinu $t = \frac{1}{2}$ i przestrzeni izospinowej. Dwa stany rozpinające przestrzeń izospinową, $|t = \frac{1}{2}, t_z = \pm \frac{1}{2}\rangle$, różniące się kierunkiem rzutu izospinu na oś z , utożsamia się wtedy odpowiednio z neutronem i protonem. Zgodnie z konwencją przyjętą w fizyce jądrowej, neutronowi odpowiada stan o $t_z = \frac{1}{2}$, a protonowi stan o $t_z = -\frac{1}{2}$.

Uogólnienie powyższych pojęć na układ wielonukleonowy, jakim jest jądro atomowe, przebiega analogicznie jak dla spinu lub momentu pędu. Wprowadza się operator całkowitego izospinu jądrowego, \hat{T} , który jest sumą wektorową indywidualnych wkładów jednocząstkowych \hat{t}_i pochodzących od A nukleonów:

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^A \hat{t}_i, \quad (1.1)$$

oraz jego trzecią składową, która jest prostą sumą arytmetyczną indywidualnych wkładów jednocząstkowych:

$$\hat{T}_z = \sum_{i=1}^A (\hat{t}_z)_i. \quad (1.2)$$

Założenie niezmienniczości izobarycznej oznacza, że hamiltonian jądrowy komutuje z \hat{T}^2 i \hat{T}_z , co implikuje, że stany jądrowe możemy oznaczać za pomocą liczb kwantowych całkowitego izospinu i jego rzutu na oś z : $|\alpha, T, T_z\rangle$. Zgodnie ze standardowymi regułami obowiązującymi w algebrze momentu pędu, mamy:

$$\hat{T}^2 |\alpha, T, T_z\rangle = T(T+1) |\alpha, T, T_z\rangle, \quad (1.3)$$

$$\hat{T}_z |\alpha, T, T_z\rangle = T_z |\alpha, T, T_z\rangle \equiv \frac{1}{2}(N-Z) |\alpha, T, T_z\rangle. \quad (1.4)$$

Symbol α w powyższych równaniach oznacza symbolicznie pozostałe liczby kwantowe opisujące stan jądrowy, jak parzystość czy całkowity moment pędu.

Dla układu o ustalonej liczbie nukleonów A oraz przy ustalonych wartościach liczb kwantowych α i T można utworzyć $2T+1$ stanów o różnych wartościach $-T \leq T_z \leq T$. Stany te nazywamy izobarycznymi stanami analogowymi. Tworzą one tzw. multiplet izobaryczny. Ponieważ przy pełnej symetrii ładunkowej oddziaływań silnych i przy pominięciu innych oddziaływań w jądrze, stany te byłyby zdegenerowane, obserwowane różnice w ich energiach wiązania stanowią źródło wiedzy na temat wszelkich składowych oddziaływań nukleon-nukleon (NN) łamiących niezależność lub symetrię ładunkową.

Najistotniejszymi składowymi naruszającymi symetrię ładunkową w oddziaływaniu NN są oddziaływania elektromagnetyczne. Aby to zilustrować, rozważmy stany podstawowe pary tzw. jąder zwierciadlanych (${}^{N+Z}_Z X$, ${}^{N+Z}_N Y$). Jądra te są skrajnymi jądrami należącymi do multipletu izobarycznego o $T = \frac{1}{2}|N-Z|$ i mają $T_z = \pm T$. Ich energie wiązania można w przybliżeniu opisać wykorzystując najprostszy model kroplowy Weizsäckera ([6]):

$$B(N, Z) = b_{\text{vol}}A - b_{\text{surf}}A^{2/3} - \frac{1}{2}b_{\text{sym}} \frac{(N-Z)^2}{A} - \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{r_0} A^{-1/3} + \delta E_{\text{pair}}, \quad (1.5)$$

gdzie

$$\delta E_{\text{pair}} = \begin{cases} \Delta & \text{dla jąder parzysto-parzystych} \\ 0 & \text{dla jąder nieparzystych} \\ -\Delta & \text{dla jąder nieparzysto-nieparzystych} \end{cases} \quad (1.6)$$

oraz

$$\Delta \approx \frac{12}{\sqrt{A}} [\text{MeV}], \quad (1.7)$$

zaś współczynniki b_x i r_0 są pewnymi stałymi. Ostatni człon formuły masowej (1.5), (1.6), związany jest z oddziaływaniem pairing. W literaturze występuje także równanie analogiczne do (1.7) ale z wartością liczbową 11 zamiast 12 [6]. Różnica energii wiązania jąder, zwana MDE (*Mirror Displacement Energy*), wynosi

$$\begin{aligned} \text{MDE}(A, T) &\equiv B(A, T, T_z = -T) - B(A, T, T_z = T) = \\ &= \frac{3 e^2}{5 r_0} A^{-1/3} (N^2 - Z^2) = \frac{3 e^2}{5 r_0} A^{2/3} (N - Z). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Pochodzi ona, w takim przybliżeniu, wyłącznie od oddziaływania kulombowskiego. Wynika to z faktu, że model kroplowy Weizsäckera implicite zakłada niezależność ładunkową oddziaływań silnych. Istotnie, poza nielicznymi wyjątkami, stany podstawowe jąder atomowych mają izospin równy $T = |T_z| = \frac{1}{2}|N - Z|$. Energia symetrii w równaniu (1.5) jest zatem w istocie proporcjonalna do $(N - Z)^2 \sim T^2$, a nie do T_z^2 , co na pierwszy rzut oka sugeruje wzór (1.5).

Rozważmy teraz ogólniejszą sytuację, w której jądro opisywane jest za pomocą hamiltonianu, który można przedstawić jako sumę dwóch składowych: niezależnej od ładunku \hat{H}_{CI} (*CI - charge independent*) oraz łamiącej symetrię ładunkową \hat{H}'_{CV} (*CV - charge violating*). Niech stan jądra będzie stanem własnym \hat{H}_{CI} opisanym liczbami kwantowymi T , T_z oraz zbiorem pozostałych liczb kwantowych α . Traktując oddziaływanie łamiące symetrię ładunkową jako małe zaburzenie, można oszacować poprawkę do energii wiązania jądra w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń. W tym przybliżeniu energia wiązania dana jest poprzez element macierzowy postaci:

$$B(\alpha T T_z) = \langle \alpha T T_z | \hat{H}_{\text{CI}} + \hat{H}'_{\text{CV}} | \alpha T T_z \rangle \equiv B(\alpha T) + \Delta B(\alpha T T_z).$$

Jeżeli pod uwagę wziąć tylko oddziaływania dwuciałowe, to \hat{H}'_{CV} jest tensorem (izo)sferycznym co najwyżej drugiego rzędu:

$$\hat{H}'_{\text{CV}} = \sum_{k=0}^2 H_{\text{CV}}^{(k)},$$

którego składowe: izoskalarna, izowektorowa i izotensorowa (odpowiednio $k = 0, 1, 2$) są związane z oddziaływaniami pomiędzy nukleonami poprzez

zależności [7]:

$$H_{\text{CV}}^{(0)} = \frac{1}{3}(v_{pp} + v_{nn} + v_{np}), \quad (1.9)$$

$$H_{\text{CV}}^{(1)} = v_{pp} - v_{nn}, \quad (1.10)$$

$$H_{\text{CV}}^{(2)} = v_{pp} + v_{nn} - 2v_{np}. \quad (1.11)$$

Niezależność ładunkowa \hat{H}_{CI} implikuje, że cała zależność energii wiązania od T_z pochodzi od naruszającego symetrię ładunkową zaburzenia \hat{H}'_{CV} :

$$\Delta B(\alpha T T_z) = \left\langle \alpha T T_z \left| \sum_{k=0}^2 H_{\text{CV}}^{(k)} \right| \alpha T T_z \right\rangle \quad (1.12)$$

Twierdzenie Wignera-Eckarta pozwala wyodrębnić z równania (1.12) jawną zależność od T_z . W ten sposób otrzymuje się:

$$\Delta B(\alpha T T_z) = a + b T_z + c T_z^2, \quad (1.13)$$

gdzie współczynniki a , b i c zależą od T oraz od postaci oddziaływania w hamiltonianie \hat{H}'_{CV} , ale są niezależne od T_z . Zależność (1.13) ma charakter uniwersalny. W szczególności, systematyczne badania doświadczalne multipletów izobarycznych o $T = \frac{3}{2}$ potwierdzają, że następny człon rozwinięcia, $\sim T_z^3$, jest zaniedbywalny.

Dominujący wkład do parametrów b i c w równaniu (1.13) pochodzi od oddziaływania kulombowskiego. Celem niniejszej pracy będzie badanie parametrów b i c , a ściślej: ich zmian, Δb_J i Δc_J , w funkcji energii wzbudzenia i całkowitego momentu pędu J wzdłuż pasma rotacyjnego. W badaniach wykorzystane zostaną dane dotyczące multipletów izobarycznych o $T = \frac{1}{2}$ i $T = 1$ w jądrach atomowych z dolnej części powłoki fp . Do badania relacji energetycznych pomiędzy izobarycznymi stanami analogowymi o momencie pędu J rozważanych multipletów izobarycznych posłużą następujące indykatory: MED (*Mirror Energy Difference*), zdefiniowany jako

$$\text{MED}(J, T) = \mathcal{E}(J, T, T_z = -T) - \mathcal{E}(J, T, T_z = T), \quad (1.14)$$

który można stosować zarówno do dubletu ($T = \frac{1}{2}$) jak i trypletu ($T = 1$) izobarycznego, oraz TED (*Triplet Energy Difference*):

$$\text{TED}(J) = \mathcal{E}(J, T_z = 1) + \mathcal{E}(J, T_z = -1) - 2\mathcal{E}(J, T_z = 0), \quad (1.15)$$

który stosuje się do trypletu izobarycznego. Indykatory te są pokrewne indykatorom typu (1.8), ale są zdefiniowane dla energii wzbudzenia \mathcal{E} , a nie dla energii wiązania. MED stanowi szczególny przypadek wielkości $\text{CED}(X, Y) =$

$\mathcal{E}(X) - \mathcal{E}(Y)$ (*Coulomb Energy Difference*), którą można obliczyć dla dwóch dowolnych stanów dwóch jąder X i Y , niekoniecznie zwierciadlanych. Analogiem równania (1.13) jest, dla energii wzbudzenia, zależność:

$$\mathcal{E}(J, T, T_z) = \mathcal{E}(J, T) + \Delta b_J T_z + \Delta c_J T_z^2, \quad (1.16)$$

w której Δb_J i Δc_J określają zmiany izowektorowych i izotensorowych składowych naruszających symetrię ładunkową w funkcji momentu pędu J , w stosunku do stanu podstawowego. Podstawiając zależność (1.16) do równań (1.14) i (1.15), otrzymuje się:

$$\text{MED}(J, T = \frac{1}{2}) = \mathcal{E}(J, T_z = -\frac{1}{2}) - \mathcal{E}(J, T_z = +\frac{1}{2}) = -\Delta b_J, \quad (1.17)$$

$$\text{MED}(J, T = 1) = \mathcal{E}(J, T_z = -1) - \mathcal{E}(J, T_z = +1) = -2\Delta b_J, \quad (1.18)$$

$$\text{TED}(J) = \mathcal{E}(J, T_z = +1) + \mathcal{E}(J, T_z = -1) - 2\mathcal{E}(J, T_z = 0) = 2\Delta c_J. \quad (1.19)$$

W powyższych równaniach widać wyraźnie sens fizyczny używanych indyktorów. Indykator MED służy do badania izowektorowego kanału oddziaływania, zaś TED umożliwia poznawanie izotensorowego kanału oddziaływania.

Badania teoretyczne zmierzające do wyjaśnienia natury oddziaływań jądrowych naruszających symetrię izobaryczną w kanałach izowektorowym i izotensorowym prowadzone są już od dłuższego czasu w ramach modelu powłokowego. Model powłokowy pozwala obecnie na bardzo dokładne odtwarzanie wartości MED i TED. Przegląd uzyskanych w tym modelu wyników można znaleźć w publikacji [1]. Warto zaznaczyć, że model powłokowy (*i*) działa w przestrzeni walencyjnej, tj. odrzuca część nukleonów, traktując je jako inercyjny rdzeń, oraz (*ii*) działa w granicy symetrii izobarycznej. Oznacza to, że efekty naruszające symetrię izobaryczną są w tym modelu traktowane jako zaburzenie. Trudno się też oprzeć wrażeniu, że część z nich jest opisywana w modelu powłokowym w sposób nienaturalny. Przykładem jest sztuczny podział wkładów elektrostatycznych na monopole i multipole. Oba te efekty są w modelu powłokowym traktowane w zupełnie różny sposób. Efekt multipolowy jest traktowany na poziomie dwuciałowym, zaś efekt monopolowy jest fenomenologicznie sparametryzowany poprzez zmiany współczynnika obsadzenia orbitalu $p_{3/2}$ wzdłuż pasma rotacyjnego.

Celem niniejszej pracy jest zbadanie efektów MED i TED w samogodnym modelu średniego pola. Wszystkie przedstawione wyniki obliczeń numerycznych uzyskano za pomocą programu numerycznego HFODD [4], rozwiązującego równania Skyrme'a-Hartree-Focka. Badania tego typu nie były dotąd w ogóle podejmowane. Są one tym bardziej interesujące, że w przeciwieństwie do modelu powłokowego, model średniego pola nie działa w granicy

symetrii izobarycznej, uwzględniając efekty izowektorowe w sposób naturalny poprzez różnice w samozgodnych gęstościach protonowych i neutronowych. W szczególności, oddziaływanie kulombowskie jest w tym modelu traktowane na równi z oddziaływaniem silnym.

Rozdział 2

Zastosowane modele i metody fizyki jądrowej

Ze względu na złożoność systemów rozpatrywanych w fizyce jądrowej, ściśle rozwiązanie równania Schrödingera dla hamiltonianu wielu oddziałujących cząstek jest z praktycznego punktu widzenia niewykonalne. Wynika to zarówno z liczby cząstek, których wzajemne oddziaływania trzeba by było uwzględnić, jak i ze złożonej natury samych oddziaływań oraz konieczności uwzględnienia nie tylko oddziaływań dwu- ale również trójciałowych. Ponadto, oddziaływania między nukleonami w jądrze mają inną postać niż oddziaływanie nukleon-nukleon w próżni, a więc niezbędne jest uwzględnienie oddziaływań efektywnych, zmodyfikowanych przez materię jądrową.

Warto jednak zwrócić uwagę na fakt, że teoria struktury jądra atomowego zajmuje się wyłącznie niskoenergetycznymi aspektami fizyki jądrowej. Implikuje to, że występujące tu obserwacje są niezależne od szczegółów krótkozasięgowego oddziaływania jądrowego. Pozwala to zastąpić skomplikowane oddziaływanie silne nukleon-nukleon poprzez lokalne, tj. proporcjonalne do delty Diraca, poprawki ze stałymi sprzężenia dopasowanymi do danych eksperymentalnych i podstawowych własności materii jądrowej. Oddziaływanie takie nosi nazwę oddziaływania Skyrme'a [14].

