

INSTYTUT FIZYKI JĄDROWEJ
im. Henryka Niewodniczańskiego
Polskiej Akademii Nauk
ul. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków
www.ifj.edu.pl/publ/hab
Kraków, październik 2013

**Symetrie kształtów jądra atomowego
i ich łamanie**

Katarzyna Mazurek

monografia

Wydano nakładem Instytutu Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego
Polskiej Akademii Nauk
Kraków 2013

Recenzent: prof. dr hab. Adam Maj (IFJ PAN)

ISBN 978-83-93542-20-7

Spis treści

Spis treści	3
Wstęp	5
1 Skrócony opis metody wyznaczania energii potencjalnej	11
1.1 Geometryczne aspekty parametryzacji kształtu	12
1.1.1 Definicja powierzchni jądra atomowego	12
1.1.2 Warunek zachowania objętości	15
1.1.3 Opis położenia środka masy	16
1.1.4 Momenty bezwładności	17
1.2 Metoda pola średniego użyta w tej pracy	18
1.2.1 Definicja potencjału zdeformowanego	18
1.2.2 Funkcja odległości danego punktu od powierzchni jądra	21
1.2.3 Diagonalizacja hamiltonianu jądra zdeformowanego	23
1.2.4 Definicja bazy oscylatora harmonicznego	23
1.2.5 Operacja odwrócenia czasu	27
1.2.6 Struktura hamiltonianu	29
1.2.7 Konstrukcja macierzy hamiltonianu	30
1.2.8 Metoda makroskopowo-mikroskopowa Strutinsky’iego	34
1.3 Struktura grupowa rozwiązań	38
1.4 Kolektywna rotacja jądrowa	40
1.4.1 Opis rotacji w przybliżeniu “kranking”	41
1.4.2 Transformacja Bogolyubova i uwzględnienie pairingu	43
2 Symetrie geometryczne a stabilność jąder atomowych	47
2.1 Efekty powłokowe a stabilność jąder	49
2.1.1 Niestabilność oktupolowa	50
2.1.2 Stabilność tetrahedralna	52
2.1.3 Stabilność oktahedralna	57
2.2 Analiza jakościowa gęstości poziomów nukleonowych w terminach symetrii	60
2.2.1 Symetria tetrahedralna i reprezentacje nieredukowalne	67
2.2.2 Symetria oktahedralna	69
2.3 Energie powłokowe i pairing a symetrie związane z deformacjami oktupolowymi	74
2.4 Wyspy stabilności jądrowej na płaszczyźnie (Z, N)	78
2.5 Przykłady zachowania pełnej energii jądra:	
Jądra superciężkie	83
2.6 Pasma rotacyjne a kształty egzotyczne	88

3 Łamanie symetrii ze wzrostem spinu: Przejścia kształtów Jacobi’ego	99
3.1 Termiczne fluktuacje kształtu jądra i GDR	101
3.2 Uwzględnienie i opis deformacji nieosiowych	107
3.3 Zastosowanie metody Termicznych Fluktuacji Kształtu	110
3.4 Gęstość energetycznych poziomów jądrowych	115
3.5 Anizotropia promieniowania GDR	118
3.6 Wibracje kwadrupolowe	120
4 Przejścia kształtów Poincaré’go	131
4.1 Deformacje nieosiowe wyższych rzędów	131
4.2 Energia kongruencji zależna od deformacji jądra	132
4.3 Ewolucja deformacji ze spinem jądra	137
4.4 Testy minimalizacji	140
4.5 Wibracje oktupolowe	148
4.6 Rozkład masy w jądrze oktupolowo zdeformowanym	156
4.7 Funkcja nasilenia GDR w jądrach oktupolowo zdeformowanych	158
4.8 Zakres masowy występowania przejścia Poincaré’go	161
Podsumowanie i perspektywy	163
Dodatki	167
A Czynniki geometryczne	167
A.1 Powierzchnia jądrowa: własności harmonik sferycznych	167
A.2 Symetrie geometryczne.	169
B Zasady całkowania Gaussa	170
C Bazy - definicje	174
C.1 Baza 'r' —> baza sferyczna	174
C.2 Przejście pomiędzy bazami 't' —> 'r'	175
D Symetrie przestrzenne	178
D.1 Odbicie w płaszczyźnie	178
D.2 Jednoczesna obecność symetrii \mathcal{R}_x i \mathcal{R}_y	181
E Symetrie członów kranking	183
Dodatki	186
Podziękowania	187
Literatura	189
Spis rysunków	204
Spis tablic	205

Wstęp

*L'âme aime la symétrie, mais
elle aime aussi les contrastes...*¹
Montesquieu

Jądra atomowe są wielonukleonowymi układami kwantowymi, przy czym oddziaływania między nukleonami mają charakter szczególnie złożony. Oddziaływania te są nie tylko niecentralne i nielokalne, co podkreśla charakter kwantowy tych systemów, ale ponadto zawierają składowe trójciałowe, jak na to wskazują coraz liczniejsze publikacje. W tej sytuacji możnaby powątpiewać w możliwość wprowadzania koncepcji klasycznych takich, jak powierzchnie jądrowe, czy też kształty jąder atomowych w obiektach, których opis niekwantowy nie miałby po prostu sensu.

A jednak dominujące oddziaływania jądrowe, tzw. silne, charakteryzują się dwiema cechami, które w istotny sposób odróżniają je od np. elektromagnetycznych czy grawitacyjnych; są krótkozasięgowe i mają charakter wysycający. Te dwie cechy powodują, że objętości jąder atomowych są z dobrym przybliżeniem równe sumom objętości nukleonów w nich zawartych. To zaś powoduje, że gęstość jądrowa zanika eksponencjalnie, przy oddalaniu się od centrum systemu. W tej sytuacji możemy wprowadzić fikcyjną powierzchnię, Σ , charakteryzującą taką gęstość jądrową:

$$\Sigma : \quad \rho(x, y, z) = \frac{1}{2}\rho_0,$$

gdzie dla uproszczenia ρ_0 oznacza gęstość centralną w jądrze i gdzie przyjęto umownie czynnik $\frac{1}{2}$ jako definicję położenia powierzchni. Ponieważ, jak się okazuje, oddziaływania jądrowe zanikają eksponencjalnie przy oddalaniu się od powierzchni jądrowej, narzuca to idee konstrukcji innych pomocniczych obiektów matematycznych: potencjałów pola średniego.

Koncepcja pola średniego jest jednym z najpotężniejszych narzędzi współczesnych teorii kwantowych w wielu dziedzinach fizyki takich jak: atomowej, molekularnej, fizyce fazy skondensowanej, jak i również w fizyce jądrowej. Nieco schematycznie, zakładając istnienie oddziaływań dwuciałowych między nukleonami, powiedzmy $\hat{v}(x_1, x_2)$, możemy zapisać Hamiltonian wielociałowego systemu jądrowego jako:

$$\hat{H} = \hat{T} + \frac{1}{2} \sum_{i=1, j \neq i}^N \hat{v}(x_i, x_j),$$

¹Dusza kocha symetrię, ale lubi też przeciwieństwa...

gdzie, w bardzo schematycznym przedstawieniu, x_i i x_j reprezentują zespoły operatorów charakteryzujących każdy nukleon z osobna, zaś \hat{T} jest energią kinetyczną. Gdyby znane były jednociłowe funkcje falowe nukleonów, $\psi_i(x)$, co na chwilę założymy, to wprowadzić będzie można pojęcie oddziaływania uśrednionego po $(N - 1)$ cząstkach działających na ' N '-tą cząstkę jako:

$$\hat{V}(x) = \mathcal{N} \sum_i \int \psi_i^*(x) \hat{v}(x, x_i) \psi_i(x) dV_x,$$

gdzie \mathcal{N} jest czynnikiem normalizującym, zaś dV_x symbolem charakteryzującym nieco abstrakcyjny w tym kontekście element całkowania.

Otrzymany w ten sposób nowy operator zależy od współrzędnych i innych charakterystyk ale tylko jednego nukleonu, a ponieważ został policzony poprzez uśrednianie, jest on interpretowany jako potencjał średniego pola jądrowego. Zastosowanie tego schematu przy uwzględnieniu niezbędnych szczegółów dotyczących zarówno formy oddziaływania, jak i poprawnego stosowania metod mechaniki kwantowej, prowadzi do teorii pola średniego w jej realizacji samozgodnej, znanej jako podejście Hartree-Fock'a.

Alternatywne podejście tzw. fenomenologiczne lub niesamozgodne, jest znane w literaturze od dawna jako szczególnie dobrze zaadaptowane do opisu zjawisk jądrowych i porównania przewidywań z danymi eksperymentalnymi. W takim podejściu zamiast konstruowania potencjału $\hat{V}(x)$ z oddziaływań między-nukleonowych, postuluje się postać odpowiadającą studni potencjału z pewną liczbą parametrów, które dopasowane są do doświadczenia. W tej monografii użyty będzie tzw. Uniwersalny Potencjał typu Woods-Saxona wprowadzony do literatury dawno temu w ramach współpracy Strasbourg-Warszawa i następnie testowany w dziesiątkach publikacji. W tym podejściu powierzchnia jądrowa staje się punktem centralnym konstrukcji. Ponieważ uzyskanie fizycznych kształtów jąder atomowych jest jednym z celów podejścia, dowolną powierzchnię jądrową przedstawia się najpierw przy pomocy rozwinięcia w bazie harmonik sferycznych

$$\Sigma_{\{\alpha\}} : \quad R(\vartheta, \varphi) = R_0 c(\alpha) \left[1 + \sum_{\lambda} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) \right],$$

a następnie konstruuje potencjał centralny w formie uogólnionej wersji Woods-Saxona. Zamiast używania potencjału sferycznego postaci

$$V_{WS}(r; V_0, r_0, a_0) \equiv \frac{V_0}{1 + \exp[-(r - R_0)/a_0]},$$

gdzie w wykładniku mamy odległość $(r - R_0)$ położenia nukleonu od powierzchni sfery o promieniu $R_0 = r_0 A^{1/3}$, użyta będzie wersja tzw. zdeformowana, w której

$$V_{WS}^{def.}(\vec{r}; V_0, r_0, a_0) = \frac{V_0}{1 + \exp[-dist_{\Sigma}(\vec{r})/a_0]},$$

gdzie funkcja $dist_{\Sigma}(\vec{r})$ oznacza konstruowaną numerycznie odległość punktu położenia nukleonu od powierzchni jądrowej Σ . W analogiczny sposób będzie konstruowany potencjał oddziaływania spin-orbita a wszelkie szczegóły konstrukcji będą przedstawione nieco później w tej monografii.

Niesłychanie praktyczna i ważna cecha tej konstrukcji charakteryzuje się tym, że jeśli utworzymy powierzchnię niezmienniczą ze względu na zestaw transformacji symetrii pewnej

grupy punktowej, powiedzmy $G = \{\hat{g}_k\}$, to również Hamiltonian pola średniego typu Woodsa-Saxona

$$\hat{H}_{WS} = \hat{t} + V_{WS}^{def.} + V_{WS;s-o}^{def.}$$

będzie niezmienniczy ze względu na wszystkie elementy tej grupy

$$\hat{g}_j \hat{H}_{WS} \hat{g}_j^{-1} = \hat{H}_{WS}, \quad \forall j.$$

To zaś oznacza, że konstrukcje powierzchni modelujących bryły o zadanej symetrii, przekładają się wprost na symetrie Hamiltonianu, który będzie generować np. degeneracje poziomów właściwe dla danej grupy symetrii. Zatem własności spektroskopowe związane z symetrami powierzchni jądrowych, dzięki takiemu podejściu, pozwalają się modelować w sposób najbardziej naturalny.

Uzyskujemy w ten sposób połączenie dwóch najpotężniejszych narzędzi współczesnych teorii systemów wielociałowych: teorii jądrowego pola średniego oraz teorii grup wraz z jej rozszerzeniem do zastosowań teorii reprezentacji grup (w tym kontekście punktowych grup symetrii jąder atomowych).

Symetrie geometryczne mogą być rozumiane jako wszystkie możliwe symetrie brył o danym kształcie takie jak odbicie w jakiejś płaszczyźnie czy też obrót o 180° , 90° , $45^\circ \dots$ wokół ustalonej osi. Kształt jądra może zachowywać pewne symetrie, jak to jest dla jąder osiowo symetrycznych, gdzie zachowana jest symetria obrotowa względem pewnej wybranej osi, albo je łamać – np. poprzez kształty trójosiowe.

Z deformacją jądra wiąże się energia deformacji, która będzie nazywana energią całkowitą albo kolektywną energią potencjalną. Minimalizowanie takiej energii w wielowymiarowych przestrzeniach współczynników deformacji pozwala na znalezienie deformacji jądra w stanie podstawowym (minimum globalne) albo w stanach wzbudzonych (minima lokalne). Preferowane są kształty o najniższej energii, tak więc analiza powierzchni energii potencjalnej (*potential energy surface* PES) daje odpowiedź na pytanie, jakie deformacje są optymalne dla danego jądra. Do liczenia energii potencjalnej zastosowano tutaj metodę makroskopowo-mikroskopową, a w części opisującej gorące jądra szybko rotujące ograniczono się tylko do modelu makroskopowego Lublin-Strasbourg Drop (LSD). Warunek energetycznego minimum w przypadku jąder rotujących, pozwolił na obserwację zmian kształtów jąder wraz ze wzrostem spinu, co w języku symetrii można zinterpretować jako złamanie i odzyskanie symetrii osiowej w przypadku przejścia Jacobi’ego albo złamanie symetrii odbiciowej przy przejściu Poincaré’go.

Rozwój technik obliczeniowych umożliwił kompleksowe badania kształtów jąder atomowych oraz ich wpływ na wiele wielkości obserwowalnych. W większości prac teoretycznych ograniczono się tylko do uwzględniania wydłużenia jądra, opisu parametru szyjki czy też asymetrii fragmentów rozszczepienia.

Istnienie symetrii geometrycznych bardzo bogatych, w terminach elementów symetrii np. symetrii tetrahedralnej (48 elementów symetrii) lub oktaedralnej (98 elementów symetrii), czasami zwanych symetrami wyższego rzędu, w fizyce jądrowej zostało przewidziane w obliczeniach relatywistycznej teorii średniego pola z uniwersalnym potencjałem jednocząstkowym Woodsa-Saxona i potwierdzone przez obliczenia z użyciem metody Skyrme-Hartree-Fock-Bogolyubov np.: [Dob00, Dud06, Jen10]. Symetrie wyższych rzędów to szczególne przypadki symetrii grup punktowych. Te symetrie prowadzą do poczwórnych degeneracji poziomów jednocząstkowych w jądrach zdeformowanych podczas gdy wszystkie

inne symetrie (za wyjątkiem symetrii sferycznej) pozwalają tylko na podwójne degeneracje Kramersa.

Rozwój ośrodków badawczych, sposobów detekcji cząstek i kwantów γ pozwala na coraz to ciekawsze badania egzotycznych konfiguracji jądrowych. Potrzebne do tego są jednak przewidywania teoretyczne co do możliwości istnienia długożyciowych, w skali jądrowej, stanów kwantowych, które umożliwiłyby wyciągnięcie informacji o masach, energiach przejścia, czasach życia a nawet jądrowych momentach multipolowych.

Jednym z celów tej monografii jest systematyczne przebadanie własności jądrowych z punktu widzenia podatności na powstawanie minimów energii odpowiadających w szczególności symetriom egzotycznym, takim jak tetrahedralna czy oktaedralna – ale także wielu innym, wliczając w to ‘klasyczną’ konkurencję pomiędzy minimami energetycznymi jądra w kształcie wydłużonej lub spłaszczonej elipsoidy (prolate vs. oblate), czy też minima z symetrią nieosiową np. trójosiową.

Jedne z pierwszych przewidywań teoretycznych dotyczących symetrii tetrahedralnych sięgają pracy [LiD94] i obliczeń fenomenologicznych pola średniego, a grupa japońska zastosowała do obliczeń metodę Hartree-Focka [Tak98]. Następnie próbowano znaleźć przykłady istnienia tych symetrii w całym układzie okresowym [Dud02], szczególnie w jądrach atomowych pierwiastków takich jak cyrkon, iter i ferm. Problem symetrii tetrahedralnej w jądrach ciężkich był badany także w [Che08]. Możliwości istnienia deformacji tetrahedralnej w stanie podstawowym w rejonie jąder cyrkonu jest prezentowany w [Sch04], a wnioski potwierdzono poprzez badania przy pomocy metody współrzędnej generującej (Generated Coordinate Method - GCM) w szczególności ze współzawodnictwem z osiowymi deformacjami oktopolowymi [Zbe09]. Współzawodnictwo kształtów egzotycznych w trzech podwójnie magicznych jądrach: ^{80}Zr , ^{96}Zr i bardzo egzotycznym ^{110}Zr badano też w [VII]. W artykule [Ska91] przedstawiono obliczenia parametru deformacji α_{32} i energii deformacyjnej w obszarze Hg-Pb. Pokazano tam także rutiany (czyli poziomy energii jednocząstkowych jądra rotującego) dla $N=112$. W innym artykule [Ska92] dyskutowano symetrie grup punktowych włączając harmoniki sferyczne nieosiowe: $Y_{30}, Y_{31}, Y_{32}, Y_{33}$ do obliczeń wykonanych metodą makroskopowo-mikroskopową z energią makroskopową Yukawa+exponential i potencjałem Woods-Saxona. Autorzy oszacowali energie wibracyjne i współczynniki sztywności, co pozwoliło na stwierdzenie, że zaobserwowano podatność na oscylacje oktopolowe w minimum superzdeformowanym w regionie jąder Hg-Pb, a inne typy oscylacji nie są energetycznie faworyzowane.

Z punktu widzenia matematycznego, problem egzotycznych symetrii był badany w szczególności w artykule [Goz03]. Wykonując obliczenia w przestrzeni deformacji może się tak zdarzyć, że kilka zestawów deformacji może dawać identyczny kształt [Goz04], co należy uwzględnić przy obliczeniach wielowymiarowych robionych na szeroką skalę. Otrzymanie hamiltonianu pola średniego z *a priori* zdefiniowaną symetrią jest kolejnym problemem, którego rozwiązanie zostało podane w [Dud07]. Opis rotora kwantowego z symetriami innymi niż trójosiowa elipsoidalna, wymaga specyficznych matematycznych rozwiązań a pomysł na hamiltonian rotacji kolektywnej tzw. ‘rotor uogólniony’ został wprowadzony w artykule [Goz04]. Pierwsze trójwymiarowe obliczenia krążenia zostały przedstawione w pracach [Sch05, Sch06], podczas gdy porównanie z danymi doświadczalnymi dla stanów rotacyjnych w formie zależności spinu w funkcji częstości dla hipotetycznych pasm tetrahedralnych dla ^{154}Gd można znaleźć w [Dud06a] a dalsze własności rotacyjne tetrahedralnego rotora kwantowego były dyskutowane w [Dud07].

Struktura obecnej monografii została skonstruowana w sposób następujący:

Rozdział 1 przedstawia metodę wyznaczania energii całkowitej jąder atomowych zarówno nierotujących jak i rotujących z uwzględnieniem zachowania i łamania symetrii hamiltonianu pola średniego.

Rozdział 2 ilustruje działanie symetrii punktowych, ich zachowanie i łamanie a także wpływ na poziomy jednocząstkowe oraz mapy energii całkowitych i mikroskopowych, co prowadzi do otrzymania nowych liczb magicznych: tetrahedralnych i oktahedralnych. Oprócz złamania symetrii wyższych rzędów można obserwować inne ciekawe efekty, takie jak współistnienie kształtów prolate-oblate czy też wibracji kwadrupolowych.

Rozdziały 3 i 4 opisują przejścia kształtów Jacobi'ego i Poincaré'go w jądrach rotujących i gorących, co znakomicie pokazuje złamanie symetrii osiowej lub/i odbiciowej wywołane przez rotację. Sukcesy Metody Termicznych Fluktuacji Kształtu w odtwarzaniu i interpretacji eksperymentalnych widm funkcji nasilenia Gigantycznego Rezonansu Dipolowego (GDR) pozwalają na wiarygodne oszacowanie zakresów spinów, gdzie zmiany kształtów będą następować, co jest kluczowe przy projektowaniu nowych eksperymentów. Szczególnie ważna jest dyskusja wpływu wibracji zerowych na wielkość parametrów deformacji kwadrupolowych i oktopolowych, przy analizowaniu przejścia Poincaré'go, które nie było badane doświadczalnie.

W Podsumowaniu przedstawiono pokrótce główne osiągnięcia zilustrowane w monografii a także perspektywy rozwoju badań symetrii geometrycznych w jądrach atomowych. Dodatki natomiast zawierają wyprowadzenia części wzorów użytych w pracy, definicje funkcji bazowych, przykłady wykorzystania symetrii hamiltonianu pola średniego, a także zestawy map energii w obszarach masowych, gdzie badano występowanie nowych liczb magicznych.

Wszystkie rysunki są przygotowane na potrzeby tej monografii przez autora, chyba, że jest zaznaczone wprost, że są skopiowane z prac opublikowanych przez autora lub pochodzą z prac innych autorów.

Monografia ta opiera się na pracach własnych, częściowo opublikowanych (artykuły oznaczone w Literaturze cyframi rzymskimi [I]-[XIX]).

Rozdział 1

Skrócony opis metody wyznaczenia energii potencjalnej

Metoda wyznaczenia jądrowej energii potencjalnej, użyta w tej pracy, zawiera kilka elementów, które zostaną pokrótce omówione. Na energię potencjalną ma wpływ kształt jądra a zatem istotny jest wybór parametryzacji deformacji powierzchni jądrowej, metody liczenia energii całkowitej dla danej deformacji oraz optymalizacja wyboru zestawu parametrów deformacji, czułych na efekty, które są badane. Optymalna parametryzacja deformacji jądra powinna umożliwiać otrzymanie jak największej różnorodności kształtów ale powinna być wystarczająco przewidywalna by w trakcie obliczeń nie powstały kształty niefizyczne. W literaturze, w zależności od studiowanej tematyki, używana jest parametryzacja Tretalanga-Koonina [Tre80] - pozwalająca na badanie binarnego lub potrójnego rozszczepienia, pięciowymiarowa parametryzacja użyta [Ran11] do badania rozszczepienia izotopów rtęci, a zakładająca oddzielny opis poszczególnych fragmentów i szyjki co przypomina parametryzację 'hantli' (*dumbbell*) dyskutowaną przez R.W. Hasse [Has71] czy też parametryzacja "kształtów optymalnych" (*optimal shape parametrization*) [Iva09]. Przy dyskusji dynamiki rozszczepienia jądra wzbudzonego, testowana była także parametryzacja "Funny Hills" [Sch02, Maz11a], wprowadzona w artykule przeglądowym [Bra72], zawierająca trzy parametry związane z wydłużeniem jądra, jego asymetrią masową i rozmiarem szyjki czyli przewężenia. Jest jeszcze wiele innych metod określania kształtu jądrowego ale przy dyskusji symetrii geometrycznych i efektów z nimi związanych jedyną parametryzacją pozwalającą na testowanie wiarygodności przewidywań teoretycznych, jest rozwinięcie powierzchni jądrowej na funkcje pewnej bazy np.: na funkcje kuliste.

Kolejnym elementem metody jest wyznaczenie energii potencjalnej jądra posiadającego dany kształt. Mikroskopowe podejście do liczenia energii całkowitej jądra można otrzymać stosując metody samozgodne takie jak: Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) [Dob00]; do tej pory stosowana głównie przy użyciu parametryzacji oddziaływań w postaci Skyrme'a.

Metoda mikroskopowo-makroskopowa pozwala na łatwą kontrolę deformacji oraz badanie symetrii grup punktowych w fizyce jądrowej. W skład tej metody wchodzi fenomenologiczna część makroskopowa, gdzie użyty może być model kroplowy, zakładający że powierzchnia jądra jest dobrze określona, czy też 'Folded-Yukawa' albo 'Finite Range Liquid Drop Model', które uwzględniają rozmycie powierzchni jądrowej w przestrzeni. Część mikroskopowa używana w tej monografii, jest zdefiniowana tak jak w [Bol72], gdzie energia powłokowa Strutinskiego i energia pairing są rozdzielone na części gładkie i dyskretne, co pozwoliło na odtworzenie eksperymentalnych mas i wysokości barier na rozszczepienie.

Powierzchnie energii całkowitej pokazane w tej pracy zostały uzyskane na dwa sposoby:

albo poprzez liczenie energii w każdym punkcie wielowymiarowej przestrzeni parametrów deformacji – tzw. obliczenia na siatce – a następnie minimalizację i rzutowanie na płaszczyzny dwuwymiarowe, albo poprzez bezpośrednią minimalizację w tej wielowymiarowej przestrzeni, używając metody minimalizacji Levenberg-Marquardt, przy zastosowaniu wielokrotnego losowania parametrów początkowych minimalizowanych.

1.1 Geometryczne aspekty parametryzacji kształtu

W tym podrozdziale omówione zostaną aspekty matematyczne związane z jądrowymi własnościami geometrycznymi, poczynając od definicji samej powierzchni jądrowej, poprzez techniki związane z zachowaniem objętości, z ‘unieruchomieniem’ środka masy i kilku zbliżonych zagadnień.

1.1.1 Definicja powierzchni jądra atomowego

Powierzchnię jądra zdeformowanego, Σ , zdefiniujemy za [Boh75], rozwijając w szereg funkcji kulistych, $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$, [Ray77] jako:

$$\mathcal{R}_{\Sigma}(\theta, \phi) = \mathcal{R}_0 c(\alpha_{\lambda\mu}) \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right], \quad (1.1)$$

gdzie $\alpha_{\lambda\mu}$ są w ogólności zespolonymi współczynnikami rozwinięcia, które będą odgrywały rolę współrzędnych uogólnionych w opisie ruchów kolektywnych (nieco mniej poprawnie nazywanych, zwłaszcza w starszych publikacjach, ‘parametrami’ deformacji). Funkcja $\mathcal{R}_{\Sigma}(\theta, \phi)$ to odległość punktu na powierzchni jądra od początku układu współrzędnych, kąty (θ, ϕ) definiują nachylenie promienia wodzącego tego punktu względem osi układu współrzędnych a czynnik $c(\alpha_{\lambda\mu})$ pozwala na zachowanie objętości. Harmoniki sferyczne, są zdefiniowane jako:

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = (-1)^{\mu} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi} \cdot \frac{(\lambda-\mu)!}{(\lambda+\mu)!}} P_{\lambda}^{\mu}(\theta) e^{i\mu\phi}, \quad (1.2)$$

gdzie $P_{\lambda}^{\mu}(\theta)$ są stowarzyszonymi funkcjami Legendre’a. Rekurencyjna metoda szybkiego wyznaczania harmonik sferycznych przy pomocy funkcji Legendra jest przedstawiona w Dodatku A.1.

Warunek, żeby równanie powierzchni jądra było przedstawione zawsze w postaci funkcji rzeczywistych daje: $\mathcal{R}_{\Sigma}^* = \mathcal{R}_{\Sigma}$, co prowadzi do równania:

$$\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi). \quad (1.3)$$

Konwencja faz Condon-Shortley pozwala zapisać

$$Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi) = (-1)^{\mu} Y_{\lambda, -\mu}(\theta, \phi), \quad (1.4)$$

co po podstawieniu do wzoru 1.3 daje:

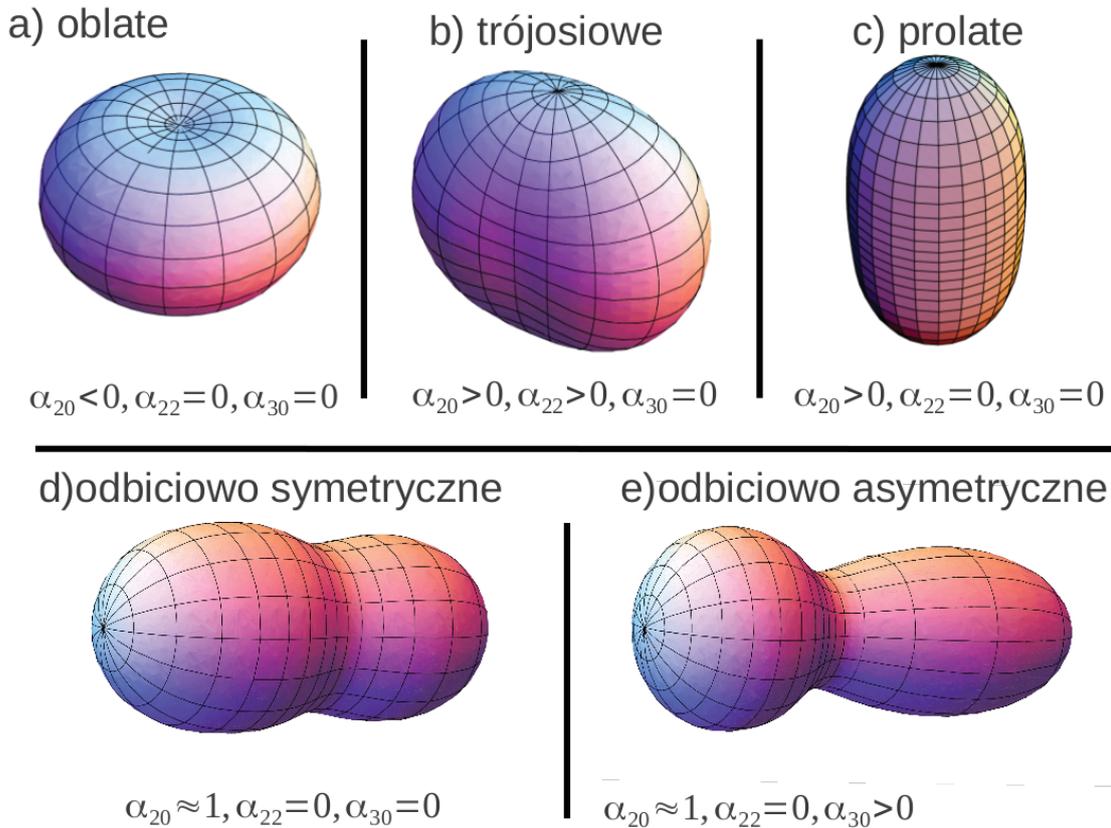
$$\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi) = \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} (-1)^{\mu} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda, -\mu}(\theta, \phi) = \sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} (-1)^{-\mu'} \alpha_{\lambda, -\mu'} Y_{\lambda\mu'}(\theta, \phi). \quad (1.5)$$

Po przekształceniach otrzymana zostaje zależność:

$$\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) [\alpha_{\lambda\mu}^* - (-1)^\mu \alpha_{\lambda, -\mu}] = 0, \quad (1.6)$$