W przeprowadzonych w pracy obliczeniach użyte zostanie oddziaływanie Skyrme'a w ramach rachunku wariacyjnego Hartree-Focka. Rachunek ten należy do metod korzystających z przybliżenia pola średniego. Idea tego przybliżenia polega na zastąpieniu w modelu jądra trudnego do symulowania zbioru oddziałujących ze sobą cząstek przez obraz nieoddziałujących cząstek poruszających się w pewnym średnim potencjale, stanowiącym średni wynik oddziaływania cząstki ze wszystkimi pozostałymi. Osiąga się to przez szczególny dobór klasy funkcji próbnych w postaci tzw. wyznacznika Slatera.

Metody średniego pola w połączeniu z użyciem rachunku wariacyjnego mogłyby prowadzić do problemu niezgodności znalezionej metodą wariacyjną funkcji falowej z założoną postacią średniego pola: w wyniku obliczeń otrzymuje się pewną postać funkcji falowej pojedynczej cząstki nieoddziałującej, ale wkłady od wszystkich cząstek opisywanych taką funkcją falową nie sumują się do takiej postaci średniego pola, jaką przyjęto na początku obliczeń. Aby uniknąć tego rodzaju niespójności, stosuje się metody samozgodne. W metodach samozgodnych, postać średniego pola jest iteracyjnie uzgadniana z obliczoną uprzednio postacią funkcji falowej, dzięki czemu w granicy uzyskuje się zgodność pola i funkcji falowej.

Rozdział jest poświęcony omówieniu metod teoretycznych stosowanych w niniejszej pracy. W rozdziale 2.1 omówiona zostanie metoda Hartree-Focka; w rozdziale 2.2 — oddziaływanie Skyrme'a oraz zastosowanie tego oddziaływania w metodzie HF. Rozdział 2.3 poświęcony jest uogólnieniu metody pola średniego uwzględniającemu nadciężłość jądrową, czyli teorii Hartree-Focka-Bogoliubowa.

2.1 Metoda Hartree-Focka

Metoda Hartree-Focka (HF) jest jedną z najpopularniejszych metod samozgodnych. Jako A -cząstkową funkcję próbną dla potrzeb rachunku wariacyjnego przyjmuje się w niej wyznaczniki Slatera, czyli funkcje postaci:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \text{Det} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_2) & \dots & \phi_1(\mathbf{x}_A) \\ \phi_2(\mathbf{x}_1) & \phi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \phi_2(\mathbf{x}_A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_A(\mathbf{x}_1) & \phi_A(\mathbf{x}_2) & \dots & \phi_A(\mathbf{x}_A) \end{vmatrix}, \quad (2.1)$$

gdzie ϕ_i oznacza elementy ustalonego zbioru stanów jednofermionowych. Oznaczenie \mathbf{x}_i reprezentuje tu zbiór wszystkich współrzędnych, od których zależą jednocząstkowe funkcje falowe, a więc współrzędne przestrzenne, spinowe i izospinowe. Całkowania po zmiennych \mathbf{x}_i występujące w poniższych równaniach należy zatem rozumieć jako całkowania po zmiennej przestrzennej \mathbf{r}_i z jednoczesnym sumowaniem po zmiennych spinowych σ i izospinowych τ . Funkcja falowa pokazanej wyżej postaci automatycznie spełnia regułę wykluczania Pauliego.

W fizyce jądrowej używa się z powodzeniem wielu czysto fenomenologicznych potencjałów jądrowych symulujących średnie pole wewnątrz jądra atomowego odczuwane przez pojedynczą cząstkę. Do najczęściej wykorzystywanych należą m.in.:

- potencjał oscylatora harmonicznego

$$v(r) = \frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2$$

oraz

- potencjał Woodsa-Saxona (WS)

$$v(r) = \frac{V_o}{1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}},$$

gdzie V_o jest głębokością potencjału WS, R_0 jego średnią szerokością, zaś a definiuje rozmycie powierzchni jądrowej. Parametr ω_0 można dopasować np. na podstawie przybliżenia $\hbar\omega_0 \approx \frac{41}{A^{1/3}}$ [MeV]. Dla jąder zdeformowanych potencjały te muszą zostać odpowiednio „przeskalowane” wzdłuż poszczególnych osi aby pasowały do niesferycznego kształtu (rozkładu materii) jądra. Metoda HF umożliwia znalezienie postaci pola średniego na podstawie znajomości oddziaływań dwuciałowych v_{12} . W ten sposób wiedza na temat jądra jako całości dostarcza pośrednio informacji o efektywnym oddziaływaniu nukleon-nukleon. Ponadto, deformacja jądra pojawia się w tym opisie w sposób naturalny. Efekt taki nazywa się spontanicznym naruszeniem symetrii i jest, w szczególności, podstawą opisu stanów rotacyjnych w modelu wymuszonego obrotu (*cranking*), z czego skorzystano w obliczeniach przeprowadzonych w rozdziałach 3 i 4.

Poniżej naszkicowano główne etapy procedury HF. Rozważmy ogólny hamiltonian dwuciałowy z dowolnym lokalnym oddziaływaniem \hat{V} :

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^A \hat{t}(\mathbf{x}_i)}_{\hat{T}} + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^A v_{12}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}_{\hat{V}}.$$

Rachunek wariacyjny Ritza pozwala na znalezienie funkcji próbnej dającej minimum energii jądra. Poszukiwane jest rozwiązanie równania

$$\delta \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = 0,$$

przy warunku normalizacji

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1.$$

Rozpisując wyznacznik Slatera i przeprowadzając możliwe redukcje, otrzymuje się wartości oczekiwane hamiltonianu w postaci:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{T} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle, \quad (2.2)$$

$$\langle \Psi | \hat{T} | \Psi \rangle = \sum_{k=1}^A \langle \phi_k | \hat{t} | \phi_k \rangle = \sum_{k=1}^A \int d^3 \mathbf{x} \phi_k^*(\mathbf{x}) \hat{t}(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{x}), \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \int d^3 \mathbf{x} \int d^3 \mathbf{x}' \phi_i^*(\mathbf{x}) \phi_j^*(\mathbf{x}') v_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \cdot \\ \cdot [\phi_i(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}') - \phi_i(\mathbf{x}') \phi_j(\mathbf{x})]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

W równaniu (2.4) widoczne są dwa człony – tak zwany człon wprost oraz człon wymienny. Człon wymienny nie występuje w metodzie Hartree, a jedynie w metodzie Hartree-Focka jako efekt antysymetryzacji funkcji falowej, koniecznej przy opisie fermionów.

Procedura wariacyjna prowadzi do następującego równania falowego dla cząstki o indeksie k :

$$\hat{t} \phi_k(\mathbf{x}) + \int d^3 \mathbf{x}' v_{HF}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \phi_k(\mathbf{x}') = e_k \phi_k(\mathbf{x}). \quad (2.5)$$

W sytuacji, gdy ograniczamy się jedynie do współrzędnych przestrzennych (pomijając współrzędne spinowe i izospinowe), potencjał HF przyjmuje następującą postać:

$$\begin{aligned} v_{HF}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_{k=1}^A \int d^3 \mathbf{r}'' v_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \phi_k^*(\mathbf{r}'') \phi_k(\mathbf{r}'') + \\ - \sum_{k=1}^A v_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_k^*(\mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Rozwiązanie zagadnienia wariacyjnego polega zatem na znalezieniu rozwiązań równania falowego (2.5), w którym występuje średni potencjał typu (2.6). Potencjał ten jest w ogólnym przypadku nielokalny, przy czym nielokalność jest następstwem występowania wyrazu wymiennego w zależności (2.4).

Jeżeli oddziaływanie dwucząstkowe zależy nie tylko od położenia cząstek, ale np. również od ich wzajemnych pędów, to oddziaływanie dwucząstkowe jest operatorem nielokalnym, zaś potencjał Hartree-Focka przyjmuje ogólniejszą

postać:

$$\begin{aligned} v_{HF}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= \\ &= \sum_{k=1}^A \iint d^3\mathbf{x}_2 d^3\mathbf{x}'_2 (v_{12}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) - v_{12}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1)) \phi_k^*(\mathbf{x}_2) \phi_k(\mathbf{x}'_2). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Wprowadzając zantysymetryzowane oddziaływanie:

$$\bar{v}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) = v_{12}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) - v_{12}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1) \quad (2.8)$$

oraz nielokalną macierz gęstości:

$$\rho(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \sum_{k=1}^A \phi_k^*(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{x}'), \quad (2.9)$$

można przedstawić równość (2.7) w następującej ogólnej postaci:

$$v_{HF}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) = \iint d^3\mathbf{x}_2 d^3\mathbf{x}'_2 \bar{v}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \rho(\mathbf{x}'_2, \mathbf{x}_2). \quad (2.10)$$

Taka postać potencjału średniego pola umożliwia jego numeryczne obliczanie dla ustalonego zbioru funkcji próbnych oraz dowolnego oddziaływania dwucząstkowego.

2.2 Oddziaływanie Skyrme'a

Oddziaływanie Skyrme'a jest fenomenologicznym modelem sił jądrowych, cechującym się względną prostotą i stosunkowo niewielką liczbą parametrów. Pomimo, że jawna zależność od odległości nukleonów ma charakter delty Diraca (oddziaływanie kontaktowe), oddziaływanie to uwzględnia efekty wynikające ze skończonego zasięgu sił jądrowych, a także, poprzez człon zależny od gęstości, bierze pod uwagę oddziaływania wielociałowe.

Standardowe oddziaływanie Skyrme'a ma następującą postać:

$$\begin{aligned} v_{12} &= t_0(1+x_0P_\sigma)\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) + \frac{1}{2}t_1(1+x_1P_\sigma) (\mathbf{k}'^2\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) + \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\mathbf{k}^2) + \\ &+ t_2(1+x_2P_\sigma)\mathbf{k}' \cdot \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\mathbf{k} + \frac{1}{6}t_3(1+x_3P_\sigma)\rho^\alpha\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) + \\ &+ iW_0(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)\mathbf{k}' \times \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\mathbf{k}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

gdzie $P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$ jest operatorem wymiany spinów, zaś operatory $\mathbf{k} = \frac{1}{2i}(\nabla_1 - \nabla_2)$ (działający w prawo) i $\mathbf{k}' = -\frac{1}{2i}(\nabla_1 - \nabla_2)$ (działający w lewo) są operatorami względnych pędów cząstek. Zależy ono od 10 parametrów:

$$t_0, x_0, t_1, x_1, t_2, x_2, t_3, x_3, \alpha, W_0, \quad (2.12)$$

które dobiera się tak, aby odtworzyć podstawowe własności materii jądrowej oraz wybrane dane dla jąder skończonych.

Siły Skyrme'a wykorzystane w metodzie Hartree-Focka (SHF, Skyrme-Hartree-Fock) produkują lokalną gęstość energii $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ oraz lokalny (przestrzennie) potencjał średni. Jest to istotne z punktu widzenia obliczeń numerycznych, gdyż do obliczenia całkowitej energii jądra wystarczy obliczenie pojedynczej całki $\mathcal{E}_{\text{SHF}} = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{H}(\mathbf{r})$. Lokalny funkcjonał energii $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ wygodnie jest zapisać w następującej postaci:

$$\mathcal{E}^{\text{Skyrme}} = \sum_{t=0,1} \int d^3\mathbf{r} (\mathcal{H}_t^{\text{even}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_t^{\text{odd}}(\mathbf{r})), \quad (2.13)$$

gdzie t jest tzw. indeksem izospinowym zaś:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_t^{\text{even}}(\mathbf{r}) &= C_t^\rho \rho_t^2 + C_t^{\Delta\rho} \rho_t \Delta\rho_t + C_t^\tau \rho_t \tau_t + C_t^J \overleftarrow{\mathbf{J}}_t^2 + C_t^{\nabla J} \rho_t \nabla \cdot \mathbf{J}_t, \\ \mathcal{H}_t^{\text{odd}}(\mathbf{r}) &= C_t^s \mathbf{s}_t^2 + C_t^{\Delta s} \mathbf{s}_t \cdot \Delta \mathbf{s}_t + C_t^T \mathbf{s}_t \cdot \mathbf{T}_t + C_t^j \mathbf{j}_t^2 + C_t^{\nabla j} \mathbf{s}_t \cdot (\nabla \times \mathbf{j}_t). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Lokalne gęstości energii $\mathcal{H}_t^{\text{even}}(\mathbf{r})$ i $\mathcal{H}_t^{\text{odd}}(\mathbf{r})$ są biliniowymi funkcjami następujących lokalnych gęstości i ich pochodnych:

- gęstości cząstkowej

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{k,\sigma} n_k |\phi_k(\mathbf{r}, \sigma)|^2, \quad (2.15)$$

- gęstości energii kinetycznej

$$\tau(\mathbf{r}) = \sum_{k,\sigma} n_k |\nabla \phi_k(\mathbf{r}, \sigma)|^2, \quad (2.16)$$

- gęstości spinowej

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_{k,\sigma,\sigma'} n_k \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \phi_k(\mathbf{r}, \sigma') \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle, \quad (2.17)$$

- wektorowej gęstości energii kinetycznej

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}) = \sum_{k,\sigma,\sigma'} n_k \nabla \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \nabla \phi_k(\mathbf{r}, \sigma') \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle, \quad (2.18)$$

- gęstości pędu

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} \sum_{k,\sigma} n_k (\phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \nabla \phi_k(\mathbf{r}, \sigma) - \phi_k(\mathbf{r}, \sigma) \nabla \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma)), \quad (2.19)$$

- tensora spinowo-prądowego

$$J_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} \sum_{k,\sigma,\sigma'} n_k (\nabla_\mu \phi_k(\mathbf{r}, \sigma) \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma') - \nabla_\mu \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma') \phi_k(\mathbf{r}, \sigma)) \langle \sigma' | \boldsymbol{\sigma}_\nu | \sigma \rangle \quad (2.20)$$

$$\overleftrightarrow{J}_t^2 \equiv \sum_{\mu,\nu} J_{\mu\nu,t}^2, \quad (2.21)$$

gdzie czynnik n_k wynosi 1 i 0 odpowiednio dla stanu obsadzonego i nieobsadzonego. Gęstości powyższe oblicza się niezależnie dla protonów i neutronów. Z gęstości protonowych i neutronowych konstruuje się następnie gęstości izoskalarne ($t = 0$), które są sumami gęstości lokalnych, np. $\rho_0 = \rho_n + \rho_p$, i izowektorowe ($t = 1$), odpowiadające różnicom gęstości lokalnych, np. $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$. Podział funkcjonału (2.13) na część zależną od gęstości niezmienniczych względem odwrócenia czasu (*even*) i część zależną od gęstości nieparzystych względem odwrócenia czasu (*odd*) jest podziałem poddyktowanym wyłącznie wygodą.