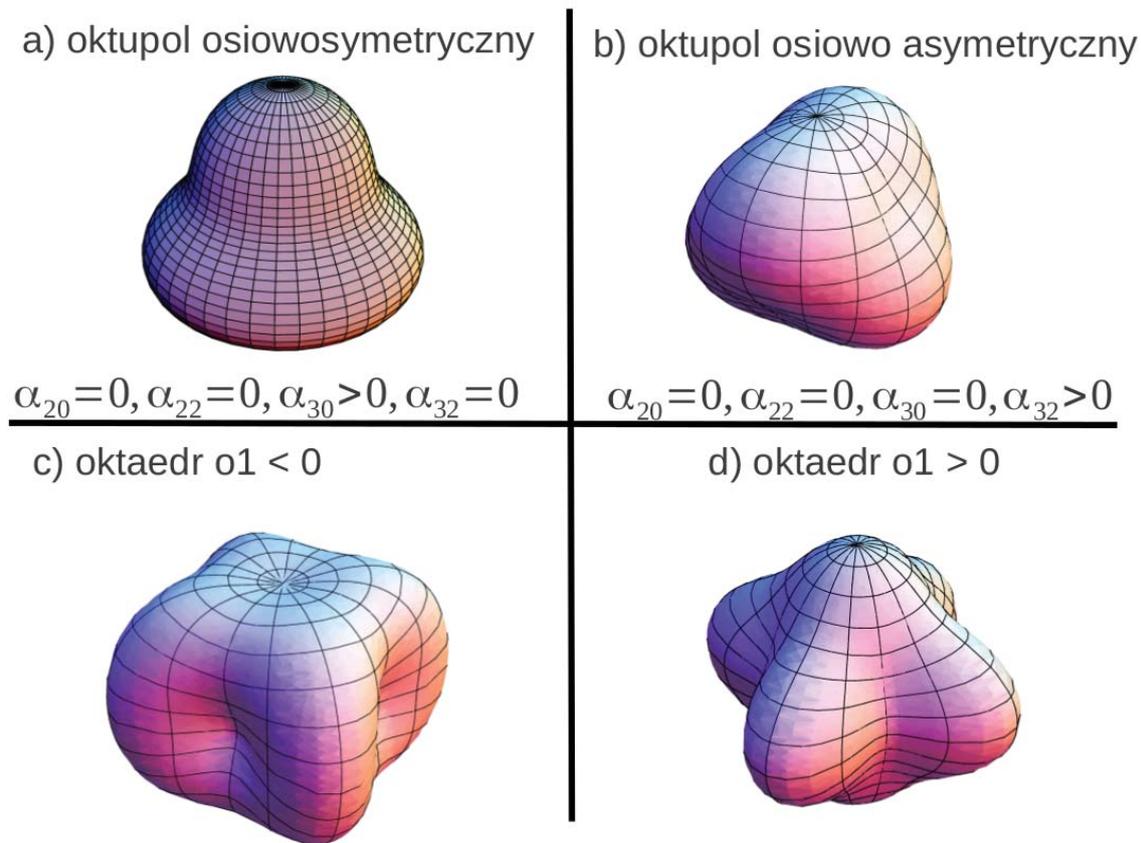
z której wynika, że:

$$\alpha_{\lambda\mu}^* = (-1)^\mu \alpha_{\lambda, -\mu}. \quad (1.7)$$



Rysunek 1.1: Przykładowe kształty jąder generowane za pomocą funkcji kulistych dla deformacji kwadrupolowych: (a) (kształt spłaszczony) oblate, (b) kształty trójosiowe, (c) (kształt wydłużony) prolate, (d) kształt wydłużony z szyjką i (e) – deformacja oktupolowa.

Na rysunku 1.1 przedstawione są przykładowe kształty jądra otrzymane przy pomocy wzoru 1.1. Pokazane są tylko kształty odpowiadające kombinacjom trzech pierwszych współczynników deformacji $\alpha_{20}, \alpha_{22}, \alpha_{30}$, ale do generacji tych kształtów, a szczególnie deformacji z przewężeniem, potrzebne są parametry deformacji wyższych rzędów. Rysunki (a-d) pokazują kształty kwadrupolowe a dla porównania, na rysunku (e) został pokazany kształt, dla którego niezerowa deformacja oktupolowa spowodowała asymetrię odbiciową. Natomiast Rys. 1.2 zawiera dwa kształty oktupolowe: osiowo symetryczny (a) i asymetryczny (b), różniące się głównie niezerową wartością współczynnika deformacji α_{32} , co może być ilustracją symetrii tetrahedralnej (będziemy używać też oznaczenia t_1),



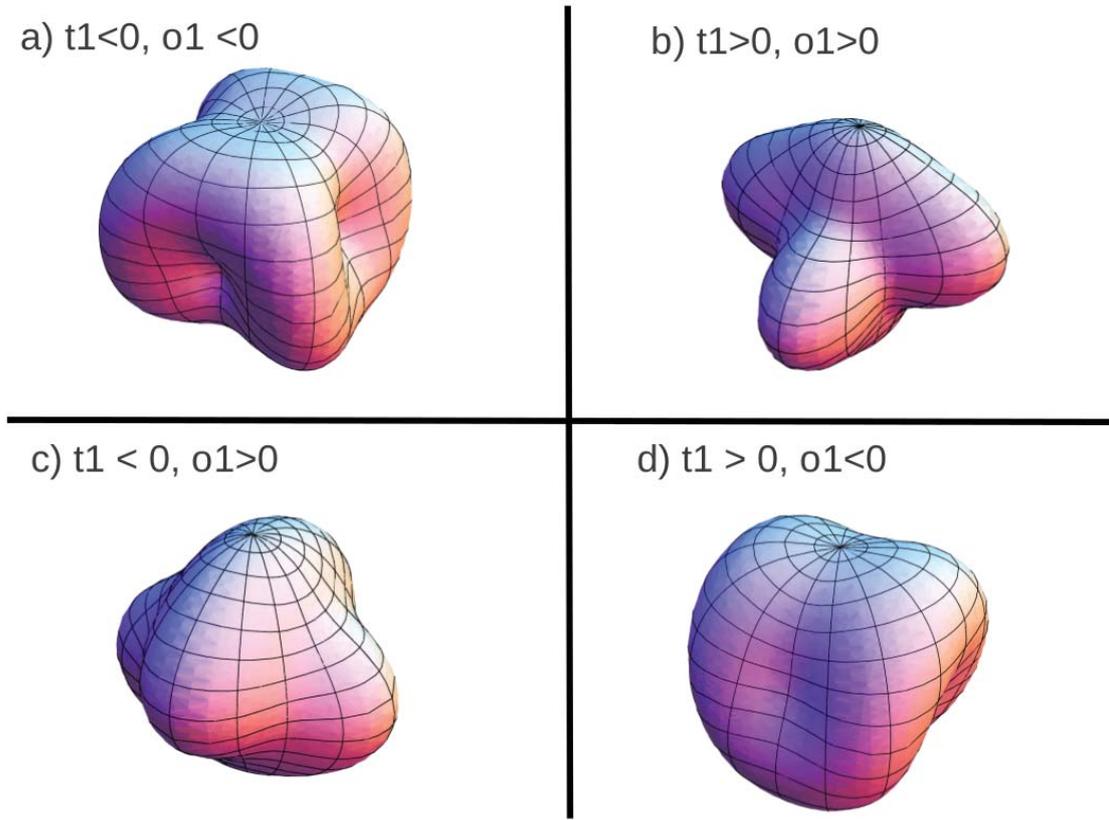
Rysunek 1.2: Przykładowe kształty oktupolowe jąder, generowane za pomocą funkcji kulistych osiowosymetryczne – (a) i osiowo asymetryczne (tetrahedralne) – (b). Deformacja oktahedralna została przedstawiona na rysunkach (c) dla $o_1 < 0$ i (d) dla $o_1 > 0$.

omawianej w dalszej części pracy. Kształty (c) i (d) Rys. 1.2 to ilustracja deformacji oktahedralnej (o_1), której pierwszy rząd składa się z parametrów heksadekapolowych według wzoru:

$$o_1 \in (\alpha_{40}, \alpha_{44} = \sqrt{\frac{14}{5}}\alpha_{40}). \quad (1.8)$$

Złożenie dwóch symetrii: tetrahedralnej i oktahedralnej, może pozwolić na otrzymanie kształtów jeszcze bardziej egzotycznych, jak to jest pokazane na Rys. 1.3, przy czym znak parametrów deformacji gra decydującą rolę, głównie ze względu na asymetryczność deformacji oktahedralnej.

Według metody pola średniego jądra posiadające ten sam kształt będą miały identyczną energię a jedynie ich orientacja w przestrzeni może być różna. To powoduje, że wykonując obliczenia w wielowymiarowej przestrzeni parametrów deformacji $\alpha_{\lambda\mu}$, można wielokrotnie otrzymać ten sam kształt. Znając zasady symetryzacji przestrzeni wielowymiarowej, można policzyć energie dla kształtów w niewielkiej podprzestrzeni a następnie powielić wyniki by otrzymać wiele powierzchni energii równoważnych dla całej przestrzeni parametrów deformacji. W Dodatku A.2 przedstawiony jest wpływ kilku symetrii geometrycznych na wymiar przestrzeni, którą należy skonstruować do liczenia energii potencjalnej.



Rysunek 1.3: Przykładowe kształty jąder, generowane za pomocą funkcji kulistych dla złożenia deformacji tetrahedralnych t_1 i oktahedralnych o_1 , posiadających znaki ujemne i dodatnie.

1.1.2 Warunek zachowania objętości

Opisując jądro atomowe musimy uwzględnić fakt, że zgodnie z wynikami wielu doświadczeń, objętość jądra powinna być zachowana i niezależna od aktualnego kształtu. Warunek zachowania objętości wymaga, żeby:

$$\frac{4\pi}{3}\mathcal{R}_0^3 = \int \int \int_V dx dy dz = I_{vol}, \quad (1.9)$$

gdzie całkujemy po objętości jądra zdeformowanego V . We współrzędnych sferycznych możemy zapisać:

$$I_{vol} = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi)} r^2 dr = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{3} \mathcal{R}_\Sigma^3(\theta, \phi). \quad (1.10)$$

Możemy zdefiniować:

$$F(\theta, \phi) = 1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \quad (1.11)$$

i podstawiając $F(\theta, \phi)$ do wzoru (1.10) dostajemy:

$$\frac{4\pi}{3}\mathcal{R}_0^3 = \mathcal{R}_0^3 \frac{1}{3} c^3(\alpha) \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi F^3(\theta, \phi) \quad (1.12)$$

Dla przypadku symetrycznego względem płaszczyzny YOZ mamy:

$$c(\alpha) = \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\pi d\phi F^3(\theta, \phi) \right]^{-1/3}; \quad (1.13)$$

tak obliczone wyrażenie na $c(\alpha)$ zapewnia zachowanie objętości jądra, niezależnie od jego kształtu.

1.1.3 Opis położenia środka masy

Kolejnym aspektem jest określenie środka masy jądra, gdyż o ile przy parametrach deformacji z multipolowością parzystą (λ -parzyste), środek układu współrzędnych pokrywa się ze środkiem masy (zakładamy że $\alpha_{1\mu} = 0$), to przy uwzględnianiu parametrów oktapolowych i innych o λ -nieparzystym - to stwierdzenie jest błędne.

Zdefiniujmy więc pomocniczą gęstość materii jądrowej jako:

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \rho_0 & \text{wewnątrz jądra} \\ 0 & \text{na zewnątrz.} \end{cases} \quad (1.14)$$

Przypomnijmy transformację współrzędnych kartezjańskich do współrzędnych sferycznych:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi, \\ y &= r \sin \theta \sin \phi, \\ z &= r \cos \theta, \end{aligned} \quad (1.15)$$

z Jakobianem: $|J| = r^2 \sin \theta$. Współrzędną 'z' środka masy możemy obliczyć jako:

$$z_{cm} = \int \int \int z \rho(\vec{r}) d^3 \vec{r}, \quad (1.16)$$

czyli

$$\begin{aligned} z_{cm} &= \rho_0 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi)} r \cos \theta r^2 dr \\ &= -\rho_0 \int_1^{-1} d(\cos \theta) \cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{4} \mathcal{R}_\Sigma^4(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{4} \rho_0 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 \mathcal{R}_\Sigma^4(\cos \theta, \phi) \cos \theta d(\cos \theta). \end{aligned} \quad (1.17)$$

W kierunku osi \mathcal{O}_y mamy podobnie:

$$y_{cm} = \int \int \int y \rho(\vec{r}) d^3 \vec{r}, \quad (1.18)$$

czyli

$$\begin{aligned} y_{cm} &= \rho_0 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi)} r \sin \theta \sin \phi r^2 dr \\ &= -\rho_0 \int_1^{-1} d(\cos \theta) \sin \theta \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi \frac{1}{4} \mathcal{R}_\Sigma^4(\cos \theta, \phi) \\ &= \rho_0 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \sqrt{1 - \cos^2 \theta} \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi \frac{1}{4} \mathcal{R}_\Sigma^4(\cos \theta, \phi) \\ &= \frac{1}{4} \rho_0 \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \sqrt{1 - \cos^2 \theta} \mathcal{R}_\Sigma^4(\cos \theta, \phi). \end{aligned} \quad (1.19)$$

W kierunku \mathcal{O}_x współrzędna środka masy to:

$$x_{cm} = \int \int \int x \rho(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \frac{1}{4} \rho_0 \int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \sqrt{1 - \cos^2 \theta} \mathcal{R}_{\Sigma}^4(\cos \theta, \phi). \quad (1.20)$$

Znajomość położenia środka masy jest ważna w zastosowaniach teorii pola średniego, ponieważ należy uwzględnić, zgodnie z doświadczeniem, że położenie środka masy układu odosobnionego pozostaje w spoczynku. W praktyce, w stosowanych tu technikach dokonywać będziemy przesunięcia układu odniesienia w taki sposób, że jego początek pokrywać się będzie z położeniem środka masy.

1.1.4 Momenty bezwładności

Momenty bezwładności charakteryzują reakcję jądra (bezwładność) w przypadku np. zewnętrznego wymuszania obrotu względem danej osi. Moment bezwładności w stosunku do takiej osi, jest definiowany jako

$$\mathcal{I} = \int dist_{\perp \Sigma}^2(x, y, z) \rho(x, y, z) dV, \quad (1.21)$$

gdzie funkcja $dist_{\Sigma}$ oznacza odległość danego punktu (tzn. wyznaczoną w kierunku prostopadłym) do osi obrotu.

Wiemy, że momenty bezwładności opisujące bryłę sztywną są dobrym przybliżeniem ($\pm 3\%$) jądra rotującego, którego wysoki spin lub/i temperatura powodują, że korelacje pairing mogą być zaniedbane.

Wielkości, o których mowa są wyznaczane w programach zgodnie z następującym przykładem. Niech ρ_0 oznacza rozkład masy jest jednorodny z gęstością:

$$\rho_0 = \frac{m_0}{V_0} = \frac{Zm_p c^2 + Nm_n c^2}{(4/3)\pi r_0^3 A}. \quad (1.22)$$

Wyznamy odległości danego punktu od poszczególnych osi układu współrzędnych:

$$\begin{aligned} dist_{axis=0z}^2 &= x^2 + y^2 = r^2 \sin^2 \theta \\ dist_{axis=0y}^2 &= x^2 + z^2 = r^2 \{\sin^2 \theta \cos^2 \phi + \cos^2 \theta\} \\ dist_{axis=0x}^2 &= y^2 + z^2 = r^2 \{\sin^2 \theta \sin^2 \phi + \cos^2 \theta\}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Zatem momenty bezwładności liczone względem poszczególnych osi wynoszą:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_z &= \rho_0 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{\mathcal{R}_{\Sigma}(\theta, \phi)} r^2 \sin \theta \sin^2 \phi r^2 dr \\ &= \frac{1}{5} \rho_0 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \mathcal{R}^5 \sin^3 \theta d\theta. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Jeśli przyjmiemy, że jądro jest symetryczne względem płaszczyzny X0Z to mamy:

$$\mathcal{I}_z = \frac{2}{5} \rho_0 \int_0^{\pi} d\phi \int_0^{\pi} \mathcal{R}^5 \sin^3 \theta d\theta. \quad (1.25)$$

Dla pozostałych składowych możemy obliczyć, że:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_y &= \rho_0 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{\mathcal{R}_{\Sigma(\theta,\phi)}} r^2 dr r^2 \{\sin^2 \theta \cos^2 \phi + \cos^2 \theta\} \\ &= \frac{2}{5} \rho_0 \int_0^\pi d\phi \int_0^\pi \mathcal{R}^5 \{\sin^2 \theta \cos^2 \phi + \cos^2 \theta\} \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (1.26)$$

oraz

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_x &= \rho_0 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{\mathcal{R}_{\Sigma(\theta,\phi)}} r^2 dr r^2 \{\sin^2 \theta \sin^2 \phi + \cos^2 \theta\} \\ &= \frac{2}{5} \rho_0 \int_0^\pi d\phi \int_0^\pi \mathcal{R}^5 \{\sin^2 \theta \sin^2 \phi + \cos^2 \theta\} \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Geometryczne własności powierzchni jądra, przedyskutowane w tym rozdziale posłużą w dalszej części do właściwego zdefiniowania hamiltonianu opisującego pole średnie działające w jądrze, a także zostaną wykorzystane przy dyskusji problemu zachowania czy łamania symetrii geometrycznych.

1.2 Metoda pola średniego użyta w tej pracy

Ten podrozdział poświęcony jest krótkiemu omówieniu potencjału zdeformowanego, używanego do obliczeń przedstawionych w tej pracy, a także kilku technicznych aspektów związanych z zachowaniem bądź łamaniem symetrii hamiltonianu pola średniego, wyboru odpowiedniej bazy i rozmiarów macierzy hamiltonianu, którą należy zdiagonalizować w celu uzyskania energii jednocząstkowych, służących do liczenia energii mikroskopowej jądra zdeformowanego.

1.2.1 Definicja potencjału zdeformowanego

Oddziaływania jądrowe są odpychające lub przyciągające, w zależności od stanu kwantowego jak i od energii oddziaływania. Wiemy, że oddziaływanie przyciągające dominuje, ponieważ wiąże nukleony w jądra mimo odpychania kulombowskiego a oddziaływanie odpychające na małych odległościach powoduje, że nie obserwujemy zapadania się jąder i mają one skończone rozmiary. Oddziaływania jądrowe są krótkozasięgowe (rzędu 10^{-15} m) i silne, ponieważ stała sprzężenia oddziaływania N-N jest o rzędy wielkości większa niż wszystkich innych znanych oddziaływań. Poza tym w pierwszym rzędzie są to oddziaływania niezależne ładunkowo, ponieważ siły działające między protonami i neutronami są podobne oraz zdolne do wysycania w materii jądrowej.

Ze względu na obecność protonów w jądrze, w modelu pola średniego uwzględniony jest potencjał kulombowski, który jest mniejszy niż pozostałe oddziaływania jądrowe i który, dla oszacowania rzędów wielkości w przypadku symetrii sferycznej, można przybliżyć przez potencjał elektrostatyczny naładowanej kuli:

$$V_{coul} = \begin{cases} \frac{Ze^2}{r} & \text{dla } r > R_0, \\ \frac{Ze^2}{2R_0} [3 - (\frac{r}{R_0})^2] & \text{dla } r < R_0. \end{cases} \quad (1.28)$$

W terminach teorii pola średniego, jądrowe systemy wielociałowe są dzisiaj opisywane przy użyciu Hamiltonianów wielociałowych np. w przybliżeniach Hartree-Fock'a (HF),

Hartree-Focka-Bogolyubova (HFB), HF+BCS i innych. Jednakże bardzo często okazuje się niesłychanie użyteczne zastosowanie potencjałów fenomenologicznych.

Jednym z historycznie pierwszych jest potencjał Woodsa-Saxona [Woo54], który w przypadku sferycznej symetrii przyjmuje postać:

$$V_{WS} = \frac{V_0}{1 + \exp(\frac{r-R}{a})}, \quad (1.29)$$

gdzie $r - R$ to odległość między powierzchnią jądra a danym punktem $P(x, y, z)$. V_0 jest w pierwszym przybliżeniu praktycznie stałą wartością dla wszystkich jąder ale może też być uzależniona od izospinu zredukowanego np.: $V_0 = (51 + 33 \frac{N-Z}{A})$ ([Dub05a]) MeV dla jąder zdeformowanych.

Wartość takiego potencjału zależy od odległości od środka jądra. W tym potencjale traktujemy cząstki stacjonarnie, a ich ruch będzie uzupełniony przez potencjał spin-orbita V_{so} [Gop55]. Dla symetrii sferycznej, potencjał spin-orbita V_{so} jest postaci:

$$V_{so} = \lambda \frac{1}{r} \frac{d\rho}{dr} (\hat{r} \times \hat{p}) \cdot \hat{s} = \lambda \frac{1}{r} \frac{d\rho}{dr} \hat{l} \cdot \hat{s}, \quad (1.30)$$

gdzie \hat{s} to operator spinu cząstki poruszającej się w jądrze, a ρ to gęstość materii jądrowej. Jakościowo możemy przedstawić zachowanie takiego potencjału, biorąc pod uwagę, że dla $r \rightarrow \infty$ mamy $\frac{d\rho}{dr} = 0$, $V_{so} = 0$; przy powierzchni mamy $\frac{d\rho}{dr} \leq 0$, $r \rightarrow R_0$ więc $V_{so} \neq 0$ w zależności jaki znak ma stała λ ; w środku jądra $r \rightarrow 0$, $\frac{d\rho}{dr} = 0$, $V_{so} = 0$. Z tych rozważań widać, że potencjał spin-orbita działa głównie w okolicy powierzchni jądra, chociaż wkład fluktuacji gęstości w części centralnej jądra, nie jest całkowicie zaniedbywalny.

Cząstka poruszająca się może być opisana przez operatory położenia \hat{r} i pędu \hat{p} . Dla jądra wyróżniony jest kierunek spadku gęstości materii jądrowej – co odpowiada gradientowi gęstości. Przypomnijmy, że gradient funkcji lub pola skalarnego jest wektorem, którego zwrot wskazuje kierunek, w którym dana wielkość opisująca pole skalarne rośnie najszybciej.

Rozważmy przypadek sferyczny. Teraz operatory $\hat{l} = \hat{r} \times \hat{p}$, $\hat{s} = 1/2\hat{\sigma}\hbar$ i $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ komutują ze sobą nawzajem i komutują z hamiltonianem:

$$[\hat{H}, \hat{l}] = 0; \quad [\hat{H}, \hat{s}] = 0; \quad [\hat{H}, \hat{j}] = 0 \quad (1.31)$$

a zatem z potencjałem

$$[\hat{V}(\hat{r}), \hat{l}] = 0; \quad [\hat{V}(\hat{r}), \hat{s}] = 0; \quad [\hat{V}(\hat{r}), \hat{j}] = 0, \quad (1.32)$$

więc w przypadku sferycznym dobrymi liczbami kwantowymi są $\{l, l_z; s, s_z; j, j_z\}$. Ponieważ powyższe operatory komutują też ze sobą to ich kwadraty też będą komutowały z hamiltonianem. Oznacza to, że:

$$\hat{l}^2 \Psi = l(l+1) \Psi \quad ; \quad \hat{s}^2 \Psi = s(s+1) \Psi \quad ; \quad \hat{j}^2 \Psi = j(j+1) \Psi \quad (1.33)$$

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s} \quad ; \quad \hat{j}^2 = \hat{l}^2 + \hat{s}^2 + 2(\hat{l} \cdot \hat{s}), \quad (1.34)$$

a iloczyn skalarny $\hat{l} \cdot \hat{s}$ możemy zapisać jako:

$$\hat{l} \cdot \hat{s} = \frac{1}{2}(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2). \quad (1.35)$$

Wartości własne takiego iloczynu operatorów to:

$$\vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2}(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)). \quad (1.36)$$

Możliwe są zatem dwie kombinacje:

- spin równoległy do krętu ($\vec{l} \uparrow \uparrow \vec{s}$)

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad \vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2}[(l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2}) - l(l+1) - \frac{1}{2}(1 + \frac{1}{2})] = \frac{1}{2}l; \quad (1.37)$$

- spin antyrównoległy do krętu ($\vec{l} \uparrow \downarrow \vec{s}$)

$$j = l - \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad \vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2}[(l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}) - l(l+1) - \frac{1}{2}(1 + \frac{1}{2})] = -\frac{1}{2}(l+1) \quad (1.38)$$

Ponieważ, zgodnie z doświadczeniem, równoległe ustawienie momentu orbitalnego i spinu daje stany o niższych energiach, ustalamy, że $\lambda > 0$. Wtedy, biorąc pod uwagę, że $\frac{d\rho}{dr} < 0$, stany z ($\vec{l} \uparrow \downarrow \vec{s}$) – układ antyrównoległy – posiadają wyższe energie, niż stany o układzie równoległym.

W przypadku jąder zdeformowanych hamiltonian całkowity jądra statycznego przyjmie postać:

$$\hat{H}_{WS} = \hat{t} + \hat{V}_c(\hat{r}) + \hat{V}_{so}(\hat{r}, \hat{p}, \hat{s}) + \frac{1}{2}(1 + \tau_z)\hat{V}_{coul}(\hat{r}), \quad (1.39)$$

gdzie \hat{t} to operator energii kinetycznej, τ_z to trzecia składowa izospinu, a potencjał centralny to:

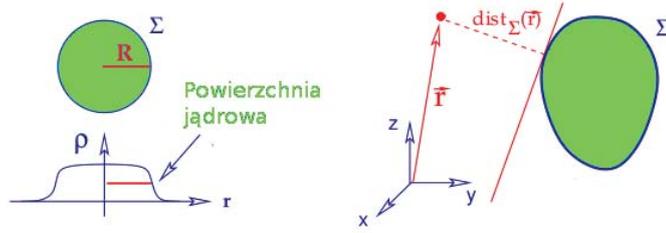
$$\hat{V}_c(\vec{r}) = V_{WS} = \frac{V_0[1 \pm \kappa \frac{N-Z}{N+Z}]}{1 + \exp(\frac{dist_{\Sigma}(\vec{r})}{a})}. \quad (1.40)$$

Ogólnie rzecz biorąc potencjał spin-orbita zależy od gęstości materii $\hat{V}_{so} \sim (\vec{\nabla}\rho \times \vec{p}) \cdot \vec{s}$ ale żeby otrzymać gęstość:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{N,Z} \Psi_{n_x n_y n_z}^*(\vec{r}) \Psi_{n_x n_y n_z}(\vec{r}), \quad (1.41)$$

musimy znać funkcje falowe jednocząstkowe $\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z)$. Ponieważ siły jądrowe są krótkiego zasięgu więc możemy powiedzieć, że w przybliżeniu $\rho(x, y, z) \sim \lambda \hat{V}_c$, a $n_x n_y n_z$ są stanami oscylatora harmonicznego przy drganiach wzdłuż poszczególnych osi układu współrzędnych. Tak więc dla jądra zdeformowanego potencjał spin orbita zależy od potencjału centralnego i funkcji odległości danego punktu przestrzeni od powierzchni jądra, która będzie przedstawiona w kolejnym podrozdziale (1.2.2).

$$\begin{aligned} \hat{V}_{so}(\vec{r}, \vec{p}, s) &= \lambda V_0 [1 \pm \kappa \frac{N-Z}{N+Z}] [\vec{\nabla}[\hat{V}_c(\vec{r}) \times \vec{p}] \cdot \vec{s}] \\ &= \lambda_F V_0 [1 \pm \kappa \frac{N-Z}{N+Z}] [\vec{\nabla} \frac{1}{1 + \exp(\frac{dist_{\Sigma}(\vec{r})}{a_{so}})} \times \vec{p}] \cdot \vec{s}. \end{aligned} \quad (1.42)$$



Rysunek 1.4: Lewa strona ilustruje rozkład gęstości materii w jądrze a prawa strona pokazuje, jak zdefiniowana jest funkcja odległości danego punktu od powierzchni jądrowej.

1.2.2 Funkcja odległości danego punktu od powierzchni jądra

W celu zdefiniowania potencjału zgodnie z wzorami 1.33 - 1.35 niezbędna będzie znajomość odległości między dowolnym punktem w przestrzeni, $P(x, y, z)$, a powierzchnią jądra (prawa strona Rys. 1.4). Będziemy używać notacji wektorowej: $\vec{R} = \mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi)\vec{n}$, gdzie \vec{n} to wektor kierunkowy czyli normalna do powierzchni, którą można sparametryzować jako:

$$\vec{n} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta). \quad (1.43)$$

Wprowadzimy również funkcję:

$$\vec{f}(\theta, \phi) = (\vec{r} - \vec{R}) = (\vec{r} - \mathcal{R}(\theta, \phi)\vec{n}). \quad (1.44)$$

Szukana odległość dana jest przez

$$\text{dist}_\Sigma(\vec{r}, \beta) = \sqrt{(\vec{r} - \vec{R})^2} \quad (1.45)$$

pod warunkiem, że znaleziono kąty $\{\theta, \phi\}$, dla których wektor $\vec{r} - \vec{R}$ jest normalny do powierzchni.

W celu wyznaczenia funkcji odległości musimy zminimalizować powyższe wyrażenie dla każdego ustalonego \vec{r} . Będziemy w tym celu używać funkcji:

$$\vec{f}^2(\theta, \phi) = (\vec{r} - \mathcal{R}(\theta, \phi)\vec{n})^2 = \vec{r}^2 + \mathcal{R}^2(\theta, \phi) - 2\mathcal{R}(\theta, \phi)[\vec{r} \cdot \vec{n}]_{\theta, \phi}, \quad (1.46)$$

która zależy teraz tylko od kątów (θ, ϕ) . Występujący powyżej iloczyn skalarny oznaczymy jako:

$$[\vec{r} \cdot \vec{n}]_{\theta, \phi} \equiv N(\theta, \phi) = x \cos \phi \sin \theta + y \sin \phi \sin \theta + z \cos \theta. \quad (1.47)$$

Obliczymy teraz pochodne cząstkowe tego iloczynu skalarnego:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} N(\theta, \phi) \equiv N_\theta = x \cos \theta \cos \phi + y \cos \theta \sin \phi - z \sin \theta; \quad (1.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} N(\theta, \phi) = N_\phi = -x \sin \theta \sin \phi + y \sin \theta \cos \phi; \quad (1.49)$$

drugie pochodne są dane przez:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} N_\theta(\theta, \phi) \equiv N_{\theta\theta} = -x \sin \theta \cos \phi - y \sin \theta \sin \phi - z \cos \theta; \quad (1.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} N_\phi(\theta, \phi) \equiv N_{\theta\phi} = -x \cos \theta \sin \phi + y \cos \theta \cos \phi; \quad (1.51)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} N_\phi(\theta, \phi) \equiv N_{\phi\phi} = -x \sin \theta \cos \phi - y \sin \theta \sin \phi. \quad (1.52)$$

Aby policzyć pochodne funkcji odległości $f^2(\theta, \phi)$ używamy przekształconego wyrażenia 1.46:

$$f^2(\theta, \phi) = r^2 + \mathcal{R}(\theta, \phi)[\mathcal{R}(\theta, \phi) - 2N(\theta, \phi)] \quad (1.53)$$

a więc:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} f^2(\theta, \phi) &\equiv f_\theta = \mathcal{R}_\theta[\mathcal{R} - 2N] + \mathcal{R}[\mathcal{R}_\theta - 2N_\theta] = 2\mathcal{R}_\theta\mathcal{R} - 2\mathcal{R}_\theta N - 2\mathcal{R}N_\theta = \\ &2[\mathcal{R}_\theta(\mathcal{R} - N) - \mathcal{R}N_\theta] \equiv F(\theta, \phi); \end{aligned} \quad (1.54)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} f^2(\theta, \phi) &\equiv f_\phi = \mathcal{R}_\phi[\mathcal{R} - 2N] + \mathcal{R}[\mathcal{R}_\phi - 2N_\phi] = 2\mathcal{R}_\phi\mathcal{R} - 2\mathcal{R}_\phi N - 2\mathcal{R}N_\phi = \\ &2[\mathcal{R}_\phi(\mathcal{R} - N) - \mathcal{R}N_\phi] \equiv G(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (1.55)$$