Współczynniki C_t^x występujące w równaniu (2.14) można wyrazić w prosty sposób przez 10 parametrów (2.12). Odpowiednie zależności podano np. w pracy [3]. Funkcjonał Skyrme'a jest zatem szczególną realizacją znacznie ogólniejszej teorii funkcjonału gęstości Hohenberga-Kohna-Shama [15]. Parametry funkcjonału (oddziaływania) Skyrme'a są dobierane poprzez dopasowanie do danych doświadczalnych. Zwykle uwzględnia się pewną liczbę znanych jąder atomowych (masy, promienie itd.), a równocześnie dąży do tego, by dana parametryzacja dobrze odtwarzała własności nieskończonej materii jądrowej. Zależnie od wybranego zbioru danych eksperymentalnych oraz sposobu dopasowania do nich parametrów, otrzymuje się różne wartości poszczególnych współczynników. Dla różnych parametryzacji, wartości tego samego współczynnika mogą różnić się znacznie i przez to dawać istotnie różne wyniki obliczeń w metodzie HF. W niniejszej pracy będą wykorzystywane dwie różne parametryzacje: oddziaływanie SLy4 [17] i oddziaływanie SkO [18].

2.3 Korelacje nadprzewodnikowe i równania Hartree-Focka-Bogoliubowa

Istnieje szereg przesłanek świadczących o tym, że nukleony w jądrach atomowych mają tendencję do łączenia się w pary o całkowitym momencie pędu $J = 0$, a ściślej: w pary o całkowitym orbitalnym momencie pędu $L = 0$ i całkowitym spinie $S = 0$, a więc pary, w których nukleony znajdują się

w stanach wzajemnie odwróconych w czasie. Przykładem może być np. efekt parzysto-nieparzysty, tj. systematyczne różnice w energiach wiązania jąder parzysto-parzystych w stosunku do jąder nieparzystych i nieparzysto-nieparzystych opisane przez ostatni człon w formule masowej (1.5).

Mechanizm ten pod wieloma względami przypomina występujące w metalach zjawisko nadprzewodnictwa. W nadprzewodniku elektrony łączą się w pary (pary Coopera) w wyniku przyciągającego oddziaływania przekazywanego za pośrednictwem drgań sieci krystalicznej (fononów). Funkcje falowe takich elektronów są względem siebie odwrócone w czasie. Funkcja opisująca ruch skorelowanej pary elektronów nosi nazwę BCS od nazwisk jej odkrywców (Bardeen, Cooper, Schrieffer). Dla stanu nadprzewodnikowego charakterystyczne jest powstawanie szczeliny energetycznej Δ , oddzielającej stan podstawowy elektronów od stanów wzbudzonych. Przy odpowiednio niskiej temperaturze, energia wzbudzeń termicznych $kT \ll \Delta$ jest mniejsza od wielkości szczeliny energetycznej, w związku z czym rozpraszanie elektronów na sieci krystalicznej nie powoduje przenoszenia ich do stanu wzbudzonego. W ten sposób przepływ prądu elektrycznego może odbywać się bez strat energii.

Obecność szczeliny energetycznej w widmie jąder parzysto-parzystych stała się bezpośrednią motywacją do przeniesienia teorii nadprzewodnictwa na grunt teorii jądra. Szczelina taka została najpierw zaobserwowana doświadczalnie, zaś później podjęto próbę opisu jąder za pomocą formalizmu metody BCS [19]. Korelacja ruchu par nukleonów w pary Coopera wpływa na energię wiązania jądra atomowego, jego kształt, a przede wszystkim na moment bezwładności, który jest podstawową charakterystyką interesującego nas tutaj kolektywnego ruchu obrotowego.

Ponadto, obrót jądra powoduje stopniowy zanik korelacji par. Zanik ten nie jest jednorodny. Najszybciej rozprzegają się pary Coopera zbudowane na stanach jednocząstkowych o dużych indywidualnych momentach pędu j . Pary takie rozprzegając się uszeregowują swój moment pędu wzdłuż osi obrotu, prowadząc do zaburzenia regularnego ruchu obrotowego. Ponieważ jądro atomowe jest układem o stosunkowo niewielkiej liczbie cząstek (tzw. układ mezoskopowy) to rozerwanie się nawet jednej pary powoduje znaczną redukcję szczeliny energetycznej. Rozerwanie większej liczby par prowadzi na ogół, w opisie średniopowym, do zupełnego zaniku nadprzewodnictwa, czyli do przejścia fazowego. Efekty tego typu występują w obliczeniach przeprowadzonych w rozdziale 4.

Metodę BCS stosuje się z powodzeniem do jądra atomowego. Posiada ona jednak tę wadę, że nie jest metodą w pełni samozgodną z metodą Hartree-Focka. Metodą, która traktuje korelacje nadprzewodnikowe i pole średnie w ramach jednego spójnego formalizmu uwzględniającego sprzężenie pomię-

dzy obydwoma kanałami, jest metoda Hartree-Focka-Bogoliubowa (HFB). W niniejszej pracy przedstawione zostaną obliczenia bazujące na podejściu HFB.

Pojęciem istotnym dla teorii HFB jest kwazicząstka, czyli stan kwantowy stanowiący mieszaninę stanów cząstkowych i dziurowych. Operatory kreacji i anihilacji stanów kwazicząstkowych uzyskuje się z odpowiednich operatorów cząstkowych za pomocą unitarnej transformacji Bogoliubowa, określonej następującymi równaniami [16]:

$$\begin{aligned}\alpha_\mu &= \sum_m (U_{m\mu}^* a_m + V_{m\mu}^* a_m^\dagger), \\ \alpha_\mu^\dagger &= \sum_m (U_{m\mu} a_m^\dagger + V_{m\mu} a_m).\end{aligned}\quad (2.22)$$

Aby operatory α_μ i α_μ^\dagger były operatorami fermionowymi, muszą być dodatkowo spełnione warunki:

$$\{\alpha_\mu, \alpha_\nu^\dagger\} = \delta_{\mu\nu}, \quad (2.23)$$

$$\{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} = \{\alpha_\mu^\dagger, \alpha_\nu^\dagger\} = 0. \quad (2.24)$$

Jako funkcje próbne w procedurze wariacyjnej przyjmuje się stany postaci

$$|\Psi_0\rangle = \prod_\mu \alpha_\mu |0\rangle. \quad (2.25)$$

Parametrami wariacyjnymi teorii są amplitudy transformacji Bogoliubowa U i V . Funkcje próbne (2.25) nie są funkcjami własnymi ani operatora liczby neutronów $\hat{N} = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n$ ani protonów $\hat{Z} = \sum_p \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p$, a zatem liczba cząstek układu nimi opisanego nie jest dobrze określona. Aby uniknąć związanych z tym faktem niefizycznych wyników, zakłada się, że przynajmniej *średnia* liczba neutronów i protonów w układzie musi być zgodna z oczekiwaniem:

$$\langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle = N \quad \text{i} \quad \langle \Psi_0 | \hat{Z} | \Psi_0 \rangle = Z. \quad (2.26)$$

Wariacja hamiltonianu uwzględniająca ograniczenie (2.26) wymaga wprowadzenia dwóch czynników Lagrange'a, λ_n i λ_p :

$$\delta \langle \Psi_0 | \hat{H} - \lambda_n \hat{N} - \lambda_p \hat{Z} | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (2.27)$$

Mnożniki Lagrange'a λ_n i λ_p interpretuje się jako potencjały chemiczne lub poziomy Fermiego dla neutronów i protonów. Częstą praktyką jest podział oddziaływania w hamiltonianie potencjału jądrowego \hat{H} na część generującą pole średnie v_{ph} i część odpowiedzialną za korelacje par v_{pair} . Taki podział będzie stosowany w obliczeniach przedstawionych w niniejszej pracy. Jako

v_{ph} zastosowane zostanie opisane w rozdziale 2.2 oddziaływanie Skyrme'a, zaś jako v_{pair} użyte będzie oddziaływanie kontaktowe postaci:

$$v_{\text{pair}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = v_o \left(1 - \frac{\rho\left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right)}{\rho_c} \right) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (2.28)$$

gdzie v_o jest natężeniem tego oddziaływania, które może być niezależnie dobierane dla protonów i neutronów, ρ jest gęstością izoskalarną, zaś ρ_c dowolnym parametrem.

Rozwiązanie zagadnienia wariacyjnego (2.27) pozwala znaleźć energie oraz funkcje falowe jądra. Dzięki użyciu zmodyfikowanych w stosunku do metody HF funkcji próbnych (oraz uwzględnieniu dodatkowych warunków ograniczających wyniki jedynie do wyników fizycznych), możliwe jest uwzględnienie sił pairing i tym samym uzyskanie bardziej zgodnych z doświadczeniem wartości poziomów energetycznych jąder. Ostatecznie, energię jądra można rozbić na następujące składowe: energię kinetyczną, energię Skyrme'a, energię kulombowską oraz energię pairing:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^{\text{kin}} + \mathcal{E}^{\text{Skyrme}} + \mathcal{E}^{\text{Coul}} + \mathcal{E}^{\text{pair}} \quad (2.29)$$

Wykorzystany w dalszej części pracy program HFODD pozwala na niezależną konfigurację sił przyczyniających się do każdego z wymienionych rodzajów energii, a przez to na zbadanie ich wpływu na całkowitą energię jądra.

Rozdział 3

Obliczenia w modelu Hartree-Focka

Zasadniczym celem pracy jest zbadanie izowektorowego i izotensorowego kanału oddziaływań efektywnych w modelu Hartree-Focka (HF) z oddziaływaniami Skyrme'a za pomocą indyktorów MED i TED opisanych równaniami (1.14) i (1.15). W obliczeniach wykorzystano pakiet HFODD (wersja 2.21a). Program HFODD, opisany w pracy [4], umożliwia rozwiązywanie jądrowych równań Skyrme'a-Hartree-Focka w bazie zdeformowanego oscylatora harmonicznego. Możliwe jest uwzględnienie sił pairing za pomocą równania Hartree-Focka-Bogoliubowa (HFB). W bieżącym rozdziale przedstawiono wyniki obliczeń jednocząstkowych HF. Obliczenia uwzględniające pairing przedstawiono w rozdziale 4. Pojedynczy plik wejściowy pakietu HFODD opisuje zwykle kilka stanów jądra różniących się np. prędkością kątową obrotu wymuszonego w modelu cranking. Dla każdego zestawu danych program oblicza podstawowe parametry takie jak całkowity moment pędu wzdłuż osi wymuszonego obrotu ($I \equiv \langle \hat{J}_Y \rangle$), zwany dalej spinem jądra, całkowitą energię jądra czy parametry deformacji Bohra.

Do obliczeń wybrano następujące pary zwierciadlanych jąder parzysto-parzystych: ${}^{50}_{24}\text{Cr}$ - ${}^{50}_{26}\text{Fe}$, ${}^{48}_{22}\text{Ti}$ - ${}^{48}_{26}\text{Fe}$, ${}^{46}_{22}\text{Ti}$ - ${}^{46}_{24}\text{Cr}$ i jąder nieparzystych: ${}^{47}_{23}\text{V}$ - ${}^{47}_{24}\text{Cr}$, ${}^{49}_{24}\text{Cr}$ - ${}^{49}_{25}\text{Mn}$ oraz dwa tryplety jąder: ${}^{46}_{22}\text{Ti}$ - ${}^{46}_{24}\text{Cr}$ - ${}^{46}_{23}\text{V}$ i ${}^{50}_{24}\text{Cr}$ - ${}^{50}_{26}\text{Fe}$ - ${}^{50}_{25}\text{Mn}$. W celu zbadania zależności wyników od parametrów siły Skyrme'a, obliczenia wykonano dla dwóch parametryzacji tych sił, SLy4 [17] i SkO [18], różniących się w sposób istotny własnościami w kanale izowektorowym.

Wybrane do badania jądra atomowe znajdują się w pobliżu ścieżki stabilności. Dla jąder tych istnieją wysokospinowe dane spektroskopowe umożliwiające bezpośrednie porównanie obliczeń z wynikami doświadczalnymi. Ponadto, jądra te należą do obszaru stosowalności wielu modeli jądrowych. Pozwala to porównać uzyskane wyniki nie tylko z danymi eksperymentalnymi,

ale także z innymi modelami teoretycznymi, a w szczególności z wynikami modelu powłokowego (np. [11], [1], [8], [9]). Istotnie, wszystkie wspomniane jądra składają się z całkowicie zapełnionego rdzenia $^{40}_{20}\text{Ca}$ i otwartej podpowłoki $f_{7/2}$. Taka konfiguracja czyni je „typowymi” dla modelu powłokowego. Model powłokowy w przestrzeni konfiguracyjnej fp należy do najdokładniejszych jeżeli chodzi o jakość przewidywań. Należy jednak podkreślić, że model powłokowy działa w granicy zachowanej symetrii izobarycznej. Badanie efektów typu MED i TED w ramach modelu powłokowego wymaga zatem oszacowania w ramach rachunku zaburzeń poprawek naruszających symetrię izobaryczną. Dobre odtworzenie danych doświadczalnych okazuje się możliwe po oszacowaniu, w sposób czysto fenomenologiczny, efektów naruszających symetrię izobaryczną związanych z: (i) monopolem efektem kulombowskim; (ii) multipolem efektem kulombowskim; (iii) składowymi naruszającymi symetrię izobaryczną w efektywnym oddziaływaniu silnym. W modelu HF (lub HFB) wszystkie te efekty powinny być w zasadzie uwzględnione. Pytaniem zasadniczym jest czy uproszczenie funkcji falowej do pojedynczego wyznacznika Slatera nie spowoduje rozmycia tak subtelnych efektów jak MED lub TED.

Symulacje, o ile nie zaznaczono inaczej, wykonane zostały według następującego schematu. Jako konfigurację nukleonów podawano konfigurację stanu podstawowego, czyli liczbę neutronów i protonów obsadzających najniższe stany jednoząstkowe w blokach o określonych wartościach parzystości i sygnatury. Obliczenia wykonywano dla $\hbar\omega_Y = 0$, a następnie dla wartości $\hbar\omega_Y$ stopniowo zwiększanych do wartości $\hbar\omega_Y = 1$ MeV, przy której wszystkie badane jądra znajdowały się już zawsze w stanie o maksymalnym możliwym spinie w ramach rozważanej konfiguracji, czyli w tzw. stanie krańcowym (terminującym). Jako krok stosowano na początku $\Delta\hbar\omega_Y = 0.01$ MeV, w razie potrzeby interesujące obszary symulowano z użyciem mniejszego kroku lub zwiększano krok tam, gdzie nie pogarszało to wyników, a znacznie przyspieszało obliczenia. W obliczeniach korzystających z metody HFB, przedstawionych w rozdziale 4, jako wyjściową wartość kroku przyjmowano zwykle $\Delta\hbar\omega_Y = 0.1$ MeV. Wyniki programu HFODD dostarczały wartości energii oraz spinów dla ustalonych w konfiguracji wartości $\hbar\omega_Y$.