Pochodne drugiego rzędu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} f_\theta &\equiv f_{\theta\theta} = \mathcal{R}_{\theta\theta}[\mathcal{R} - 2N] + 2\mathcal{R}_\theta[\mathcal{R}_\theta - 2N_\theta] + \mathcal{R}[\mathcal{R}_{\theta\theta} - 2N_{\theta\theta}] \\ &= \mathcal{R}_{\theta\theta}[\mathcal{R} - 2N + \mathcal{R}] - 2N_{\theta\theta}\mathcal{R} + 2\mathcal{R}_\theta[\mathcal{R}_\theta - 2N_\theta] \\ &= 2(\mathcal{R}_{\theta\theta}[\mathcal{R} - N] - \mathcal{R}N_{\theta\theta} + \mathcal{R}_\theta[\mathcal{R}_\theta - 2N_\theta]); \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} f_\phi &\equiv f_{\theta\phi} = \mathcal{R}_{\theta\phi}[\mathcal{R} - 2N] + \mathcal{R}_\theta[\mathcal{R}_\phi - 2N_\phi] + \mathcal{R}_\phi[\mathcal{R}_\theta - 2N_\theta] + \mathcal{R}[\mathcal{R}_{\phi\theta} - 2N_{\phi\theta}] \\ &= \mathcal{R}_{\theta\phi}[\mathcal{R} - 2N + \mathcal{R}] - 2N_{\phi\theta}\mathcal{R} + \mathcal{R}_\theta[\mathcal{R}_\phi - 2N_\phi + \mathcal{R}_\phi] - 2\mathcal{R}_\phi N_\theta \\ &= 2(\mathcal{R}_{\theta\phi}[\mathcal{R} - N] - N_{\phi\theta}\mathcal{R} + \mathcal{R}_\theta[\mathcal{R}_\phi - N_\phi] - \mathcal{R}_\phi N_\theta); \end{aligned} \quad (1.57)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} f_\phi &\equiv f_{\phi\phi} = \mathcal{R}_{\phi\phi}[\mathcal{R} - 2N] + 2\mathcal{R}_\phi[\mathcal{R}_\phi - 2N_\phi] + \mathcal{R}[\mathcal{R}_{\phi\phi} - 2N_{\phi\phi}] \\ &= 2(\mathcal{R}_{\phi\phi}[\mathcal{R} - N] - N_{\phi\phi}\mathcal{R} + \mathcal{R}_\phi[\mathcal{R}_\phi - 2N_\phi]). \end{aligned} \quad (1.58)$$

Jeśli obliczymy pochodne równania powierzchni (1.1), to otrzymamy tylko pochodne harmonik sferycznych, ponieważ pozostałe człony nie zależą od zmiennych kątowych. Pierwsze pochodne:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \mathcal{R}(\theta, \phi) \equiv \mathcal{R}_\theta = \mathcal{R}_0 c(\alpha) \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* \frac{\partial}{\partial \theta} (Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) \right]; \quad (1.59)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \mathcal{R}(\theta, \phi) \equiv \mathcal{R}_\phi = \mathcal{R}_0 c(\alpha) \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* \frac{\partial}{\partial \phi} (Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) \right], \quad (1.60)$$

a drugie pochodne:

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mathcal{R}(\theta, \phi) \equiv \mathcal{R}_{\theta\theta} = \mathcal{R}_0 c(\alpha) \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} (Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) \right]; \quad (1.61)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \mathcal{R}(\theta, \phi) \equiv \mathcal{R}_{\phi\phi} = \mathcal{R}_0 c(\alpha) \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} (Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) \right]; \quad (1.62)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \mathcal{R}(\theta, \phi) \equiv \mathcal{R}_{\theta\phi} = \mathcal{R}_0 c(\alpha) \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} (Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) \right]. \quad (1.63)$$

Używana jest tutaj metoda Newtona rozwiązywania układu dwóch równań nieliniowych. Najprostsze zastosowanie metody Newtona jest to iteracyjne wyznaczanie przybliżonej

wartości pierwiastka, ale może ona służyć do szukania najmniejszej odległości danego punktu w przestrzeni od powierzchni jądra poprzez znajdowanie zer pochodnych cząstkowych ($f_\theta = 0, f_\phi = 0$) podczas, gdy drugie pochodne ($f_{\theta\theta}, f_{\theta\phi}, f_{\phi\phi}$) muszą tworzyć wyznacznik, który będzie dodatni.

Kryterium warunków zakończenia procedury będą małe różnice pomiędzy poszczególnymi iteracjami albo kryterium popełnianego błędu względnego. Obliczenie funkcji odległości dowolnego punktu w przestrzeni od powierzchni jądra kończy proces definiowania potencjału Woods-Saxona.

W następnej części rozdziału pokazanych zostanie kilka szczegółów dotyczących diagonalizacji hamiltonianu pola średniego.

1.2.3 Diagonalizacja hamiltonianu jądra zdeformowanego

W celu rozwiązania równania Schrödingera

$$\hat{H}\Psi_n = E\Psi_n \quad (1.64)$$

gdzie \hat{H} to hamiltonian średniego pola zdefiniowanego wzorem (1.39) i znalezienia energii własnych, potrzebujemy bazy liniowo niezależnych wektorów, w której znajdziemy jego funkcje własne. Szukane funkcje własne zawsze można rozwinąć w pewnej przestrzeni funkcji bazowych, które są dobrze znane, np.: funkcji własnych oscylatora harmonicznego. Wtedy

$$\Psi_n = \sum_{\nu} c_{n\nu}\phi_{\nu} \quad \rightarrow \quad \sum_{\nu} c_{n\nu}\hat{H}\phi_{\nu} = E_n \sum_{\nu} c_{n\nu}\phi_{\nu}. \quad (1.65)$$

Jeśli teraz pomnożymy powyższe równanie przez ϕ_{μ}^* i przekałujemy po wszystkich zmiennych, to otrzymamy:

$$\sum_{\nu} c_{n\nu}\langle\phi_{\mu}|\hat{H}|\phi_{\nu}\rangle = E_n \sum_{\nu} \delta_{\mu\nu}c_{\nu} \quad (1.66)$$

$$\sum_{\nu} (H_{\mu\nu} - \delta_{\mu\nu}E_n)c_{n\nu} = 0, \quad (1.67)$$

gdzie oznaczamy: $H_{\mu\nu} = \langle\phi_{\mu}|\hat{H}|\phi_{\nu}\rangle$. Mamy układ równań liniowych jednorodnych na niewiadome $c_{n\nu}$, dla $n = 1, 2, \dots, N$ oraz $\nu = 1, 2, \dots, N$, który mieć będzie rozwiązania tylko dla pewnych dyskretnych wartości $E = E_n$. Wiadomo, że taki układ ma nietrywialne rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy $\det(A) = 0$ a więc

$$\det(H - \mathbb{I}E) = 0. \quad (1.68)$$

Można skorzystać z rozwinięcia Laplace'a, żeby otrzymać wielomian $P_N(E)$, N -tego rzędu i jego miejsca zerowe. Miejsca zerowe będą dokładnie odpowiadać N dyskretnym energiom czyli wartościom własnym hamiltonianu. Odpowiada to diagonalizacji hamiltonianu $H_{\mu\nu}$ metodami standartowymi.

1.2.4 Definicja bazy oscylatora harmonicznego

W mechanice kwantowej obliczenia wykonujemy w przestrzeni Hilberta, którą może być rzeczywista lub zespolona przestrzeń liniowa z iloczynem skalarnym, zupełna, unormowana

w sensie tego iloczynu skalarnego. W tej przestrzeni jako bazę traktujemy liniowo niezależny zbiór wektorów, o tej własności, że każdy wektor jest sumą nieskończonego ciągu innych wektorów bazowych. Tak więc, w ogólności wszystkie bazy są równoważne.

W naszym przypadku bazę otrzymujemy przy pomocy hamiltonianu pomocniczego $\hat{h} = \hat{t} + V_{baza}$ czyli energia kinetyczna i potencjał pomocniczy. Zazwyczaj hamiltonian pomocniczy dobiera się tak, żeby jego potencjał był bliski potencjałowi badanemu. Jeżeli potencjał pomocniczy V_{bazy} i badany są zbliżone, to jest szansa, że szukane funkcje falowe hamiltonianu, dadzą się przedstawić w postaci kombinacji liniowej stosunkowo niewielkiej liczby stanów bazowych.

Bazę dobieramy tak, żeby potencjał pomocniczy pokrywał się z potencjałem badanym w okolicy poziomu Fermiego $\hat{V}(\vec{r}) = \lambda_F$ (Rys. 1.5, c). Jeśli potencjałem pomocniczym będzie potencjał oscylatora harmonicznego (Rys. 1.5, a) i zakładając że jądro jest sferą to:

$$V_{ho}(x, y, z) = \frac{1}{2}m^2\omega^2(x^2 + y^2 + z^2), \quad (1.69)$$

gdzie poziom Fermiego oraz objętość jądra a także promień jądra sferycznego, można wyliczyć z warunku:

$$x^2 + y^2 + z^2 = \frac{2\lambda_F}{m^2\omega^2} = R_0^2. \quad (1.70)$$

To równanie opisuje kształt sferyczny, który może przyjmować jądro a promień tej sfery będzie używany w dalszych dyskusjach.

Hamiltonian anizotropowego oscylatora harmonicznego jest postaci [Nil55]:

$$\hat{H}_{ho} = \hat{t} + V_{ho}(x, y, z) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m^2\omega_x^2 x^2\right) \rightarrow \hat{H}_{ho}^x \quad (1.71)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}m^2\omega_y^2 y^2\right) \rightarrow \hat{H}_{ho}^y \quad (1.72)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m^2\omega_z^2 z^2\right) \rightarrow \hat{H}_{ho}^z, \quad (1.73)$$

a parametrami dopasowania są częstości oscylatora w odpowiednich kierunkach: $\omega_x^2, \omega_y^2, \omega_z^2$.

Tak otrzymana baza generuje znane funkcje falowe (patrz niżej) i mamy:

$$\hat{H}_{ho} \Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = E_{n_x n_y n_z} \Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z); \quad (1.74)$$

$$\Phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z, \chi_{s_z}) = \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) \chi_{s_z}(\vec{s}); \quad (1.75)$$

$$\{n_x n_y n_z\} = n; \quad (1.76)$$

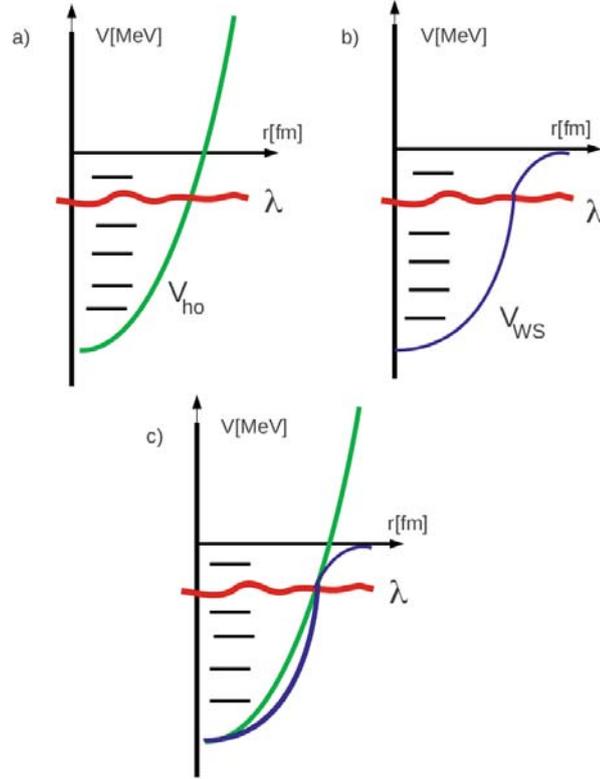
$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right). \quad (1.77)$$

Funkcje $\phi_{n_x}(x)$, $\phi_{n_y}(y)$, $\phi_{n_z}(z)$ są wielomianami Hermite'a pomnożonymi przez odpowiedni współczynnik gaussowski: $\exp(-\frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2))$. Oczywiście dla fermionowych funkcji własnych $\Phi(\vec{r}, \vec{s})$, należy wprowadzić zależność od spinu cząstki \vec{s} :

$$\Phi(\vec{r}, \vec{s}) = \phi_n(\vec{r}) \chi_{s_z}(\vec{s}). \quad (1.78)$$

Hamiltonian (Równ. 1.39) i funkcje falowe są zdefiniowane, więc można wykonać obliczenie macierzy hamiltonianu

$$\langle n' | \hat{H}_{WS} | n \rangle = H_{n'n} = \int \int \int \Psi_{n'}^*(\vec{r}) \hat{H}_{WS} \Psi_n(\vec{r}) d^3r \quad (1.79)$$



Rysunek 1.5: Potencjały w jądrze: a) potencjał oscylatora harmonicznego V_{ho} , b) potencjał Woods-Saxona V_{WS} ; c) dopasowanie potencjału pomocniczego do potencjału Woods-Saxona.

i jego diagonalizację. W rzeczywistości fizycznej pracujemy z bazami skończonymi, a ograniczeniem bazy jest sprawa doboru fenomenologicznego, np.: dobór maksymalnej liczby powłok oscylatora harmonicznego, N_{max} . W powyższej procedurze używamy bazy oscylatora harmonicznego z potencjałem zdefiniowanym przez:

$$V_{bazy} = V_{ho}(x, y, z) = \frac{1}{2}m^2\omega_x^2x^2 + \frac{1}{2}m^2\omega_y^2y^2 + \frac{1}{2}m^2\omega_z^2z^2, \quad (1.80)$$

a warunek zachowania objętości dla bazy elipsoidalnej to:

$$\frac{4\pi}{3}\omega_x\omega_y\omega_z = \frac{4\pi}{3}\omega_0^3 \quad (1.81)$$

z zadaną częstością $\hbar\omega_0 = \frac{41}{A^{1/3}}$ MeV. Czynniki 41 dobrany jest w ten sposób by wartość oczekiwana promienia jądra liczonego funkcjami oscylatora harmonicznego była równa $r_0A^{1/3}$. Znormalizowane funkcje własne w jednym wymiarze mają postać:

$$|n_x\rangle = \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad (1.82)$$

zaś końcowe funkcje bazowe są wyrażone przez:

$$\Psi_{ho} = |\vec{n}, s_z\rangle = |n_x\rangle|n_y\rangle|n_z\rangle|s_z\rangle \quad (1.83)$$

a funkcje falowe hamiltonianu Woodsa-Saxona dla stanu ν przyjmują postać rozwinięcia:

$$\Psi_{WS}^\nu = \sum_{\vec{n}, s_z} c_{n_x n_y n_z s_z}^\nu |n_x n_y n_z s_z\rangle. \quad (1.84)$$

Jak wskazano wyżej, zażądamy, aby potencjał pomocniczy czyli potencjał oscylatora harmonicznego i potencjał badany czyli potencjał Woodsa-Saxona maksymalnie się przekrywały (Rys. 1.5). Ten warunek pozwala na skonstruowanie elipsoidy o równaniu ogólnym:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (1.85)$$

z realizacją w naszym przypadku

$$\frac{\lambda_F}{2m} = \omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2. \quad (1.86)$$