W celu określenia zachowania pojedynczych jąder obserwowano na wykresach m.in. następujące zależności:

- $\beta_{20}(\omega_Y)$, pozwalającą sprawdzić, czy deformacja jądra jest zgodna z doświadczeniem (badane jądra mają kształt wydłużony (*prolate*) w stanie podstawowym, zaś stany o wysokim spinie są sferycznie symetryczne),

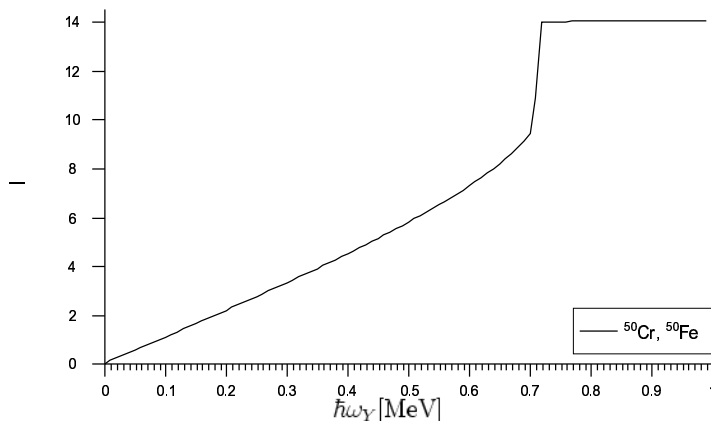
- $I(\omega_Y)$, pozwalającą określić między innymi na ile wyliczony sposób obrotu jądra odbiega od modelu sztywnego rotatora,
- $E(I(\omega_Y))$, określającą strukturę poziomów energetycznych jądra w funkcji spinu.

Z punktu widzenia analizy MED i TED, najistotniejsza jest znajomość zależności energii od spinu, $E(I(\omega_Y))$. Ponieważ z fizycznego punktu widzenia istotne są jedynie stany o pewnych określonych wartościach spinu (np. całkowitych i parzystych dla jąder parzysto-parzystych), natomiast bezpośrednio kontrolowanym parametrem symulacji jest wartość $\hbar\omega_Y$, uzyskanie wartości energii dla stanów o odpowiednich spinach wymaga dodatkowych zabiegów. Zastosowane zostały dwie metody znajdowania energii dla stanów o fizycznych wartościach spinów. Pierwsza z nich polegała na obserwacji początkowych wartości $\hbar\omega_Y$ i znajdowanych w wyniku symulacji spinów odpowiadających tym wartościom, a następnie stopniowym dopasowywaniu $\hbar\omega_Y$ tak by w kolejnych krokach uzyskiwać spiny coraz bliższe zamierzonym. Zmiany te wykonywano ręcznie, chociaż prawdopodobnie stosunkowo proste byłoby zautomatyzowanie całego procesu w ramach programu HFODD. W drugiej metodzie wykorzystywano tylko jeden zestaw wartości energii i spinów znalezionych dla wybranych na początku wartości $\hbar\omega_Y$. Korzystając z programu `interpol`, opisanego w rozdziale 6, i odwracając odwzorowanie $I(\omega_Y)$, znajdowano na drodze interpolacji wartości $\hbar\omega_Y$ oraz energii odpowiadające fizycznym wartościom spinów. Pierwsza z wymienionych metod niewątpliwie pozwala na uzyskanie dokładniejszych wyników, gdyż po kilku krokach obliczenia są faktycznie wykonywane dla takiego ω_Y , że otrzymuje się zamierzoną wartość spinu. Jej wadą jest jednak konieczność wielokrotnego powtarzania obliczeń co wiąże się z nakładem zarówno czasu procesora jak i wymaga pewnego wysiłku ze strony prowadzącego symulacje. Wyniki przedstawione w niniejszym rozdziale zostały uzyskane metodą pierwszą, natomiast obliczenia uwzględniające pairing, opisane w rozdziale 4, wykonano w oparciu o interpolację ponieważ symulacje z pairingiem zajmowały zbyt dużo czasu by możliwe było stosowanie pierwszej metody.

Bez względu na wykorzystaną metodę znajdowania energii dla stanów o równych spinach, możliwe było w większości wypadków uzyskanie sensownych wyników jedynie dla spinów nie większych niż 10 lub 12 (czasem mniej). Ponieważ w chwili przejścia fazowego między stanem zdeformowanym a stanem o symetrii sferycznej, następuje skokowa zmiana zależności $I(\omega_Y)$, w obszarze tym bardzo trudno jest dokładnie wykryć moment gdy spin przyjmuje poszukiwaną, fizyczną wartość. Przejście od spinu równego ok. 8-10 do spinu maksymalnego następowało zawsze tak szybko, że nawet znaczne

zmniejszenie kroku $\Delta\hbar\omega_Y$ nie pozwalało na pewne wyznaczenie wartości $\hbar\omega_Y$ odpowiadających poszukiwanym wartościom spinu, patrz rysunek 3.1.

W przypadku stosowania interpolacji, dodatkowym efektem utrudniającym znalezienie odpowiednich $\hbar\omega_Y$ w obszarze przejścia do najwyższych spinów jest właściwość samych funkcji wykorzystanych w programie `interpol` do interpolacji zależności $\omega_Y(I)$ w celu uzyskania wartości $\hbar\omega_Y$ odpowiadających „równym” spinom. Funkcje te, tzw. krzywe sklejane (splajny), są na poszczególnych odcinkach wielomianami trzeciego stopnia o współczynnikach dobranych tak, by sklejona krzywa była klasy C^2 . Zachowanie ciągłości dwóch pierwszych pochodnych funkcji interpolującej w punktach, w których następuje gwałtowny skok wartości interpolowanych, taki jak widoczny na rysunku 3.1 w okolicach $\hbar\omega_Y = 0.7 \text{ MeV}$, skutkuje powstawaniem artefaktów interpolacji: funkcja interpolująca może pomiędzy punktami podanymi na jej wejściu osiągać wartości znacznie odbiegające od oczekiwanych. Przykład zaznaczono linią przerywaną na wykresie 3.2, który przedstawia zależność $\hbar\omega_Y(I)$ dla przedziału spinów między 10 a 14. Punkty uzyskane za pomocą programu HFODD są takie same jak na odpowiednim fragmencie rysunku 3.1. Widać, jak krzywa interpolująca w okolicach „narożnika” utworzonego przez punkty uzyskane w symulacji odgina się w taki sposób, że funkcja odwrotna do niej przestaje być jednoznaczna. Przykładowo, wartość ω_Y odpowiadająca spinowi 12 odpowiada również pewnej innej wartości spinu (ok. 13.5), a w dodatku ω_Y to jest niższe niż ω_Y odpowiadające spinowi 10, który jeszcze mieści się w przedziale wyników interpolowanych poprawnie. Aby zredukować wpływ opisanych wyżej efektów na wynik interpolacji, kasowano „narożnik” funkcji poprzez usunięcie ze zbioru punktów, między którymi dokonuje się interpolacji, wszystkich punktów odpowiadających najwyższemu spinowi poza pierwszym. Linia ciągła na wykresie 3.2 pokazuje, że takie podejście daje znacznie lepsze wyniki niż interpolacja uwzględniająca wszystkie punkty. Naturalnie, wyniki takiej interpolacji mają sens jedynie dla ω_Y nie większego niż odpowiadające pierwszemu punktowi związanemu ze stanem terminującym. W przypadku symulacji, w których przejście fazowe miało mniej gwałtowny charakter niż w opisanym wyżej przykładzie, gdy po skoku zależności $I(\omega_Y)$, I nie osiągało od razu wartości odpowiadającej stanowi terminującemu, stosowano interpolację liniową w obszarze skoku i interpolację splajnami na pozostałych odcinkach. Pomimo stosowania ulepszonej metody, która nieco rozszerzyła zakres danych objętych poprawną interpolacją, ze względu na niemal pionowe nachylenie krzywej $I(\omega_Y)$ w obszarze przejścia fazowego, otrzymanie wiarygodnych wyników dla wysokich spinów i tak nie było możliwe.



Rysunek 3.1: Zależność całkowitego spinu od $\hbar\omega_\gamma$ dla jąder zwierciadlanych $^{50}_{24}\text{Cr}$ i $^{50}_{26}\text{Fe}$. Obliczenia wykonano z oddziaływaniem SkO i bez oddziaływania kulombowskiego. Punkty znalezione dla obu jąder pokrywają się.

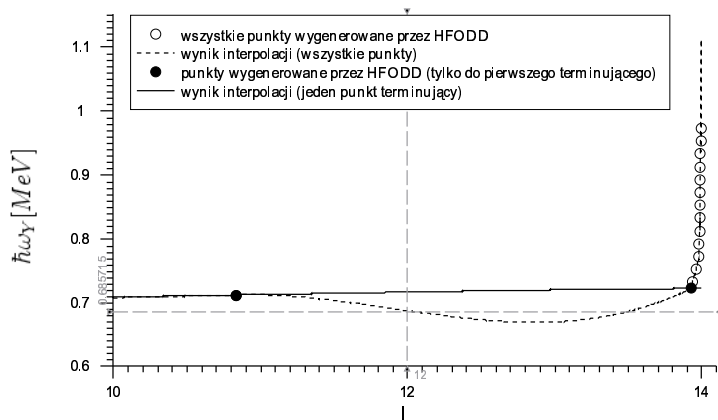
3.1 Symulacje z wyłączonym oddziaływaniem kulombowskim

Jako pierwsze przeprowadzono symulacje testowe bez oddziaływań kulombowskich, które są głównym źródłem łamania symetrii izobarycznej. W takim modelu badane jądra zachowywały się dla niskich spinów jak sztywne rotatory: zależność $I(\omega_\gamma)$ była początkowo bardzo zbliżona do liniowej (rysunek 3.1) i to pomimo stopniowego spadku deformacji jądra.

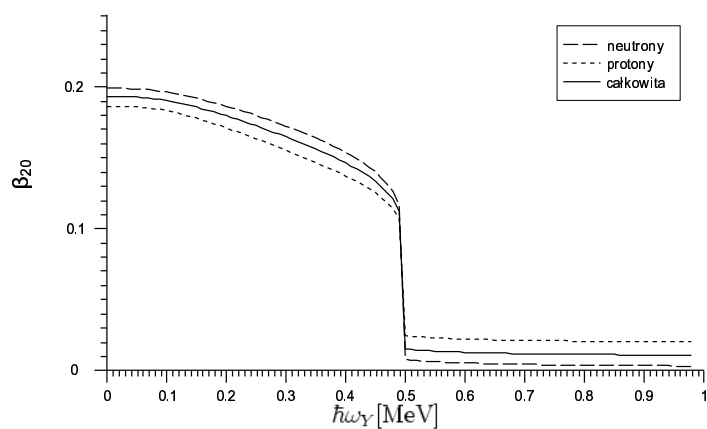
W okolicach $\hbar\omega_\gamma \approx 0.6 \pm 0.15$ MeV (różnie dla poszczególnych jąder) następowało przejście fazowe objawiające się nagłym spadkiem deformacji niemal do zera oraz skokową zmianą spinu na maksymalną wartość, co ilustruje rysunek 3.1. Zależność spinu od ω_γ była identyczna dla obu jąder wchodzących w skład każdej pary jąder zwierciadlanych, podobnie jak deformacja jądra jako całości, natomiast w ramach każdego jądra różniły się deformacje neutronów i protonów (rysunek 3.3). Deformacje neutronów i protonów zamieniały się miejscami przy przejściu do jądra zwierciadlanego. Zgodnie z oczekiwaniem, MED wynosiło zero dla wszystkich par jąder zwierciadlanych.

3.2 Symulacje z uwzględnieniem oddziaływania kulombowskiego

W celu przeprowadzenia bardziej realistycznych symulacji, włączone zostało oddziaływanie kulombowskie. Oddziaływanie to narusza samo z siebie sy-



Rysunek 3.2: Artefakty interpolacji zależności $\hbar\omega_\gamma(I)$ dla jądra ${}^{50}_{24}\text{Cr}$. Obliczenia przeprowadzono z oddziaływaniem SkO i bez oddziaływania kulombowskiego. Por. też rysunek 3.1.



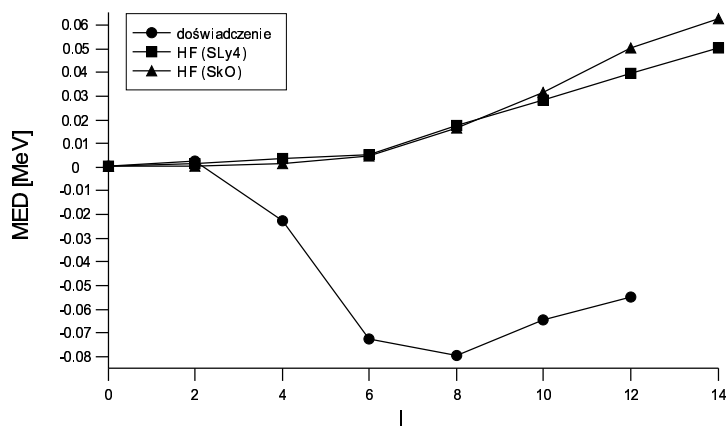
Rysunek 3.3: Zależność $\beta_{20}(\hbar\omega_\gamma)$ dla jądra ${}^{48}_{22}\text{Ti}$. Obliczenia wykonano używając oddziaływania SLy4 i bez oddziaływania kulombowskiego.

metrię izobaryczną jak również indukuje człony izowektorowe w oddziaływaniu silnym. Włączenie oddziaływania kulombowskiego pozwoliło na zaobserwowanie różnic pomiędzy jądrami zwierciadlanymi zarówno na wykresach $I(\omega_Y)$, $\beta_{20}(\omega_Y)$ jak i na wykresach MED. W szczególności, po włączeniu oddziaływania kulombowskiego, deformacje neutronów w jednym jądrze pary zwierciadlanej odbiegały nieco od deformacji protonów w drugim jądrze, czyli pojawiały się wspomniane wyżej różnice w polach izowektorowych pochodzące od oddziaływania silnego. Kształt zależności $\beta_{20}(\omega_Y)$ pozostał bardzo zbliżony do widocznego na rysunku 3.3.