Taka elipsoida powinna odtwarzać ‘na średnio’ kształt jądra a jej półosie elipsoidy dane są przez

$$a = \frac{1}{\omega_x}; \quad b = \frac{1}{\omega_y}; \quad c = \frac{1}{\omega_z}. \quad (1.87)$$

Wprowadzimy na tym etapie, jako wielkości pomocnicze, średnie długości kwadratowe jako:

$$\langle x^2 \rangle = \sum_{n=1}^N \int \phi_n^* x^2 \phi_n dx, \quad (1.88)$$

gdzie $\sum_{n=1}^N \phi_n^* \phi_n$ zastąpimy dla uproszczenia gęstością jednorodną ρ_0 ,

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \rho_0 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi)} \sin^2 \theta \cos^2 \phi r^4 dr \\ &= \rho_0 \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi \int_0^{\mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi)} r^4 dr \\ &= \rho_0 \frac{1}{5} \int_{-1}^1 (1 - \cos^2 \theta) d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \mathcal{R}_\Sigma^5(\theta, \phi) d\phi. \end{aligned} \quad (1.89)$$

Podobnie dla pozostałych kierunków:

$$\langle y^2 \rangle = \rho_0 \frac{1}{5} \int_{-1}^1 (1 - \cos^2 \theta) d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \mathcal{R}_\Sigma^5(\theta, \phi) d\phi; \quad (1.90)$$

$$\langle z^2 \rangle = \rho_0 \frac{1}{5} \int_{-1}^1 \cos^2 \theta d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} \mathcal{R}_\Sigma^5(\theta, \phi) d\phi. \quad (1.91)$$

Zazwyczaj przyjmuje się, że:

$$\omega_i^2 \sim 1/\langle x_i^2 \rangle. \quad (1.92)$$

Możemy więc skonstruować wielkości względne:

$$\frac{\omega_x^2}{\omega_y^2} = \frac{\langle x^2 \rangle}{\langle y^2 \rangle}; \quad \frac{\omega_y^2}{\omega_z^2} = \frac{\langle y^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}; \quad \frac{\omega_z^2}{\omega_x^2} = \frac{\langle z^2 \rangle}{\langle x^2 \rangle} \quad (1.93)$$

i w konsekwencji mamy:

$$\omega_x = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle y^2 \rangle}} \omega_y \quad ; \quad \omega_0^3 = \omega_x \omega_y \omega_z = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle y^2 \rangle}} \omega_y^2 \omega_z; \quad (1.94)$$

$$\omega_y = \sqrt{\frac{\langle y^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}} \omega_z \quad ; \quad \omega_0^3 = \omega_z^3 \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle y^2 \rangle} \frac{\langle y^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}}, \quad (1.95)$$

a stąd

$$\omega_z^3 = \omega_0^3 \langle z^2 \rangle \frac{1}{\sqrt{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle}}. \quad (1.96)$$

Możemy zdefiniować nowe zmienne:

$$\mathcal{R}_{xz} = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}} \quad ; \quad \mathcal{R}_{xy} = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle y^2 \rangle}} \quad ; \quad \mathcal{R}_{zx} = \mathcal{R}_{xz}^{-1} \quad ; \quad \mathcal{R}_{yx} = \mathcal{R}_{xy}^{-1}, \quad (1.97)$$

więc

$$\omega_z^3 = \omega_0^3 \mathcal{R}_{zx} \mathcal{R}_{zy}; \quad (1.98)$$

gdzie

$$\omega_0^3 = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle y^2 \rangle}} \omega_y^3 \sqrt{\frac{\langle z^2 \rangle}{\langle y^2 \rangle}} = \omega_y^3 \mathcal{R}_{xy} \mathcal{R}_{zy}. \quad (1.99)$$

Stąd otrzymujemy:

$$\omega_y^3 = \omega_0^3 \mathcal{R}_{yx} \mathcal{R}_{yz} \quad (1.100)$$

i tak samo dla trzeciej składowej:

$$\omega_0^3 = \sqrt{\frac{\langle y^2 \rangle}{\langle x^2 \rangle}} \omega_x^3 \sqrt{\frac{\langle z^2 \rangle}{\langle x^2 \rangle}} = \omega_x^3 \mathcal{R}_{yx} \mathcal{R}_{zx}, \quad (1.101)$$

a stąd

$$\omega_x^3 = \omega_0^3 \mathcal{R}_{xy} \mathcal{R}_{xz}. \quad (1.102)$$

Ten sposób definiowania potencjału pomocniczego oscylatora harmonicznego dla danego kształtu jądra umożliwia efektywne skonstruowanie numeryczne macierzy hamiltonianu.

1.2.5 Operacja odwrócenia czasu

Przypomnijmy standardowe własności operatora $\hat{\mathcal{T}}$ odwrócenia czasu (*time reversal*) w mechanice kwantowej:

- Operator $\hat{\mathcal{T}}$ jest antyliniowy więc nie da się zdefiniować wartości własnych, natomiast działanie oparte jest na założeniu, że $\hat{\mathcal{T}} : t' = -t$

- W przestrzeniach spinorowych operator $\hat{\mathcal{T}}$ możemy zapisać jako

$$\hat{\mathcal{T}} = i\sigma_y \hat{K} \quad (1.103)$$

gdzie K - jest to operator sprzężenia zespolonego, który spełnia warunki $\hat{K}^2 = 1$ i $\hat{K}^{-1} = \hat{K}$.

Zgodnie z taką reprezentacją, spin nukleonu zmienia znak przy odwróceniu czasu. Używane macierze Pauliego mają standardową postać:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.104)$$

a więc

$$\hat{\mathcal{T}} = i\sigma_y \hat{K} \quad \leftrightarrow \quad \hat{\mathcal{T}}^{-1} = -i\sigma_y \hat{K}. \quad (1.105)$$

i łatwo sprawdzamy że:

$$\hat{\mathcal{T}}^{-1} \hat{\mathcal{T}} = (-i\sigma_y) \hat{K} (i\sigma_y) \hat{K} = (-i\sigma_y)(-i)(-\sigma_y) \hat{K}^2 = -i^2 \sigma_y^2 = \mathbb{I}. \quad (1.106)$$

Dla fermionowych funkcji własnych mamy w ogólności:

$$\Phi(\vec{r}, \vec{s}) = \phi_n(\vec{r}) \chi_{s_z}(\vec{s}), \quad (1.107)$$

ze zwykłą reprezentacją funkcji spinowych:

$$\chi_{s_z=1/2}(\vec{s}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \chi_{s_z=-1/2}(\vec{s}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad ; \quad (1.108)$$

co daje:

$$\hat{\mathcal{T}} \chi_{s_z=1/2} = (i\sigma_y) \hat{K} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\chi_{s_z=-1/2}(\vec{s}); \quad (1.109)$$

$$\hat{\mathcal{T}} \chi_{s_z=-1/2} = (i\sigma_y) \hat{K} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_{s_z=1/2}(\vec{s}). \quad (1.110)$$

Stąd mamy:

$$\hat{\mathcal{T}} \chi_{s_z} = (-1)^{s+s_z} \chi_{-s_z}. \quad (1.111)$$

Używając notacji skrótowej otrzymujemy:

$$\chi_{s_z} = \chi_{m_s} = |s_z\rangle \quad (1.112)$$

$$\hat{\mathcal{T}} |s_z\rangle = (-1)^{s+s_z} | -s_z\rangle. \quad (1.113)$$

Widać, że:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{T}}(\Phi(\vec{r}, \vec{s}) e^{-iEt/\hbar}) |s_z\rangle &= (i\sigma_y) \hat{K} \Phi(\vec{r}) |s_z\rangle e^{-iEt/\hbar} = \Phi^*(\vec{r}) (-1)^{s+s_z} | -s_z\rangle e^{+iEt/\hbar} \\ &= (-1)^{s+s_z} \Phi^*(\vec{r}) | -s_z\rangle e^{+iEt/\hbar}. \end{aligned} \quad (1.114)$$

Wynika stąd, że funkcje falowe $\Phi(\vec{r}) |s_z\rangle$ i $\Phi^*(\vec{r}) | -s_z\rangle$ są liniowo niezależne. Spełniają one równanie Schrödingera ze wspólną wartością własną E , co nazywamy degeneracją Kramersa.

Hamiltonian średniego pola \hat{H}_{WS} używany w tej pracy, jest niezmienniczy ze względu na operację odwrócenia czasu, a baza tzw. pierwotna, poprzez konwencję nazywana bazą ‘ b ’ ($|b\rangle$) spełnia

$$|b\rangle \equiv |n_x n_y n_z; s_z\rangle = \Psi_{ho} \quad (1.115)$$

a więc i:

$$|\bar{b}\rangle = \hat{\mathcal{T}}|b\rangle = (-1)^{s+s_z} |n_x n_y n_z; -s_z\rangle. \quad (1.116)$$

Zdefiniujemy nową kombinację funkcji b i \bar{b} :

$$|t_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|b\rangle + \beta|\bar{b}\rangle); \quad (1.117)$$

$$|t_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha'|b\rangle - \beta'|\bar{b}\rangle), \quad (1.118)$$

dobierając współczynniki w taki sposób, że

$$\hat{\mathcal{T}}|t_{\pm}\rangle = \tau_{\pm}|t_{\pm}\rangle; \quad \text{gdzie} \quad \tau_{\pm} = \pm 1 \quad (1.119)$$

to baza stanów własnych operatora $\hat{\mathcal{T}}$ w naszej reprezentacji.

Można pokazać, że ta nowa baza, w tej monografii nazywana bazą ‘ t ’, pozwala na zapisanie macierzy hamiltonianu w postaci dwóch macierzy odpowiadających sekwencjom ‘time-up’ oraz ‘time-down’ - stanów partnerskich, formalnie odpowiadających odwróceniu czasu. Kilka szczegółów dotyczących własności baz użytych w tej pracy znajduje się w Dodatku C.

1.2.6 Struktura hamiltonianu

Najwygodniejszym wyborem bazy jest utworzenie iloczynu prostego przestrzeni kartezjańskiej i spinowej tak jak w równaniu 1.107. Wiemy jednocześnie, że \hat{H}_{ho} nie zależy od spinu więc energie własne oscylatora harmonicznego z funkcją rozszerzoną o spin nie zmieniają się:

$$\hat{H}_{ho}\Phi_n(\vec{r}, s_z) = E_{n_x n_y n_z} \Phi_n(\vec{r}, s_z). \quad (1.120)$$

Można zatem zapisać funkcje bazowe uwzględniające zależność od spinu w następujący sposób:

$$\Phi_n(\vec{r}, +\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} \phi_n(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \Phi_n(\vec{r}, -\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_n^*(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.121)$$

Baza funkcji $\phi_n(\vec{r})$ i baza funkcji $\phi_n^*(\vec{r})$ są liniowo niezależne i w efekcie otrzymujemy bazę o wymiarach $2N \times 2N$.

Wyjściowa postać hamiltonianu w bazie rozdzielonej na bloki ‘time-up’ oraz ‘time-down’ to

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cc} |\Psi_n\rangle & \hat{\mathcal{T}}|\Psi_n\rangle \\ \langle\Psi_n| & \langle\Psi_n|\hat{H}|\Psi_n\rangle & \langle\Psi_n|\hat{H}\hat{\mathcal{T}}|\Psi_n\rangle & \langle\Psi_n|\hat{H}|\Psi_n\rangle & \langle\Psi_n|\hat{H}\hat{\mathcal{T}}|\Psi_n\rangle \\ \langle\langle\Psi_n|\hat{\mathcal{T}} & \langle\langle\Psi_n|\hat{\mathcal{T}}\hat{H}|\Psi_n\rangle & \langle\langle\Psi_n|\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{H}\hat{\mathcal{T}}|\Psi_n\rangle & \langle\langle\Psi_n|\hat{\mathcal{T}}\hat{H}|\Psi_n\rangle & \langle\langle\Psi_n|\hat{H}|\Psi_n\rangle^* \end{array} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{cc} \langle\Psi_n|\hat{H}|\Psi_n\rangle & \langle\Psi_n|\hat{H}\hat{\mathcal{T}}|\Psi_n\rangle \\ \langle\langle\Psi_n|\hat{\mathcal{T}}\hat{H}|\Psi_n\rangle & \langle\langle\Psi_n|\hat{H}|\Psi_n\rangle^* \end{array} \quad (1.122)$$

Przy wprowadzeniu specyficznej konwencji faz, tzn. np. przy wyborze bazy zespolonej postaci:

$$\phi_n(\vec{r}) = i^{n_y} H_{n_x} H_{n_y} H_{n_z}, \quad (1.123)$$

gdzie H_{n_x} to są wielomiany Hermita, znikają elementy macierzowe $\langle \Psi_{n'} | \hat{H} | \hat{\mathcal{T}} \Psi_n \rangle$ i $\langle \hat{\mathcal{T}} \Psi_{n'} | \hat{H} | \Psi_n \rangle$, co zostanie pokazane w następnym podrozdziale. Ponieważ

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n'} | \hat{\mathcal{T}} \hat{H} \hat{\mathcal{T}} | \Psi_n \rangle &= \langle \hat{\mathcal{T}} \Psi_{n'} | \hat{H} | \hat{\mathcal{T}} \Psi_n \rangle = \langle \hat{K}^{-1} U^{-1} \Psi_{n'} | \hat{H} | U \hat{K} \Psi_n \rangle \\ &= \langle \hat{K}^{-1} \Psi_{n'} | U^{-1} \hat{H} U | \hat{K} \Psi_n \rangle = \langle \hat{K} \Psi_{n'} | U^{-1} \hat{H} (U \hat{K}) | \Psi_n \rangle \\ &= \langle \Psi_{n'} | (\hat{K}^{-1} U^{-1}) \hat{H} (U \hat{K}) | \Psi_n \rangle^* = \langle \Psi_{n'} | \hat{\mathcal{T}}^{-1} \hat{H} \hat{\mathcal{T}} | \Psi_n \rangle^* \\ &= \langle \Psi_{n'} | \hat{H} | \Psi_n \rangle^* \end{aligned} \quad (1.124)$$

a także

$$\langle \hat{\mathcal{T}} \Psi_{n'} | \hat{H} | \Psi_n \rangle = -\langle \Psi_{n'} | \hat{\mathcal{T}}^{-1} \hat{H} \hat{\mathcal{T}} | \Psi_n \rangle^* = -\langle \Psi_{n'} | \hat{H} \hat{\mathcal{T}} | \Psi_n \rangle^* = -\langle \Psi_{n'} | \hat{H} | \hat{\mathcal{T}} \Psi_n \rangle^*, \quad (1.125)$$

Konsekwencje tej struktury są dyskutowane w następnym podrozdziale.

Ponieważ $\hat{\mathcal{T}} \Psi_n$ i Ψ_n są liniowo niezależne, to baza powinna zawierać oba typy funkcji falowych.

1.2.7 Konstrukcja macierzy hamiltonianu

Jak wspomniano wyżej, baza musi zawierać oba typy stanów: $|b\rangle$ i $|\bar{b}\rangle$ a macierz z nich zbudowana ma $2N \times 2N$ elementów macierzowych, którymi w ogólności są liczby zespolone. Hamiltonian musi spełniać dwa warunki:

1. Musi być hermitowski co oznacza, że

$$H^\dagger = H \quad \leftrightarrow \quad h_{ij} = h_{ij}^*; \quad i, j = 1, 2, 3 \dots 2N, \quad (1.126)$$

czyli

$$Re(h_{ij}) = Re(h_{ji}); \quad Im(h_{ij}) = -Im(h_{ji}). \quad (1.127)$$

Każda macierz zespolona ma swobodę dwóch liczb rzeczywistych, gdyby nie było żadnych ograniczeń, ale macierz hermitowska musi spełniać $H^\dagger = H$, co dostarcza N^2 równań dodatkowych tak więc jest mniej stopni swobody w dyskutowanej macierzy. W terminach liczb rzeczywistych mamy zatem:

$$\frac{(2N)(2N) - 2N}{2} + 2N = 2N^2 - N + 2N = 2N^2 + N \quad \text{liczb rzeczywistych} . \quad (1.128)$$

podczas gdy dla liczb urojonych mamy $Im(h_{ii}) = 0$ i w konsekwencji pozostaje swobodnych

$$\frac{(2N)(2N) - 2N}{2} = 2N^2 - N \quad \text{liczb rzeczywistych}. \quad (1.129)$$

Dlatego też warunek hermitowskości daje:

$$(2N^2 - N) + (2N^2 + N) = 4N^2 \quad (1.130)$$

niezależnych liczb rzeczywistych. To jest równoważne $2N^2$ wolnych liczb zespolonych z początkowych $4N^2$.