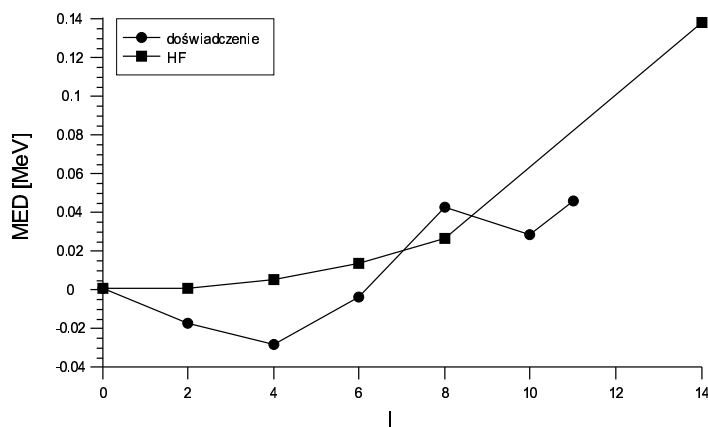
Obliczone wartości MED odbiegają jednak wyraźnie od danych doświadczalnych. Przykładowo, dla jąder ${}^{50}_{26}\text{Fe}$ i ${}^{50}_{24}\text{Cr}$, zależność $\text{MED}(I)$ uzyskana drogą symulacji miała postać zbliżoną na dużym odcinku do funkcji monotonicznie rosnącej podczas gdy dane doświadczalne pokazują funkcję o charakterystycznym kształcie litery S widocznym na rysunku 3.5. Dla jąder ${}^{46}_{24}\text{Cr}$ i ${}^{46}_{22}\text{Ti}$ nawet znak znajdowanego przez teorię MED jest inny niż pokazuje doświadczenie (rysunek 3.4). Niezgodność krzywej doświadczalnej i teoretycznej zaobserwowano także dla par zwierciadlanych jąder nieparzystych (rysunek 3.6). Postać MED zupełnie różna od oczekiwanej wskazuje na to, że przybliżenie jednocząstkowego pola średniego jest rzeczywiście zbyt powierzchowne by uchwycić szczegóły tego efektu. Wydaje się, że efekt MED obliczony w metodzie HF odzwierciedla jedynie różnice średniego promienia jądrowego w funkcji spinu w jądrach zwierciadlanych.

Rysunek 3.4 równocześnie prezentuje różnice wyników uzyskiwanych dla różnych parametryzacji sił Skyrme'a. Przedstawione na nim wyniki uzyskane dla parametryzacji SLy4 i SkO dają zbliżone wyniki dla niskich spinów, ale z rosnącym spinem znajdują się przy tych dwóch parametryzacjach wartości MED oddalają się coraz bardziej od siebie. Na rysunku 3.7 widać, w jaki sposób same energie wzbudzeń pojedynczego jądra znalezione przy użyciu różnych parametryzacji oddalają się od siebie wraz ze wzrostem spinu. Oczywiście jest też silna niezgodność wartości energii wzbudzeń znajdowanych metodą Hartree-Focka z danymi doświadczalnymi.

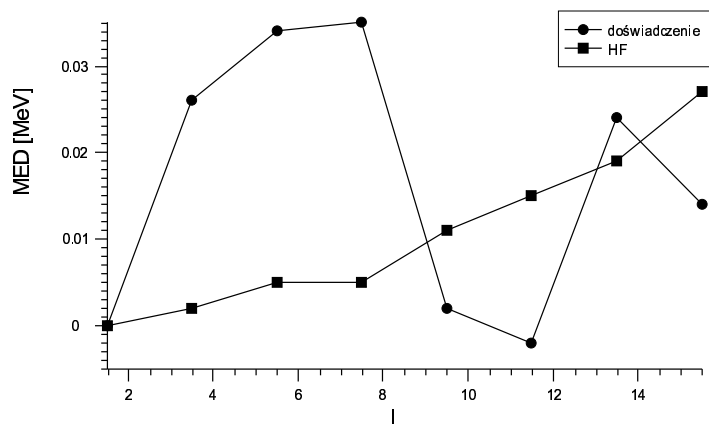
Wyznaczone w drodze symulacji wartości TED także istotnie odbiegały od wartości doświadczalnych. Widoczna na rysunku 3.8 zależność TED od spinu dla ${}^{46}_{24}\text{Cr}$, ${}^{46}_{22}\text{Ti}$ i ${}^{46}_{23}\text{V}$ pokazuje, że wartości wyznaczone metodą HF mają zupełnie inny przebieg niż wartości eksperymentalne i różnią się od nich nie tylko wielkością, ale nawet znakiem. Rysunek 3.9 pokazuje obliczoną dla tych samych jąder zależność od spinu wartości TED^* , tzn. wielkości obliczanej tak samo jak TED ale dla energii przejść zamiast dla energii wzbudzeń. Również na tym wykresie zależność doświadczalna i znaleziona na podstawie obliczeń HF różnią się istotnie. Jak pokażemy niżej, główną przyczyną tak dużych



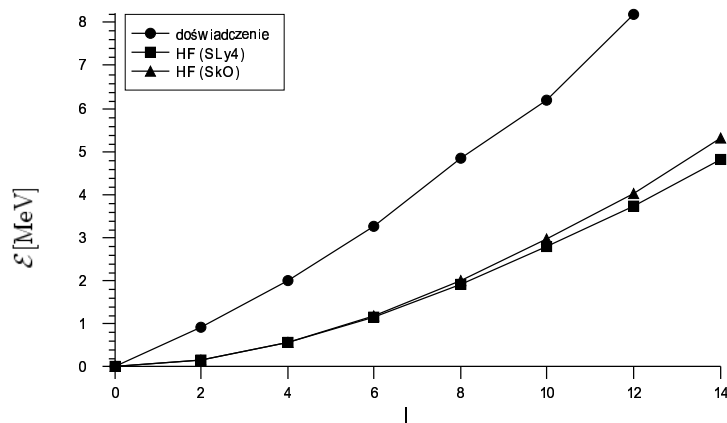
Rysunek 3.4: Doświadczalna i obliczona metodą HF z oddziaływaniami SLy4 i SkO zależność MED jąder $^{46}_{22}\text{Ti}$ i $^{46}_{24}\text{Cr}$ od spinu. Dane doświadczalne zaczerpnięto z pracy [21].



Rysunek 3.5: Doświadczalna i obliczona metodą HF z oddziaływaniem SLy4 zależność MED jąder $^{50}_{24}\text{Cr}$ i $^{50}_{26}\text{Fe}$ od spinu. Dane doświadczalne zaczerpnięto z pracy [11].



Rysunek 3.6: Doświadczalna i obliczona metodą HF z oddziaływaniem SLy4 zależność MED jąder $^{47}_{24}\text{Cr}$ i $^{47}_{23}\text{V}$ od spinu. Dane doświadczalne zaczerpnięto z pracy [20].



Rysunek 3.7: Doświadczalna i obliczona metodą HF z oddziaływaniami SLy4 i SkO energia wzbudzenia jądra $^{46}_{24}\text{Cr}$ w funkcji spinu.

rozbieżności między teorią i doświadczeniem jest niefizyczne naruszenie symetrii izobarycznej przez rozwiązania HF w jądrze ${}_{23}^{46}\text{V}$. Aby to zilustrować, rozważmy stan podstawowy tego nieparzysto-nieparzystego jądra atomowego o $N = Z$. Jeżeli pominiemy efekty kulombowskie i efekty związane z naruszeniem symetrii względem odwrócenia w czasie, to stan podstawowy będzie zdegenerowany z powodu degeneracji Kramersa lub degeneracji sygnaturowej. W szczególności, dla interesującej nas konfiguracji, w której nieparzysty proton i nieparzysty neutron poruszają się w stanach odwróconych w czasie (lub, równoważnie, o przeciwnej sygnaturze), pole średnie dopuszcza dwa niezależne i zdegenerowane rozwiązania (wyznaczniki Slatera), które możemy zapisać symbolicznie jako: $|n\bar{p}\rangle$ i $|p\bar{n}\rangle$. Zauważmy, że przy zamianie neutronu w proton i vice versa, stany te przechodzą wzajemnie w siebie, co oznacza, że w sposób jawny łamią symetrię izobaryczną. Dopiero ich kombinacje liniowe:

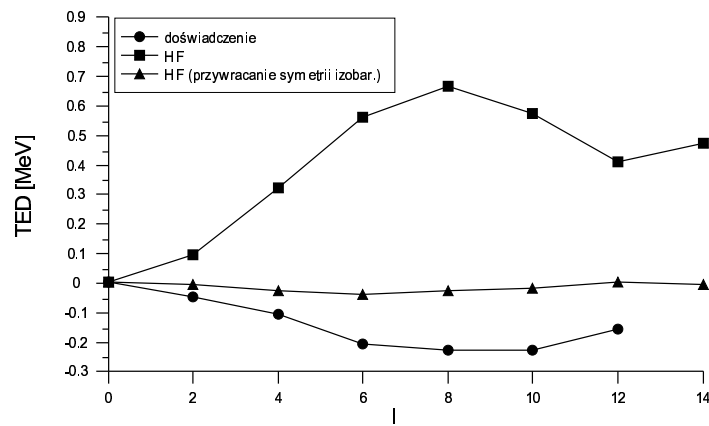
$$|\pm\rangle = \frac{1}{2}(|n\bar{p}\rangle \pm |p\bar{n}\rangle) \quad (3.1)$$

są niezmiennicze względem zamiany neutronu w proton i vice versa. Kombinacja symetryczna odpowiada stanowi singletowemu $|+\rangle \equiv |T=0, T_z=0\rangle$, zaś kombinacja antysymetryczna odpowiada interesującemu nas stanowi trypletowemu $|-\rangle \equiv |T=1, T_z=0\rangle$. Model pola średniego nie pozwala na bezpośrednie obliczenie oddziaływania pomiędzy tymi stanami, ale pozwala na oszacowanie siły tego efektu. Wykorzystuje się tutaj symetrię izobaryczną, tj. fakt, że po wyłączeniu oddziaływania kulombowskiego stany trypletowe $|T=1, T_z=\pm 1\rangle$ i $|T=1, T_z=0\rangle$ powinny być zdegenerowane, oraz fakt, że HF pozwala na bezpośrednie obliczenie energii stanów $|T=1, T_z=\pm 1\rangle$. Skorygowana energia wzbudzenia stanu trypletowego $|J, T=1, T_z=0\rangle$, $\mathcal{E}_{\text{sr}}(J, T_z=0)$, w jądrze $N = Z$ wynosi:

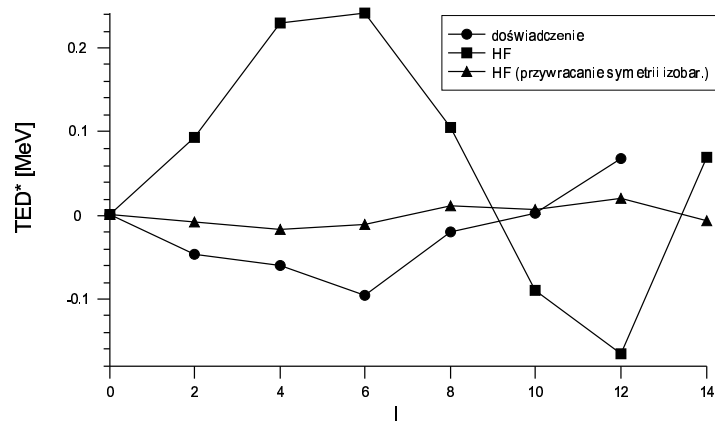
$$\mathcal{E}_{\text{sr}}(J, T_z=0) = \mathcal{E}_{\text{HF}}(J, T_z=0) - (\mathcal{E}_{\text{HF}}^{\text{NC}}(J, T_z=0) - \mathcal{E}_{\text{HF}}^{\text{NC}}(J, T_z=\pm 1)), \quad (3.2)$$

gdzie $\mathcal{E}_{\text{HF}}^{\text{NC}}(J, T_z=0)$ i $\mathcal{E}_{\text{HF}}^{\text{NC}}(J, T_z=\pm 1)$ są energiami wzbudzeń obliczonymi metodą Hartree-Focka po wyłączeniu oddziaływania kulombowskiego.

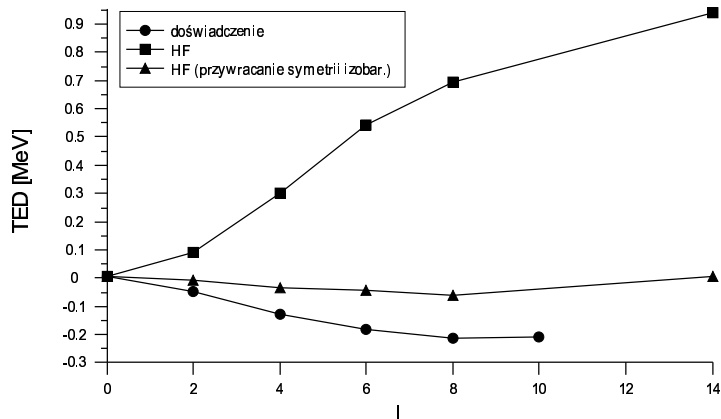
Wartości TED_{sr} (*symmetry-restored TED*), tj. TED z przywróconą symetrią izobaryczną zostały oznaczone na rysunkach 3.8, 3.9 i 3.10 za pomocą trójkątów. Wartość TED_{sr} obliczono podobnie jak wartość standardowego TED, tj. korzystając z równania (1.15), ale podstawiając w miejsce energii wzbudzenia jądra ${}_{23}^{46}\text{V}$ obliczonej metodą HF wartości skorygowane według zależności (3.2). Wykresy TED_{sr} choć nadal odbiegają znacząco od wykresów doświadczalnych wartości TED, są im znacznie bliższe niż krzywe obliczone bezpośrednio metodą HF. Wynik ten pokazuje, że rozwiązania średniopolewe w jądrach o $N \sim Z$ powinny być traktowane z dużą dozą krytycyzmu ze względu na niefizyczne efekty spontanicznego naruszenia symetrii izobarycznej dla pewnych konfiguracji.



Rysunek 3.8: Doświadczalna i obliczona metodą HF z oddziaływaniem SLy4 zależność TED jąder $^{46}_{24}\text{Cr}$, $^{46}_{22}\text{Ti}$ i $^{46}_{23}\text{V}$ od spinu.

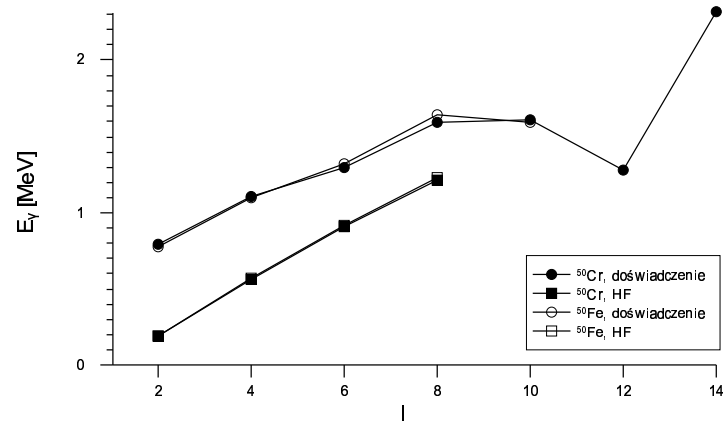


Rysunek 3.9: Doświadczalna i obliczona metodą HF z oddziaływaniem SLy4 zależność TED* jąder $^{46}_{24}\text{Cr}$, $^{46}_{22}\text{Ti}$ i $^{46}_{23}\text{V}$ od spinu.



Rysunek 3.10: Doświadczalna i obliczona metodą HF z oddziaływaniem SLy4 zależność TED jąder ^{50}Fe , ^{50}Cr i ^{55}Mn od spinu.

Nie tylko wartości MED i TED obliczone metodą HF odbiegają istotnie od danych eksperymentalnych, ale również same wartości energii stanów wzbudzonych \mathcal{E} oraz energie przejść E_γ znacznie różnią się od wartości znanych z doświadczenia. Przykładowo, dla jądra ^{50}Fe energia wzbudzenia stanu 2^+ znaleziona w wyniku symulacji była niższa od wartości doświadczalnej o ok. 0.5 MeV (czyli o 60%), zaś stanu 10^+ — o ok. 1.6 MeV (25%). Na rysunku 3.11 przedstawiono porównanie energii przejść dla jąder ^{50}Cr i ^{50}Fe uzyskanych doświadczalnie oraz obliczonych metodą HF. Widoczna jest zupełna rozbieżność teorii z wynikami eksperymentalnymi. Rozbieżność ta jest zapewne główną przyczyną złej zgodności dla MED i TED otrzymanej w niniejszej pracy. Jednym z powodów złej zgodności pomiędzy obliczonymi i doświadczalnymi energiami wzbudzenia jest niewątpliwie pominięcie korelacji *pairing*. W następnym rozdziale pokażemy na ile i w jaki sposób korelacje te poprawiają zgodność obliczeń z danymi eksperymentalnymi.



Rysunek 3.11: Doświadczalne i obliczone metodą HF energie przejść E_γ dla jąder $^{50}_{24}\text{Cr}$ i $^{50}_{26}\text{Fe}$ (SLy4).

Rozdział 4

Obliczenia w modelu HFB

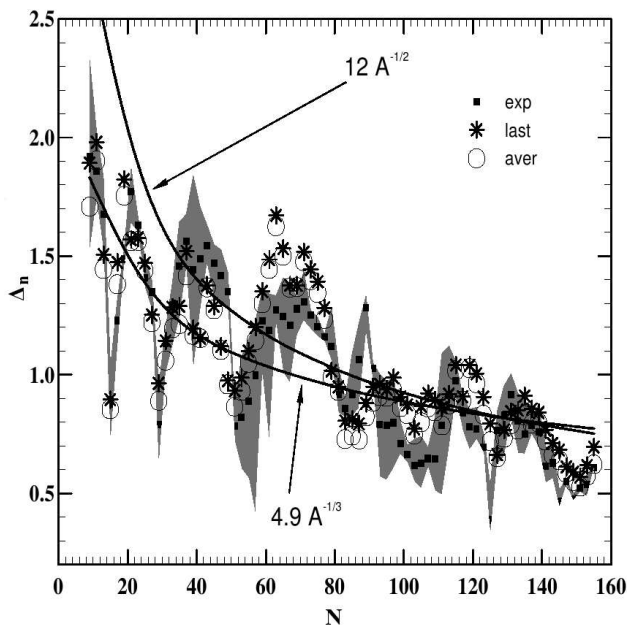
W celu uczynienia stosowanego modelu bardziej realistycznym, w niniejszym rozdziale przeprowadzono obliczenia MED uwzględniające korelacje typu nadprzewodnikowego (*pairing*) w ramach przybliżenia HFB (patrz rozdział 2.3). Oddziaływanie pairing przyjęto w postaci siły delta zależnej od gęstości, $V(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r})$, gdzie:

$$f(\mathbf{r}) = V_0 + V_1\rho^\alpha(\mathbf{r}) = V_0 \left(1 - \left(\frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho_0} \right)^\alpha \right). \quad (4.1)$$

W obliczeniach przedstawionych w niniejszym rozdziale przyjęto $\alpha = 1$ i rozważono trzy rodzaje sił pairing: objętościowe, powierzchniowe i mieszane. Pairing, dla którego $V_1 = 0$, nazywany jest pairingiem objętościowym. Pairing powierzchniowy oraz mieszany, dla których $V_1 \neq 0$, definiuje się za pomocą parametru ρ_0 . W obliczeniach przyjęto odpowiednio $\rho_0 \approx \rho_o$ i $\rho_0 \approx 2\rho_o$, gdzie $\rho_o \approx 0.16 \text{ fm}^{-3}$ jest tzw. gęstością nasycenia dla sił jądrowych. Wszystkie rodzaje pairingu rozważane w pracy zależą zatem od globalnego natężenia sił pairing V_0 , które może być różne dla protonów i neutronów.

4.1 Dobór parametrów i rodzaju pairingu

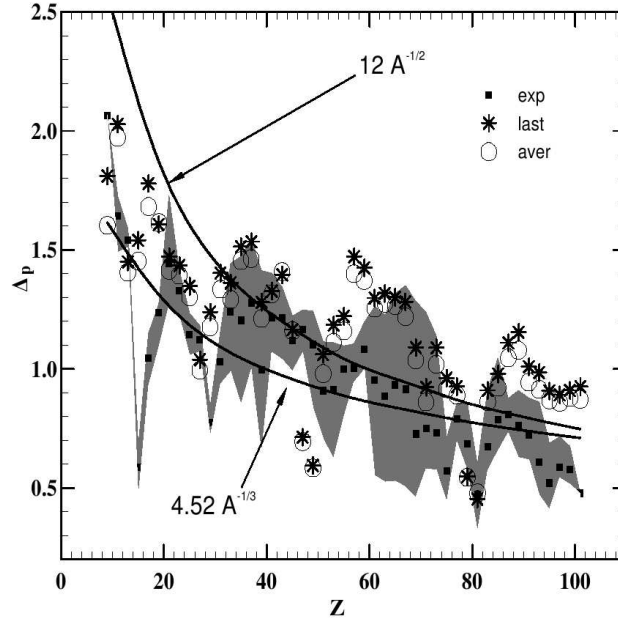
Obliczenia metodą HFB wymagają na wstępie określenia charakteru oddziaływań pairing i dopasowania występujących w równaniu (4.1) parametrów pairingu do danych doświadczalnych. Dane doświadczalne wskazują, że rozważane jądra są jądrami nadprzewodnikowymi o neutronowych szczelinach energetycznych rzędu $\Delta_n \sim 1.6 \pm 0.2 \text{ MeV}$ (patrz rysunek 4.1), a jednocześnie są one dobrze zdeformowane o parametrze deformacji $\beta_{20} \sim 0.16 \pm 0.04$, o czym świadczy występowanie pasm rotacyjnych. Okazuje się, że jednoczesne spełnienie tych kryteriów w zasadzie wyklucza z rozważań pairing



Rysunek 4.1: Zależność przerwy energetycznej neutronów od ich liczby w jądrze (za [22]).

o charakterze powierzchniowym i mieszanym, a przynajmniej silnie preferuje pairing objętościowy. Istotnie, wiadomo że wraz ze wzrostem natężenia sił pairing następuje przejście fazowe od stanu zdeformowanego do sferycznego. Szczegółowe obliczenia przeprowadzone dla jądra ${}_{22}^{46}\text{Ti}$ pokazują, że w przypadku pairingu powierzchniowego bądź mieszanego przejście takie następuje przed osiągnięciem dolnej granicy doświadczalnej wartości neutronowej szczeliny energetycznej, co ilustruje wykres 4.3. Jedynie dla pairingu objętościowego otrzymane wyniki okazują się być konsystentne z danymi doświadczalnymi. Wynik ten, wskazując w tak jednoznaczny sposób na charakter oddziaływań pairing w wymienionym jądrze jest niezwykle atrakcyjny i wymaga dalszych pogłębionych badań. Jest on zarazem bardzo zaskakujący ponieważ wielkoskalowe obliczenia masowe wydają się preferować pairing o charakterze mieszanym, patrz np. praca [13]. Warto jednak podkreślić, że w obliczeniach tego rodzaju nie żąda się konsystencji pomiędzy typem pairingu, a danymi dotyczącymi szczeliny energetycznej i deformacji.

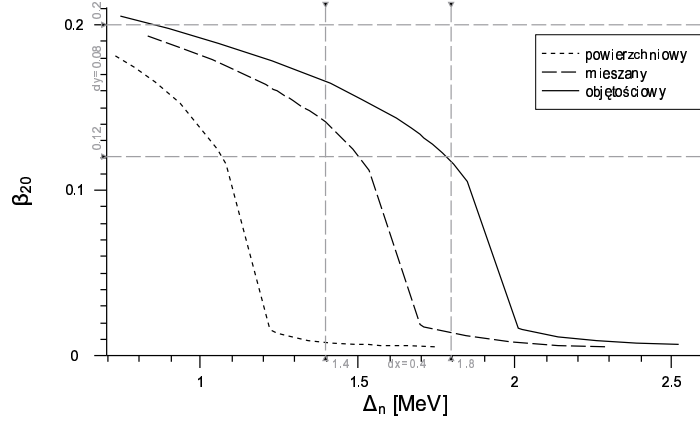
Bazując na wynikach obliczeń wartości deformacji w funkcji szczeliny energetycznej, w dalszych rozważaniach przyjęto, że w analizowanych jądrach dominuje pairing objętościowy. W celu ustalenia natężenia oddziaływań pairing, dla każdego jądra, a ściślej Z i N , odczytano z wykresów 4.1 i 4.2 średnie wartości doświadczalne przerw energetycznych dla neutronów i pro-



Rysunek 4.2: Zależność przerwy energetycznej protonów od ich liczby w jądrze (za [22]).

tonów w stanie podstawowym (punkty oznaczone symbolem exp). Następnie, przy założeniu że pairing ma charakter objętościowy i że natężenia pairingu są identyczne dla obu rodzajów nukleonów: $V_0^n = V_0^p = V_0$, stopniowo zmieniano wartość parametru V_0 aż do otrzymania neutronowej przerwy energetycznej zgodnej z doświadczeniem. Dopasowanie wykonano ustalając V_0 z dokładnością 0.5 MeV. Okazało się jednak, że dla wszystkich analizowanych jąder dopasowanie wspólnych parametrów dla neutronów i protonów nie pozwala na jednoczesne odtworzenie doświadczalnych wielkości przerw energetycznych dla obu rodzajów nukleonów, co ilustruje tabela 4.1. Po dopasowaniu parametrów tak, by poprawnie odtworzona była neutronowa przerwa energetyczna, protonowa szczelina energetyczna zauważalnie odbiegała od wartości doświadczalnej. Podobnie, dopasowanie natężenia V_0 wspólnego dla obu rodzajów nukleonów tak, by zgodna z doświadczeniem była wielkość przerwy energetycznej protonów, skutkowało rozbieżnością między teoretyczną a doświadczalną wielkością przerwy energetycznej neutronów. Konieczne stało się zatem zdefiniowanie pairingu o różnych natężeniach dla neutronów i protonów, a więc jawne naruszenie symetrii izobarycznej w tym kanale oddziaływania.

Przyjęto tu dwie strategie: (i) dopasowanie V_0^n i V_0^p tak, aby odtworzyć doświadczalne średnie szczeliny energetyczne oraz (ii) dopasowanie V_0^n



Rysunek 4.3: Zależność deformacji jądra ${}^{46}_{22}\text{Ti}$ od przerwy energetycznej neutronów dla różnych parametrów pairingu w metodzie HFB (oddziaływanie SLy4).

w taki sposób, aby odtworzyć dla danej pary jąder zwierciadlanych (${}^A_Z\text{X}_N$, ${}^A_N\text{Y}_Z$) średnie doświadczalne neutronowe szczeliny energetyczne, a następnie dopasować V_0^P w taki sposób aby:

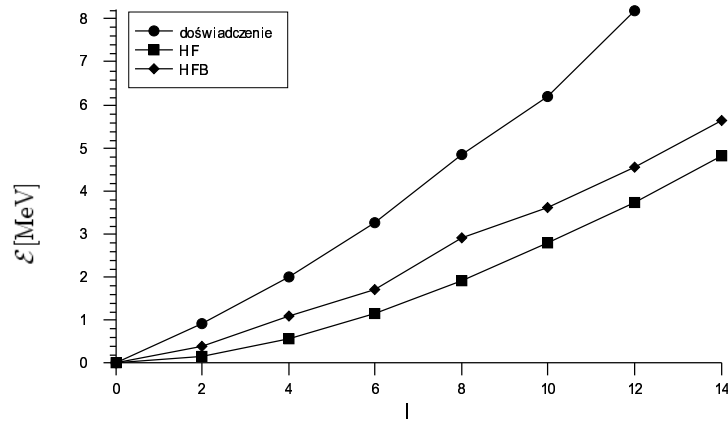
$$\Delta_p({}^A_N\text{Y}) = \Delta_n({}^A_Z\text{X}) \quad \text{oraz} \quad \Delta_p({}^A_Z\text{X}) = \Delta_n({}^A_N\text{Y}). \quad (4.2)$$

Taka procedura przywraca symetrię izobaryczną (rozumianą tu jako niezmienniczość obserwabli przy zamianie neutronów na protony) na poziomie szczelin energetycznych w stanie podstawowym. Wyniki dopasowań zebrano w tabeli 4.1.

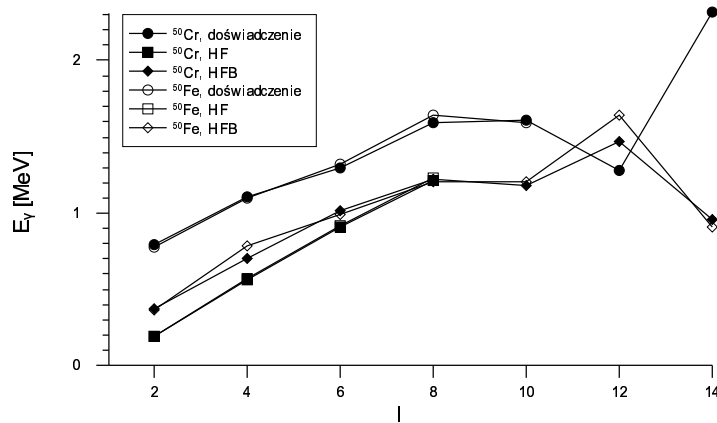
4.2 Obliczenia MED w modelu HFB

Po dopasowaniu optymalnych parametrów pairingu, przeprowadzono obliczenia analogiczne do tych z rozdziału 3, wprawiając jądra w obrót a następnie znajdując poprzez interpolację wynikiem energie stanów odpowiadających fizycznym wartościom momentu pędu.