2. Musi być niezmienniczy w czasie. Z podrozdziału 1.2.6 możemy zapisać:

$$\langle \bar{b}' | \hat{H} | \bar{b} \rangle = \langle b' | \hat{H} | b \rangle^* \quad (1.131)$$

$$\langle \bar{b}' | \hat{H} | b \rangle = -\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle^* \quad (1.132)$$

oraz stworzyć macierz, gdzie poszczególne bloki, będą mieć następującą strukturę:

$$\begin{array}{c}
 \langle b' | \\
 \langle \bar{b}' | \hat{T} \rangle
 \end{array}
 \left[\begin{array}{c|c}
 |b\rangle & \hat{T}|b\rangle \\
 \hline
 \langle b' | \hat{H} | b \rangle & \langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle \\
 \hline
 \langle \bar{b}' | \hat{H} | b \rangle = -\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle^* & \langle \bar{b}' | \hat{H} | \bar{b} \rangle = \langle b' | \hat{H} | b \rangle^*
 \end{array} \right]. \quad (1.133)$$

Lewy górny blok ma N^2 elementów zespolonych, z których N^2 są rzeczywiste. W członach liczb rzeczywistych to daje swobodę:

$$\frac{(N)(N) - N}{2} + N = \frac{1}{2}(N^2 + N) \quad \text{liczb rzeczywistych} . \quad (1.134)$$

W członach urojonych mamy:

$$\frac{(N)(N) - N}{2} = \frac{1}{2}(N^2 - N) \quad \text{liczb rzeczywistych} , \quad (1.135)$$

co daje w sumie:

$$\frac{1}{2}(N^2 - N) + \frac{1}{2}(N^2 + N) = N^2 \quad \text{liczb rzeczywistych} . \quad (1.136)$$

Wynikiem niezmienniczości w czasie jest fakt, że prawa dolna część macierzy (1.133) nie ma innych swobodnych elementów bo jest całkowicie określona przez lewą górną macierz.

Porównując te dwa warunki znajdujemy, że

$$\langle b | \hat{H} | \bar{b}' \rangle = -\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle = -\langle \bar{b}' | \hat{H} | b \rangle^T = \langle b | \hat{H} | \bar{b}' \rangle^{T*} = \langle b | \hat{H} | \bar{b}' \rangle^\dagger. \quad (1.137)$$

Zdefiniujemy transformację unitarną:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{c|c}
 \begin{array}{cccc}
 1 & & & \\
 & 1 & & \\
 & & 1 & \\
 & & & \ddots \\
 & & & & 1
 \end{array}
 &
 \begin{array}{cccc}
 i & & & \\
 & i & & \\
 & & i & \\
 & & & \ddots \\
 & & & & i
 \end{array}
 \\
 \hline
 \begin{array}{cccc}
 -i & & & \\
 & -i & & \\
 & & -i & \\
 & & & \ddots \\
 & & & & -i
 \end{array}
 &
 \begin{array}{cccc}
 -1 & & & \\
 & -1 & & \\
 & & -1 & \\
 & & & \ddots \\
 & & & & -1
 \end{array}
 \end{array} \right]. \quad (1.138)$$

Wtedy w działaniu na elementy macierzowe bazy mamy:

$$U \begin{bmatrix} |b_1\rangle \\ |b_2\rangle \\ |b_3\rangle \\ \vdots \\ |b_N\rangle \\ |\bar{b}_1\rangle \\ |\bar{b}_2\rangle \\ |\bar{b}_3\rangle \\ \vdots \\ |\bar{b}_N\rangle \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |b_1\rangle + i|\bar{b}_1\rangle \\ |b_2\rangle + i|\bar{b}_2\rangle \\ |b_3\rangle + i|\bar{b}_3\rangle \\ \dots \\ |b_N\rangle + i|\bar{b}_N\rangle \\ -i|b_1\rangle - |\bar{b}_1\rangle \\ -i|b_2\rangle - |\bar{b}_2\rangle \\ -i|b_3\rangle - |\bar{b}_3\rangle \\ \dots \\ -i|b_N\rangle - |\bar{b}_N\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |t_{+,1}\rangle \\ |t_{+,2}\rangle \\ |t_{+,3}\rangle \\ \dots \\ |t_{+,N}\rangle \\ |t_{-,1}\rangle \\ |t_{-,2}\rangle \\ |t_{-,3}\rangle \\ \dots \\ |t_{-,N}\rangle \end{bmatrix} \quad (1.139)$$

W ten sposób znajdujemy nową bazę postaci (Dodatek C):

$$|t_+\rangle = +\frac{1}{\sqrt{2}}(|b\rangle + i|\bar{b}\rangle); \quad (1.140)$$

$$|t_-\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(i|b\rangle + |\bar{b}\rangle), \quad (1.141)$$

i możemy otrzymać transformacje odwrotne:

$$|t_+\rangle + i|t_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(2|b\rangle) = \sqrt{2}|b\rangle \quad (1.142)$$

$$|t_+\rangle - i|t_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(2i|\bar{b}\rangle) = i\sqrt{2}|\bar{b}\rangle. \quad (1.143)$$

W konsekwencji mamy:

$$|b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_+\rangle + i|t_-\rangle); \quad (1.144)$$

$$|\bar{b}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|t_+\rangle + |t_-\rangle). \quad (1.145)$$

W tej nowej reprezentacji mamy:

$$\begin{aligned} \langle t_+ | \hat{H} | t_+ \rangle &= \frac{1}{2} (\langle b' | - i \langle \bar{b}' |) \hat{H} (|b\rangle + i|\bar{b}\rangle) \\ &= \frac{1}{2} \{ \langle b' | \hat{H} | b \rangle + \langle \bar{b}' | \hat{H} | \bar{b} \rangle \} + \frac{1}{2} i \{ \langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle - \langle \bar{b}' | \hat{H} | b \rangle \} \\ &= \frac{1}{2} \{ \langle b' | \hat{H} | b \rangle + \langle b' | \hat{H} | b \rangle^* \} + \frac{1}{2} i \{ \langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle + \langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle \} \\ &= \frac{1}{2} (2 \operatorname{Re}(\langle b' | \hat{H} | b \rangle)) + \frac{1}{2} i (2 \operatorname{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle)), \end{aligned} \quad (1.146)$$

czyli podsumowując:

$$\langle t_+ | \hat{H} | t_+ \rangle = \operatorname{Re}(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) + i \operatorname{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle). \quad (1.147)$$

Podobnie możemy znaleźć:

$$\begin{aligned}
\langle t'_- | \hat{H} | t_- \rangle &= \frac{1}{2}(-\langle \bar{b}' | + i\langle b' |) \hat{H}(-i|b\rangle - |\bar{b}\rangle) \\
&= \frac{1}{2}\{\langle \bar{b}' | \hat{H} | \bar{b}\rangle + \langle b' | \hat{H} | b\rangle\} + \frac{1}{2}i\{\langle \bar{b}' | \hat{H} | b\rangle - \langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle\} \\
&= \frac{1}{2}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle + \langle b' | \hat{H} | b\rangle^*) + \frac{1}{2}i(-\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle - \langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle^*) \\
&= \frac{1}{2}(2\text{Re}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle)) - \frac{1}{2}i(2\text{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle)), \tag{1.148}
\end{aligned}$$

czyli:

$$\langle t'_- | \hat{H} | t_- \rangle = \text{Re}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle) - i\text{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle). \tag{1.149}$$

Stąd dostajemy, że

$$\langle t'_- | \hat{H} | t_- \rangle = \langle t'_+ | \hat{H} | t_+ \rangle^*. \tag{1.150}$$

Przy członach niediagonalnych mamy:

$$\begin{aligned}
\langle t'_+ | \hat{H} | t_- \rangle &= \frac{1}{2}(\langle b' | - i\langle \bar{b}' |) \hat{H}(-i|b\rangle - |\bar{b}\rangle) \\
&= \frac{1}{2}\{-\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle - \langle \bar{b}' | \hat{H} | b\rangle\} + \frac{1}{2}i\{\langle \bar{b}' | \hat{H} | \bar{b}\rangle - \langle b' | \hat{H} | b\rangle\} \\
&= -\frac{1}{2}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle - \langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle^*) + \frac{1}{2}i(\langle \bar{b}' | \hat{H} | b\rangle^* - \langle b' | \hat{H} | b\rangle) \\
&= -\frac{1}{2}(2i\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle)) + \frac{1}{2}i(-2i\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle)) \\
&= \text{Im}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle) - i\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle), \tag{1.151}
\end{aligned}$$

czyli:

$$\langle t'_+ | \hat{H} | t_- \rangle = \text{Im}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle) - i\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle). \tag{1.152}$$

Z drugiej strony mamy:

$$\begin{aligned}
\langle t'_- | \hat{H} | t_+ \rangle &= \frac{1}{2}(-\langle \bar{b}' | + i\langle b' |) \hat{H}(|b\rangle + i|\bar{b}\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(-\langle \bar{b}' | \hat{H} | b\rangle - \langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle) + \frac{1}{2}i(\langle b' | \hat{H} | b\rangle - \langle \bar{b}' | \hat{H} | \bar{b}\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle^* - \langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle) + \frac{1}{2}i(\langle b' | \hat{H} | b\rangle - \langle b' | \hat{H} | b\rangle^*) \\
&= \frac{1}{2}(-2i\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle)) + \frac{1}{2}i(2i\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle)) \\
&= -\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle) - \text{Im}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle), \tag{1.153}
\end{aligned}$$

co daje:

$$\langle t'_- | \hat{H} | t_+ \rangle = -\text{Im}(\langle b' | \hat{H} | b\rangle) - \text{Im}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b}\rangle), \tag{1.154}$$

czyli porównując wzory (1.152) i (1.154) otrzymamy:

$$\langle t'_- | \hat{H} | t_+ \rangle = -\langle t'_+ | \hat{H} | t_- \rangle^*. \tag{1.155}$$

Oznacza to, że można tak dobrać fazy, żeby elementy macierzowe były albo czysto rzeczywiste albo czysto urojone, a co więcej macierze blokowo niediagonalne mają elementy macierzowe urojone. Jeśli hamiltonian jest rzeczywisty, to potrzebne są tylko rzeczywiste elementy macierzowe więc elementy blokowo niediagonalne się zerują. Przykłady symetrii przestrzennych są przedstawione w Dodatku D.

Powyższych wzorów można użyć w celu zoptymalizowania doboru konwencji faz.

Jądro opisane kwadrupolowym parametrem deformacji ($\alpha_{\lambda=2,\mu}$), jeśli $\mu = 2$ czyli jądro będzie trójosiowe to może łamać wyższe symetrie geometryczne, ale nie będzie łamać symetrii hamiltonianu pola średniego: parzystości, sygnatury czy simplexu. Natomiast deformacji oktopolowej ($\alpha_{\lambda=3,\mu}$) towarzyszy zachowanie symetrii simplex (S_y) ale złamane są symetrie parzystości i sygnatury, gdyż oktopolowość z definicji jest to złamanie symetrii odbiciowej. Przypomnijmy jeszcze, że operator simplexu \hat{S}_y , jest to złożenie operatora obrotu \hat{R}_y wokół osi OY o 180° z odbiciem w środku układu odniesienia (parzystość) $\hat{\Pi}$ czyli $\hat{S}_y = \hat{R}_y(\pi)\hat{\Pi}$. Zatem wybór bazy t nie jest zupełnie przypadkowy, gdyż jest to dobra baza dla operatora simplexu więc zachowanie czy też złamanie symetrii simplexu jest automatycznie brane pod uwagę.

Diagonalizacja hamiltonianu opisującego ruch cząstki w polu średnim, dostarcza wiadomości o funkcjach falowych, energiach jednocząstkowych, ułożeniu poziomów energetycznych i ich liczbach kwantowych. Te informacje posłużą w następnej części do obliczenia energii mikroskopowych z metody Strutinskiego, energii pairing z metody BCS usprawnionej poprzez rzutowanie na dobrą liczbę cząstek, a także energii rotacji z metody kranking.

1.2.8 Metoda makroskopowo-mikroskopowa Strutinsky'iego

Metoda makroskopowo-mikroskopowa ma swój początek około połowy XX wieku. Pierwsze modele kropłowe, makroskopowo opisujące własności jądra atomowego powstały jeszcze wcześniej, w latach 30-tych ubiegłego stulecia. Model Weizsäcker'a-Bethego [Wei35, Bet36] czy późniejszy model Myers'a Świąteckiego [Mye66] zakładały, że jądro można opisać jako kroplę cieczy, która jest nieściśliwa i naładowana a nie rozpada się dzięki napięciu powierzchniowemu. Pierwsze próby uwzględnienia efektów powłokowych i pairing do obliczenia mas jąder, zaproponowane przez Camerona [Cam57], zawierały ponad trzysta poprawek empirycznych i nie odtwarzały dobrze energii wiązania. W celu wprowadzenia oznaczeń zostaną przytoczone tylko najważniejsze równości definiujące to podejście, gdyż większość szczegółów obliczeń można znaleźć na przykład w: [Dud04, Dud04a, Dud05, II, I].

Dużą część obliczeń prezentowanych tutaj wykonano modelem makroskopowym Lublin-Strasbourg Drop [Pom03] (LSD), w którym został uwzględniony człon krzywizny powierzchni jądrowej. Energia wiązania jądra atomowego w modelu LSD wyraża się wzorem:

$$\begin{aligned}
E_{lsd}(def) = & ZM_H + NM_n - 0.00001433Z^{2.39} - b_{vol}(1 - \kappa_{vol}((N - Z)/A)^2)A \\
& + b_{surf}(1 - \kappa_{surf}((N - Z)/A)^2)A^{2/3}B_{surf}(def) \\
& + b_{curv}(1 - \kappa_{curv}((N - Z)/A)^2)A^{1/3}B_{curv}(def) \\
& + b_{curvG}(1 - \kappa_{curvG}((N - Z)/A)^2)A^0 + \frac{3}{5}e^2 \frac{Z^2}{r_0^{ch} A^{1/3}} B_{Coul}(def) \\
& - C_4 \frac{Z^2}{A} - E_{Cong.} + E_{micro},
\end{aligned} \tag{1.156}$$

z najnowszym zestawem parametrów, o wartościach dopasowanych do około 3000 mas

jądەر:

$$\begin{aligned}
b_{vol} &= 15.4920 \text{ MeV}, & \kappa_{vol} &= 1.8601, \\
b_{surf} &= 16.9707 \text{ MeV}, & \kappa_{surf} &= 2.2938, \\
b_{curv} &= 3.8602 \text{ MeV}, & \kappa_{curv} &= -2.3764, \\
r_0 &= 1.21725 \text{ fm}, \\
C_4 &= 0.91810 \text{ MeV},
\end{aligned}$$

gdzie $A = Z + N$ i $I = (N - Z)/A$ a człony: powierzchniowy (B_{surf}), krzywizny (B_{curv}) oraz kulombowski, zależą od deformacji jądra [Pom03].