Włączenie pairingu istotnie zmieniło uzyskiwany w wyniku symulacji obraz struktury poziomów energetycznych jądra. Porównując doświadczalny przebieg energii wzbudzeń jądra ${}^{46}_{24}\text{Cr}$ w funkcji spinu z przebiegiem uzyskanym metodami HF i HFB (rysunek 4.4), można od razu zauważyć, że metoda HFB poprawia wyniki w stosunku do metody Hartree-Focka nie uwzględniającej pairingu. Energie wzbudzeń w modelu HFB są bliższe wartościom doświadczalnym niż energie uzyskane metodą HF. Widać jednak wyraźnie, iż, pomimo że parametry pairingu dobrano tak by wielkości przerw energetycznych nukleonów były zgodne z doświadczeniem, obliczone energie wzbudzeń



Rysunek 4.4: Doświadczalna i obliczona metodami HF oraz HFB z oddziaływaniem SLy4 energia wzbudzenia jądra $^{46}_{24}\text{Cr}$ w funkcji spinu. Por. rysunek 3.7.



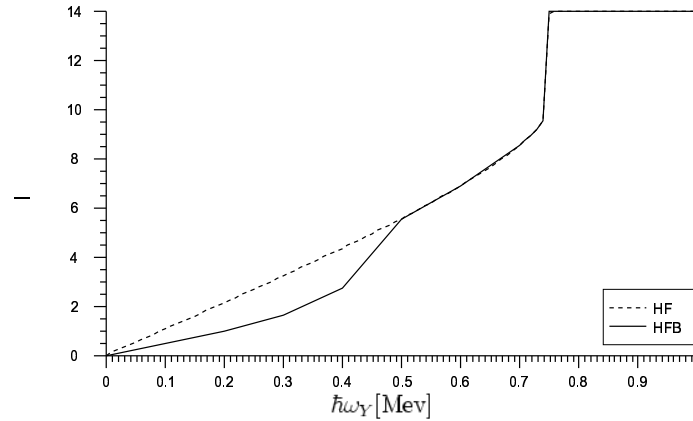
Rysunek 4.5: Doświadczalne i obliczone metodami HF oraz HFB energie przejść E_γ dla jąder $^{50}_{24}\text{Cr}$ i $^{50}_{26}\text{Fe}$ oraz oddziaływania SLy4.

Tablica 4.1: Natężenia sił pairing odtwarzające wielkości średnich doświadczalnych przerw energetycznych pokazane na wykresach 4.1 i 4.2. Wszystkie wielkości podano w MeV. Wartości teoretyczne wyliczono dla siły Skyrme'a SLy4.

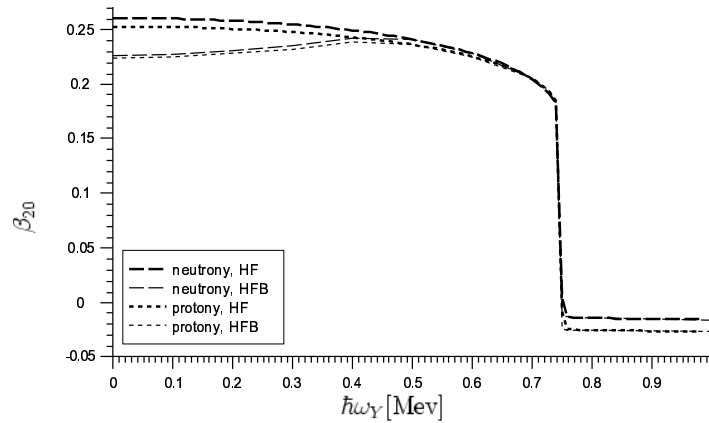
	A=46		A=50	
	⁴⁶ ₂₄ Cr	⁴⁶ ₂₂ Ti	⁵⁰ ₂₆ Fe	⁵⁰ ₂₄ Cr
Odczytane z wykresów 4.1 i 4.2 doświadczalne wartości $\Delta_{n/p}$				
Δ_n^{exp}	1.63	1.40	1.40	1.35
Δ_p^{exp}	1.15	1.35	1.13	1.15
Dopasowanie Δ_n do wartości doświadczalnej				
$V_0^n = V_0^p$	-229.5	-219.5	-230.5	-233.5
Δ_n	1.629	1.394	1.399	1.349
Δ_p	1.467	1.221	0.944	1.284
Dopasowanie Δ_p do wartości doświadczalnej				
$V_0^n = V_0^p$	-221	-224	-236.5	-229
Δ_n	1.372	1.579	1.604	1.195
Δ_p	1.146	1.346	1.130	1.149
Dopasowanie obu Δ do odpowiednich wartości doświadczalnych				
V_0^n	-231	-219	-234	-230.5
V_0^p	-220	-225.5	-228.5	-237
Δ_n	1.627	1.404	1.357	1.407
Δ_p	1.152	1.350	1.143	1.134
Dopasowanie obu Δ do doświadczalnego Δ_n (przywracanie symetrii izobarycznej)				
V_0^n	-230	-217	-230	-233.5
V_0^p	-227.5	-237.5	-244.5	-237.5
Δ_n	1.630	1.394	1.400	1.356
Δ_p	1.398	1.632	1.357	1.402

nadal są istotnie niższe od wartości doświadczalnych. Oznacza to, że rozpatrywany model średniego pola z pairingiem nie jest w stanie odtworzyć energii wzbudzenia w pasmach rotacyjnych rozważanych jąder atomowych. Warto przypomnieć, że istotne zwiększenie natężenia korelacji par jest niemożliwe ze względu na dyskutowane w poprzednim paragrafie przejście fazowe od kształtu zdeformowanego do sferycznego.

Wykres 4.5 przedstawia interesujące porównanie uzyskanych różnymi metodami wartości energii przejść oraz ich wartości doświadczalnych dla badanych jąder o $A=50$. Ze względów opisanych w rozdziale 3, wyniki uzyskane dla $I > 10$ nie są wiarygodne, ale początkowy fragment wykresu pokazuje



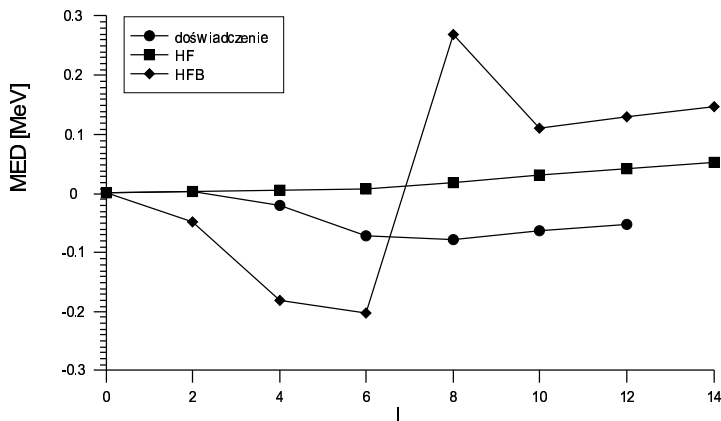
Rysunek 4.6: Porównanie zależności spinu od ω_Y dla jądra ${}^{50}_{26}\text{Fe}$ i metod HF oraz HFB z oddziaływaniem SLy4.



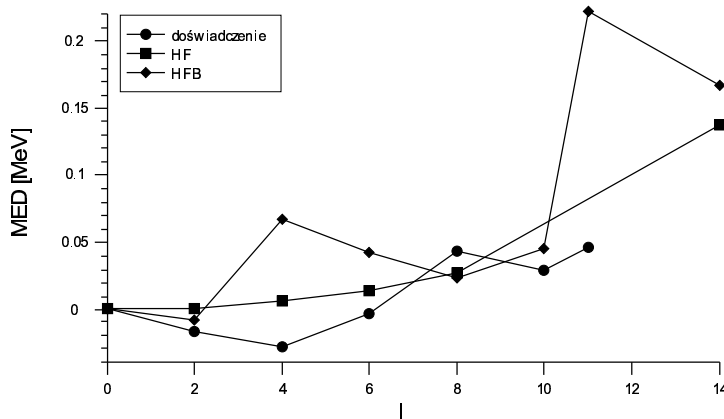
Rysunek 4.7: Porównanie zależności deformacji od ω_Y dla jądra ${}^{50}_{26}\text{Fe}$ i metod HF oraz HFB z oddziaływaniem SLy4.

dokładnie ważną prawidłowość. Dla $I=2$, wyniki metody HFB są zauważalnie przesunięte w górę względem wyników metody HF. Dla rosnącego spinu, odległość pomiędzy wykresami maleje, a dla $I=8$ energie obliczone obiema metodami osiągają praktycznie identyczną wartość. Jest to spowodowane stopniowym zanikiem korelacji pairing wraz z rosnącą prędkością obrotu jądra. Zjawisko to jest analogiczne do znanego w materii skondensowanej efektu Meissnera, tj. zaniku korelacji nadprzewodnikowych pod wpływem pola magnetycznego. Dla wysokich spinów, pairing nie odgrywa już praktycznie żadnej roli, tak więc różnice energii w stosunku do stanów o niższym spinie (tj. energie przejść gamma) są niemal takie same jak w metodzie HF.

Zjawisko stopniowego zanikania korelacji par wraz z obrotem jądra jest wyraźnie widoczne na wykresach 4.6 i 4.7, przedstawiających moment pędu



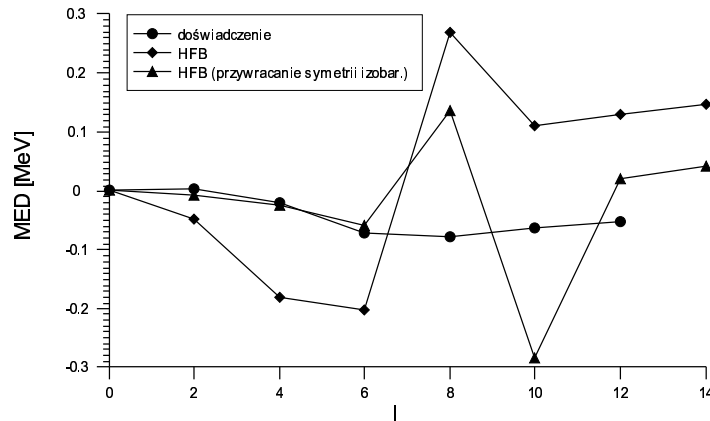
Rysunek 4.8: Doświadczalna i obliczona metodami HF oraz HFB z oddziaływaniem SLy4 zależność MED jąder $^{46}_{22}\text{Ti}$ i $^{46}_{24}\text{Cr}$ od spinu.



Rysunek 4.9: Doświadczalna i obliczona metodami HF oraz HFB z oddziaływaniem SLy4 zależność MED jąder $^{50}_{24}\text{Cr}$ i $^{50}_{26}\text{Fe}$ od spinu.

oraz deformację jądra w funkcji częstości obrotu ω_Y . Przebieg obu tych wielkości przy niskich wartościach ω_Y różni się w sposób istotny w metodach HFB i HF. Powyżej prędkości obrotu $\hbar\omega_Y \approx 0.45$ MeV wyniki uzyskane metodami HFB i HF stają się identyczne. Prędkość kątowna $\hbar\omega_Y \approx 0.45$ MeV jest prędkością krytyczną odpowiadającą zanikowi szczelin energetycznych. Takie zachowanie jest zgodne z oczekiwanym. Pairing poprawia wyniki przybliżenia HF poprzez obniżenie energii stanów o niskich spinach, ale poprawa ta nadal nie pozwala na otrzymanie struktury energetycznej jąder zgodnej z doświadczeniem.

Po zbadaniu wpływu pairingu na podstawowe parametry jądra, rozpatrzono bardziej subtelne efekty, wyrażające się poprzez zależność od spinu wartości MED. Rysunki 4.8 i 4.9 pokazują przebieg MED dla par jąder zwier-

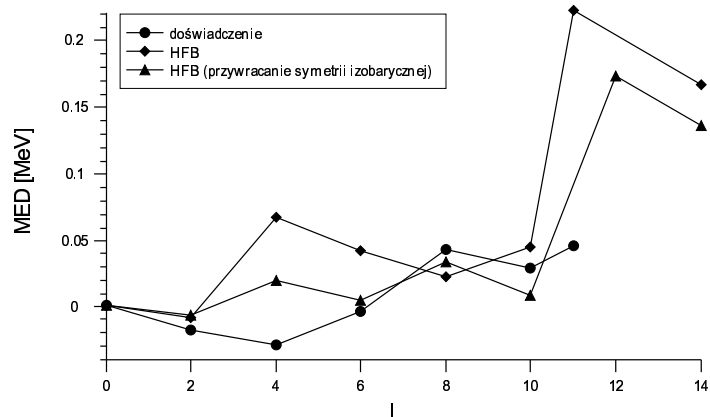


Rysunek 4.10: Porównanie przebiegów MED: doświadczalnego oraz uzyskanego metodą HFB przy standardowym dopasowaniu parametrów pairingu i przy dopasowaniu przywracającym symetrię izobaryczną dla jąder zwierciadlanych o $A=46$.

ciadlanych o $A=46$ i $A=50$ uzyskany metodami HF i HFB. W obu wypadkach widoczna jest znaczna zmiana przebiegu krzywej po włączeniu pairingu. Podczas gdy krzywa uzyskana metodą HF jest w przypadku obu par jąder zwierciadlanych monotonicznie rosnąca i nie przyjmuje nigdzie wartości ujemnych, krzywa uzyskana metodą HFB ma znacznie bardziej złożony przebieg, pod pewnymi względami bardziej zbliżony do krzywej doświadczalnej. W szczególności, warto zwrócić uwagę na ujemne wartości MED w obszarze niskich momentów pędu.

Pomimo pewnej poprawy w stosunku do metody HF, krzywe MED obliczone metodą HFB nadal zauważalnie odbiegają od krzywych eksperymentalnych. W przypadku jąder o $A=46$, początkowy odcinek krzywej charakteryzuje się kształtem podobnym do krzywej doświadczalnej, ale obliczone wartości MED są kilkukrotnie większe od poprawnych. W obszarze spinów odpowiadających przejściu fazowemu od fazy nadprzewodnikowej do normalnej następuje gwałtowna zmiana znaku wartości MED. Obliczenia HFB zbliżają się do wyników metody HF. Dla jąder o $A=50$ obliczona wartość MED pokrywa się z doświadczalną dla $I=2$. Jednakże już dla $I=4$ następuje nagły skok i krzywa HFB rozbiega się całkowicie zarówno z krzywą doświadczalną jak i z krzywą uzyskaną metodą HF.

Wyniki uzyskane dla parametrów pairingu przywracających symetrię izobaryczną okazały się bardzo bliskie wynikom doświadczalnym. Uzyskany tą metodą przebieg MED dla jąder o $A=46$, przedstawiony na wykresie 4.10, jest w całym przedziale wiarygodnych wyników, czyli do $I=6$ włącznie (patrz uwagi o interpolacji w rozdziale 3), niemal idealnie zgodny z danymi eksperymentalnymi. Dla pary $A=50$ (wykres 4.11) zgodność z doświadczeniem jest



Rysunek 4.11: Porównanie przebiegów MED: doświadczalnego oraz uzyskanego metodą HFB przy standardowym dopasowaniu parametrów pairingu i przy dopasowaniu przywracającym symetrię izobaryczną dla jąder zwierciadlanych o $A=50$.

również świetna. Jedyne dla $I=4$ widać pewną rozbieżność pomiędzy teorią i doświadczeniem. Przeprowadzone obliczenia pokazują, że przywracanie symetrii izobarycznej jest prawdopodobnie kluczem do zrozumienia i odtworzenia wyników doświadczalnych i powinno stać się przedmiotem dalszych systematycznych badań.

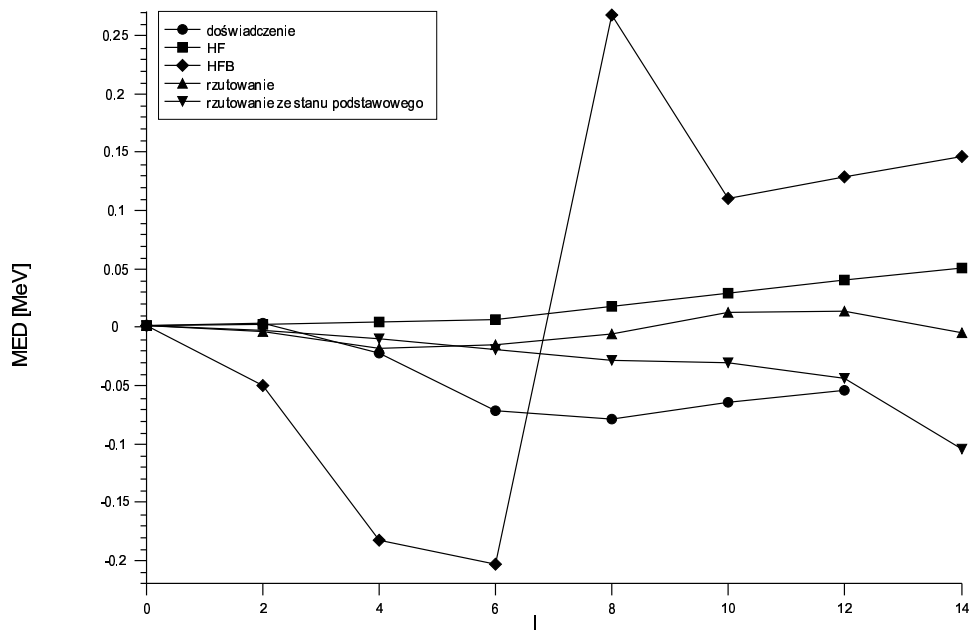
Rozdział 5

Podsumowanie

W niniejszej pracy podjęto próbę odtworzenia metodą średniopolową zależności wielkości MED i TED kilku par jąder zwierciadlanych z obszaru masowego $A \sim 45$ od spinu. Zastosowano samozgodny model Hartree-Focka z oddziaływaniem Skyrme'a i model Hartree-Focka-Bogoliubowa z oddziaływaniem typu delta Diraca w kanale pairing. Symulacje wykonane w modelu Hartree-Focka wykazały, że ten model oddziaływań jądrowych nie jest w stanie odtworzyć doświadczalnego zachowania MED i TED. Nawet zupełnie podstawowe cechy jąder, takie jak np. energie wzbudzenia, istotnie odbiegały od wartości eksperymentalnych. W przypadku TED, wyniki uległy zauważalnej poprawie po zastosowaniu procedury przywracania symetrii izobarycznej naruszanej przez przybliżenie HF. Po uwzględnieniu oddziaływania pairing i wykonaniu obliczeń metodą HFB, okazało się, że pairing wprawdzie przybliżył nieco energie wzbudzeń do wartości doświadczalnych i dość istotnie zmienia przebieg teoretycznej zależności MED od spinu, ale nadal generuje wyniki znacznie odbiegające od rzeczywistych. W szczególności, w przybliżeniu HFB niemożliwym okazało się odtworzenie energii wzbudzenia pasma rotacyjnego nawet przy sztucznie zawyżonej wartości natężenia sił pairing, ze względu na przejście kształtu jądra od zdeformowanego do sferycznego. Jednym z najciekawszych wyników uzyskanych w niniejszej pracy było pokazanie, na przykładzie jądra ${}^{46}_{22}\text{Ti}$, że w badanych tu jądrach występuje pairing, którego charakter jest w przeważającym stopniu objętościowy.

Wstępne wyniki uzyskane metodą HFB z przywracaniem symetrii izobarycznej okazały się znacznie lepsze od wyników uzyskanych dla standardowego dopasowania parametrów pairingu i porównywalne z wynikami uzyskanymi w modelu powłokowym. Problem przywracania symetrii izobarycznej może stanowić interesujący temat do dalszych badań.

Alternatywną ścieżką badań jest rozwinięcie metod wychodzących poza przybliżenie pola średniego poprzez wyrzutowanie funkcji falowych na skła-



Rysunek 5.1: Doświadczalna i obliczona metodami HF oraz HFB z oddziaływaniem SLy4 zależność MED jąder ${}^{46}_{22}\text{Ti}$ i ${}^{46}_{24}\text{Cr}$ od spinu w porównaniu z wynikami uzyskanymi metodą rzutową z funkcji falowej HF. Por. też wykres 3.4.

dowe o dobrym momencie pędu. Wstępne wyniki takiej analizy wydają się być bardzo obiecujące, co pokazuje wykres 5.1. Analiza tego typu mogłaby stać się ważnym uzupełnieniem podejścia przedstawionego w niniejszej pracy.

Rozdział 6

Załącznik A – kod programu interpol

Program interpol umożliwia interpolację funkcji pomiędzy znanymi punktami za pomocą splajnów. Został on napisany w C++ przy użyciu biblioteki `gsl` ([24]).

```
//interpol.cpp - interpolacja cubic splinem
//Wejscie: ciag wierszy postaci
//x y
//gdzie x i y sa liczbami typu double
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <list>

#include <gsl/gsl_interp.h>
#include <gsl/gsl_spline.h>

#define LINE_LEN 100

void usage(char *executable)
{
    printf("Usage:\n%s [-a] (<output-x-start> [output-x-end] [output-x-step]"
           " | - <point1> [point2] ...)\n", executable);
    printf("\t-a\tUse Akima instead of regular cubic splines\n");
}

int main(int argc, char **argv)
{
    const gsl_interp_type *interpType = gsl_interp_cspline;
    unsigned int minNumPoints = 3;
    if (argc < 2) {
        usage(argv[0]);
        return 1;
    }
    int aoffs = 1;
    if (argc >= aoffs+2 && strcmp(argv[aoffs], "-a") == 0) {
        interpType = gsl_interp_akima;
        minNumPoints = 5;
        aoffs++;
    }
    //lista punktow, w ktorych interpolujemy (jesli podano liste)
    std::list<double> interpPoints;
    double outputXStart = 0.0;
    double outputXEnd = 0.0;
    double outputXStep = 1.0;
    if (strcmp(argv[aoffs], "-") == 0) {
        //Podano liste punktow
        aoffs++;
        while (argc > aoffs) {
            interpPoints.push_back(strtod(argv[aoffs++], NULL));
        }
        if (interpPoints.empty()) {
```

```

        usage(argv[0]);
        return 1;
    }
} else {
    //Podano początek i ewentualnie koniec oraz krok
    outputXStart = strtod(argv[aoffs++],NULL);
    outputXEnd = outputXStart;
    if (argc > aoffs) {
        outputXEnd = strtod(argv[aoffs++],NULL);
    }
    if (argc > aoffs) {
        outputXStep = strtod(argv[aoffs++],NULL);
    }
}
std::list<double> x;
std::list<double> y;
char line[LINE_LEN];
while (fgets(line,LINE_LEN,stdin)!=NULL) {
    double num1, num2;
    sscanf(line,"%lg %lg",&num1,&num2);
    x.push_back(num1);
    y.push_back(num2);
}
if (x.size() < minNumPoints) {
    fprintf(stderr,"At least %u points are required for selected"
        " interpolation algorithm.\n", minNumPoints);
    return 2;
}
double *xArr = new double[x.size()];
std::copy(x.begin(),x.end(),xArr);
double *yArr = new double[y.size()];
std::copy(y.begin(),y.end(),yArr);

gsl_interp_accel *acc = gsl_interp_accel_alloc ();
gsl_spline *spline = gsl_spline_alloc (interpType, x.size());

gsl_spline_init (spline, xArr, yArr, x.size());

if (interpPoints.empty()) {
    for (double point = outputXStart; point<=outputXEnd; point+=outputXStep) {
        double yi = gsl_spline_eval (spline, point, acc);
        printf ("%g %g\n", point, yi);
    }
} else {
    for (std::list<double>::iterator point = interpPoints.begin();
        point!=interpPoints.end(); point++) {
        double yi = gsl_spline_eval (spline, *point, acc);
        printf ("%g %g\n", *point, yi);
    }
}

gsl_spline_free (spline);
gsl_interp_accel_free (acc);

delete[] xArr;
delete[] yArr;

return 0;
}

```

Bibliografia

- [1] M.A. Bentley, S.M. Lenzi *Coulomb energy differences between high-spin states in isobaric multiplets*, Progress in Particle and Nuclear Physics, w druku (2007)
- [2] J. Dobaczewski, J. Dudek *Solution of the Skyrme-Hartree-Fock equations in the Cartesian deformed harmonic oscillator basis. (I) The method.*, Computer Physics Communications, 102 (1-3) 166-182 (1997)
- [3] J. Dobaczewski, J. Dudek *Time-odd components in the mean field of rotating superdeformed nuclei*, Physical Review C, 52 (4) 1827-1839 (1995)
- [4] J. Dobaczewski, J. Dudek, P. Olbratowski *HFODD (v2.08k): User's guide*, publikacja online: <http://arxiv.org/abs/nucl-th/0501008>, <http://www.fuw.edu.pl/~dobaczew/hfodd/hfodd.html> (2005)
- [5] J. Dobaczewski, P. Olbratowski *Solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogolyubov equations in the Cartesian deformed harmonic-oscillator basis. (IV) HFODD (v2.08i): a new version of the program*, Computer Physics Communications, 158 158-191 (2004)
- [6] B. Nerlo-Pomorska, K. Pomorski *Zarys teorii jądra atomowego*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1999
- [7] W.E. Ormand, B.A. Brown *Empirical isospin-nonconserving Hamiltonians for shell-model calculations*, Nuclear Physics A, 491 1-23 (1989)
- [8] S.M. Lenzi *Nuclear properties and underlying symmetries in deformed $f_{7/2}$ -shell nuclei*, Nuclear Physics A, 704 124c-133c (2002)
- [9] S.M. Lenzi, C.A. Ur, D.R. Napoli, M.A. Nagarajan, D. Bazzacco, D.M. Brink, M.A. Cardonna, G. de Angelis, M. de Poli, A. Gadea, D. Hojman, S. Lunardi, N.H. Medina, C. Rossi Alvarez *Band termination and second backbending in ^{50}Cr* , Physical Review C, 56 (3) 1313-1319 (1997)

- [10] F. Brandolini, J. Sanchez-Solano, S.M. Lenzi, N.H. Medina, A. Poves, C.A. Ur, D. Bazzacco, G. de Angelis, M. de Poli, E. Farnea, A. Gadea, D.R. Napoli, C. Rossi Alvarez *Bands and Coulomb effects in ^{50}Cr* , Physical Review C, 66 021302 (2002)
- [11] Praca zbiorowa (redakcja D. Rudolph, M. Hellström) *International Workshop PINGST 2000, selected topics on $N = Z$ nuclei*, S.M. Lenzi *et al.*, Isobaric analogue rotational bands in $T = 1$ $A = 50$ mirror nuclei, 240-245, Bloms, Lund 2000
- [12] D.M. Brink *Nuclear Forces*, Pergamon Press, Oxford 1965
- [13] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz *Mean-field and pairing properties of exotic nuclei: exploring the nuclear landscape*, Progress of Theoretical Physics Supplement, 146 70-83 (2002)
- [14] T.H.R. Skyrme *The effective nuclear potential*, Nuclear Physics, 9 615-634 (1959)
- [15] P. Hohenberg, W. Kohn *Inhomogeneous electron gas*, Physical Review B, 136 864-870 (1964)
- [16] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, R. Kirchner, W. Nazarewicz, J. Terasaki *Variation after particle-number projection for the HFB method with the Skyrme energy density functional*, publikacja online: <http://arxiv.org/abs/nucl-th/0610061>, <http://www.fuw.edu.pl/~dobaczew/vapnp23w/vapnp23w.html>
- [17] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer *New Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities*, Nuclear Physics A, 627 710-746 (1997)
- [18] P.-G. Reinhard, D.J. Dean, W. Nazarewicz, J. Dobaczewski, J.A. Maruhn, M.R. Strayer *Shape coexistence and the effective nucleon-nucleon interaction*, Physical Review C, 60 014316 (1999)
- [19] A. Bohr, B.R. Mottelson, D. Pines *Possible analogy between the excitation spectra of nuclei and those of the superconducting metallic state*, Physical Review, 110 936-938 (1958)
- [20] D. Tonev, P. Petkov A. Dewald, T. Klug, P. von Brentano, W. Andrejtscheff S.M. Lenzi, D.R. Napoli, N. Marginean, F. Brandolini, C.A. Ur, M. Axiotis, P.G. Bizzeti, A. Bizzeti-Sona *Transition rates and nuclear structure changes in mirror nuclei ^{47}Cr and ^{47}V* , Physical Review C, 65 034314 (2002)

- [21] P.E. Garrett, W.E. Ormand, D. Appelbe, R.W. Bauer, J.A. Becker, L.A. Bernstein, J.A. Cameron, M. Carpenter, R.V.F. Janssens, C.J. Lister, D. Seweryniak, E. Tavukcu, D.D. Warner *Observation of ^{46}Cr and testing the isobaric mass multiplet equation at high spin*, Physical Review Letters, 87 132502 (2001)
- [22] S. Hilaire, J.F. Berger, M. Girod, W. Satula, P. Schuck *Mass number dependence of nuclear pairing*, Physics Letters B, 531 61-66 (2002)
- [23] M. Kosmulski, W. Satula, H. Zduńczuk *W przygotowaniu*
- [24] Free Software Foundation, Inc. *GSL – GNU Scientific Library*, dokumentacja online: <http://www.gnu.org/software/gsl/>