W zależności od badanych zjawisk należy używać modeli, które dają wiarygodniejsze wyniki. Jeśli badamy jądra gorące, szybko-rotujące bardzo dobrze sprawdza się model LSD ale gdy potrzebna jest dyskusja efektów zależnych od krzywizny powierzchni energii potencjalnej przy spinach zerowych, to odpowiedniejszy okazał się model *Folded Yukawa plus exponential*. Model LSD zakłada, że jądro ma powierzchnię dobrze określoną a model *Folded Yukawa plus exponential* pozwala opisać rozmytą powierzchnię. Rozmycie następuje poprzez rozłożenie funkcji Yukawy wokół ostrej powierzchni. Funkcja Yukawy [Dav76]:

$$g(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \frac{1}{4\pi a^3} \frac{e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/a}; \quad (1.157)$$

$$\int_{\infty} d^3 r_{12} g(r_{12}) = 1; \quad (1.158)$$

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (1.159)$$

zależy tylko od rozmiaru przestrzeni, w której powierzchnia została rozmyta a a jest to zakres funkcji Yukawa czyli parametr rozmycia. Całkowanie funkcji Yukawy po całej przestrzeni daje warunek normalizacji. Energia makroskopowa dla jądra sferycznego jest zdefiniowana [Kra79] jako:

$$\begin{aligned}
E_{fyu}(0) &= ZM_H + NM_n - 0.00001433Z^{2.39} - a_{vol}(1 - \chi_{vol}((N - Z)/A)^2)A \\
&+ a_{surf}(1 - \chi_{surf}((N - Z)/A)^2) \left\{ A^{2/3} - 3\left(\frac{a}{r_0}\right)^2 + \left(\frac{r_0}{a}A^{1/3} + 1\right) \right. \\
&\left. \left[2A^{2/3} + 3\frac{a}{r_0}A^{1/3} + 3\left(\frac{a}{r_0}\right)^2 \right] e^{-2r_0A^{1/3}/a} \right\} \\
&+ \frac{3}{5} \frac{e^2}{r_0} \left[\frac{Z^2}{A^{1/3}} - \frac{5}{2} \left(\frac{b}{r_0}\right)^2 \frac{Z^2}{A} - \frac{5}{4} \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{2/3} \frac{Z^{4/3}}{A^{1/3}} \right], \quad (1.160)
\end{aligned}$$

a energia jądra zdeformowanego to [Mol95]:

$$\begin{aligned}
E_{fyu}(def) &= ZM_H + NM_n - 0.00001433Z^{2.39} - a_{vol}(1 - \chi_{vol}((N - Z)/A)^2)A \\
&+ a_{surf}(1 - \chi_{surf}((N - Z)/A)^2)A^{2/3}B_{surf} + a_0A^0 \\
&+ \frac{3}{5} \frac{e^2 Z^2}{A^{1/3}} B_{coul} - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} \frac{e^2 Z^{4/3}}{A^{1/3}} - c_a(N - Z) \\
&+ - \frac{Z^2}{A} \frac{1}{8} \frac{r_p^2 e^2}{r_0^3} \left[\frac{145}{48} - \frac{327}{2880} \left(k_f r_p\right)^2 + \frac{1527}{1209600} \left(k_f r_p\right)^4 \right]; \quad (1.161)
\end{aligned}$$

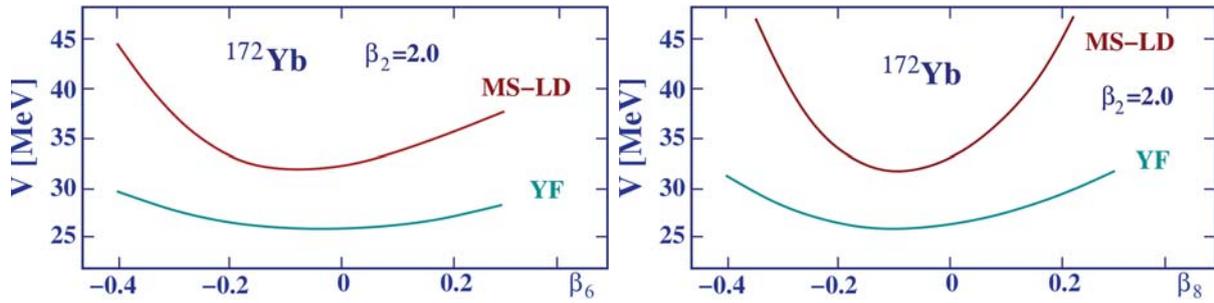
$$k_f = \left(\frac{9\pi Z}{4A}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0}, \quad (1.162)$$

gdzie stałe były dopasowane do mas jąder i wysokości barier na rozszczepienie:

$$\begin{aligned} a_{vol} &= 16.00126 \text{ MeV}, & \chi_{vol} &= 1.9224, \\ a_{surf} &= 21.18466 \text{ MeV}, & \chi_{surf} &= 2.345, \\ r_0 &= 1.16 \text{ fm}, & r_p &= 0.80 \text{ fm}, \\ a &= 0.680 \text{ fm}, & b &= 0.99 \text{ fm}, \\ a_0 &= 2.615 \text{ MeV}, & c_a &= 0.10289 \text{ MeV}. \end{aligned}$$

Energia Yukawa-plus-exponential jest podobna do modelu Finite Range Liquid Drop Model (FRLDM) czyli zawiera człony: powierzchniowy, kulombowski i objętościowy, a energia deformacji to różnica energii liczonej dla jądra zdeformowanego i sferycznego.

Różnica między modelami makroskopowymi pokazuje się w sposobie reagowania na parametry deformacji, gdyż różnice energii w stanie podstawowym i w siodle są podobne. Rys. 1.6 przedstawia dwa profile energii otrzymane z modelami Myersa-Świąteckiego (MS-LD) [Mye66], czyli zakładając ostrą granicę powierzchni jądrowej i Folded Yukawy- gdzie powierzchnia jest rozmyta. Patrząc na profile w funkcji parametrów deformacji wyższych rzędów $\lambda = 6$ i $\lambda = 8$ widać, że model kropkowy MS-LD daje profile bardziej strome niż FY, co oznacza dużo większą czułość modelu kropkowego na zmianę kształtu jądra.



Rysunek 1.6: Porównanie profilów energii otrzymanych z obliczeń modelu kropkowego Myersa-Świąteckiego (MS-LD) i Yukawa plus exponential (YF) dla wydłużenia $\alpha_{20} = 2.0$ w funkcji parametru deformacji α_{60} (lewy) i α_{80} (prawy) (informacja prywatna).

Część mikroskopowa energii całkowitej składa się z energii powłokowej liczonej według metody Strutinkiego [Str66, Str67, Str68] oraz energii 'pairing' [Bes63], gdzie różnica między sumą poziomów jednocząstkowych (wzór 1.163) i energią korelacji par, uzyskaną przy pomocy wzoru (1.164), daje energię 'pairing' [Bol72]. Metoda Bardeena, Coopera, Schriefferera (BCS) [Bar57], wprowadzona do opisu nadprzewodnictwa w teorii ciała stałego, została zaadaptowana do jądra atomowego przez Belyaev'a [Bel59]. Wynik końcowy tej teorii czyli energia systemu, może być zapisany jako

$$E_{BCS} = \sum_{\nu=N_1}^{N_2} 2v_{\nu}^2 (e_{\nu} - \lambda) - \frac{\Delta^2}{G} - G \left(\sum_{\nu=N_1}^{N_2} v_{\nu}^4 - \sum_{\nu=N_1}^{N_2} 1 \right) - \sum_{\nu=N_1}^{N_2} (e_{\nu} - \lambda) \quad (1.163)$$

oraz

$$\bar{E}_{pc} = -\frac{1}{4} \frac{N^2}{\bar{\rho}} \left\{ \sqrt{1 + \frac{2\bar{\rho}\bar{\Delta}}{N}} - 1 \right\} + \frac{1}{2\bar{\rho}} \bar{\Delta} \bar{G} \arctan \frac{N}{2\bar{\rho}\bar{\Delta}} \quad (1.164)$$

gdzie \mathcal{N}_1 i \mathcal{N}_2 to granice 'okna pairingowego', v_ν^2 - prawdopodobieństwo obsadzenia pojedynczego stanu, $\bar{\rho}$ - średni rozkład gęstości oraz G - nasilenie sił 'pairing' [Dud80]. Użyto tutaj przerw energetycznych dopasowanych do różnic energii wiązania wyekstrahowanych z danych doświadczalnych a zebranych w artykule [Ant02]:

$$\bar{\Delta}_n = 9.08/\sqrt{A} \text{ MeV}, \quad \bar{\Delta}_p = 9.85/\sqrt{A} \text{ MeV}. \quad (1.165)$$

Całkowita energia 'pairing' w modelu BCS dana jest wzorem:

$$E_{pair} = E_{BCS} + \bar{E}_{pc}. \quad (1.166)$$

Energetyczne przerwy pairingowe (Δ) testowano w funkcji liczb masowych, atomowych i izospinu, a wyniki przedstawiono w pracy [Dud03]. Widmo energii jednocząstkowych e_ν zostało wyliczone z potencjałem jednocząstkowym Woods - Saxon z parametrami uniwersalnymi [Cwi87]. Testy był przeprowadzane dla zbiorów parametrów Blomqvista [Blo60], Rosta [Ros68] i Chepurnova [Che68] ale do obliczeń zastosowano parametry dopasowane do jąder magicznych a następnie interpolowane między nimi [Dud78], [Dud78a].

Modyfikacjami metody w porównaniu do [Mol97] są: użycie w części makroskopowej modelu Yukawa-plus-exponential (E_{fyu}) [Mol95] a w części 'pairing': metody rzutowania na dobrą liczbę cząstek (Particle Number Projection - PNP). Także parametry potencjału Woods-Saxona zostały zamienione na nowszy zestaw - COMPACT [Dub05a], otrzymany poprzez dopasowanie do najnowszego zbioru doświadczalnych poziomów jednocząstkowych. W kolejnym podrozdziale uwaga skupiona jest na zastosowaniu teorii grup punktowych do znajdowania elementów symetrii grup punktowych w widmach poziomów energetycznych.

1.3 Struktura grupowa rozwiązań

Dokładne omówienie teorii grup punktowych [Ham87], wychodzi poza tematykę tej monografii ale zdefiniujemy kilka określeń, użytych do dyskusji wyników. Grupy punktowe są tutaj traktowane jako grupy symetrii ciała, którego przynajmniej jeden punkt pozostaje nieruchomy pod wpływem działania operacji grupowych. Przykładami transformacji symetrii mogą być obroty wokół danej osi o pewien kąt, inwersja przestrzenna czy też odbicie względem pewnej płaszczyzny. Oczywiście złożenia dowolnych takich elementów też mogą być elementami dyskutowanych tu grup punktowych.

Reprezentacja $D(g)$ grupy $g \in G$ jest to zbiór operatorów działających w pewnej przestrzeni wektorowej, tej samej w jakiej będziemy zapisywać rozważany hamiltonian; postać operatorów może być i najczęściej jest macierzowa. Zbiór tych operatorów tworzy grupę homomorficzną z rozważaną grupą wyjściową G . O reprezentacji $D(g)$ o wymiarze N możemy powiedzieć, że jest nieprzywiedlna jeśli nie istnieje dobór bazy w naszej przestrzeni taki, że wymiar wszystkich macierzy tej reprezentacji może zostać zredukowany do mniejszej wartości, $N' < N$.

Charakter elementu grupy to z definicji ślad macierzy reprezentacji [Cor94]:

$$\chi(g) = \text{Tr}D(g) = \sum_u D_u(g), \quad (1.167)$$

i jak wiadomo z algebry, nie zależy on od bazy, w której liczona jest dana reprezentacja czyli znając zbiór charakterów elementów grupy można stosować wiele praktycznych twierdzeń teorii grup, dotyczących w szczególności rzutowań rozwiązań fizycznych na przestrzenie reprezentacji nieredukowalnych.

W tej pracy dyskutowane będą praktyczne zastosowania dwóch grup punktowych o 'największych' symetriach: grupa T_d czyli tetrahedralna i O_h - oktahedralna.

Grupa T_d jest to grupa dwudziestoczworoelementowa, nieprzemienne i można ją sobie wyobrazić jako grupę wszystkich symetrii czworościanu foremego. Grupa O_h ma czterdzieści osiem elementów i jest to grupa wszystkich symetrii figury potocznie związanych z symetrią diamentu. Należy pamiętać, że obie te grupy zastosowane do równania Schrödingera dla fermionów, przyjmują postać tzw. grup podwójnych, ze zwiększoną liczbą elementów: T_d - 48 oraz O_h - 96.

Energia potencjalna jąder może być liczona dla kształtów niezmienniczych względem grup punktowych takich jak grupa T_d czyli tetrahedralna albo O_h oktahedralna. W pracy [Ros02] konstruowano hamiltoniany rotacyjne, niezmiennicze ze względu na wszystkie transformacje danej grupy i w ten sposób po diagonalizacji, otrzymywano funkcje falowe o określonej symetrii (tzn. należące do określonych reprezentacji nieprzywiedlnych).

W naszym przypadku użyto specyficznej konstrukcji pozwalającej na numeryczną identyfikację przynależności danych rozwiązań do reprezentacji nieredukowalnych funkcji. Praktycznie / technicznie takiej identyfikacji można dokonać poprzez wyznaczenie wartości pewnej funkcji pomocniczej, którą oznaczono yn - omówienie tej techniki znajdzie się nieco później w tej monografii (Rozdział 2.1) [Goz13].

Niech $\{|\nu\rangle\}$ będzie bazą ortonormalną, a $|\Psi\rangle$ wektorem stanu (np. wektorem własnym hamiltonianu). Wtedy funkcja testująca $yn_\Psi(\mu)$ dla tego wektora (μ numeruje reprezentacje nieprzywiedlne grupy) jest zdefiniowana przy pomocy następującej konstrukcji:

$$yn(\mu) \equiv \langle \Psi | P_G^{(\mu)} | \Psi \rangle. \quad (1.168)$$

W tym przypadku $P_G^{(\mu)}$ jest operatorem rzutowym na reprezentację $[\mu]$ [Ham87]:

$$P_G^{(\mu)} = \frac{\dim[\mu]}{N(G)} \sum_{g \in G} \chi_G^{(\mu)}(g)^* \hat{g}, \quad (1.169)$$

gdzie $\chi_G^{(\mu)}(g)$ oznacza charaktery reprezentacji $[\mu]$ grupy G , a \hat{g} jest operatorem reprezentującym element g grupy G w przestrzeni funkcji $|\Psi\rangle$. Powyżej, $N(G)$ jest liczbą elementów symetrii w danej grupie punktowej (tzw. ranga grupy), a $\dim[\mu]$ to wymiar danej reprezentacji nieprzywiedlnej. Tabele z wymiarami macierzy reprezentacji nieprzywiedlnych można znaleźć w licznych publikacjach, np. [IX].

Zapiszmy więc:

$$y_n(\mu) = \frac{\dim[\mu]}{N(G)} \sum_{g \in G} \chi_G^{(\mu)}(g)^* \langle \Psi | \hat{g} | \Psi \rangle. \quad (1.170)$$

Aby obliczyć $\langle \Psi | \hat{g} | \Psi \rangle$ najłatwiej jest rozwinąć wektor stanu $|\Psi\rangle$ w bazie, w której \hat{g} działa w oczywisty sposób. Niech taką bazą będzie wspomniana w Dodatku C: $|\nu\rangle = |r_{\kappa;nljm}\rangle$. Wtedy

$$|\Psi\rangle = \sum_{\nu} c_{\nu} |\nu\rangle, \quad (1.171)$$

i jako konsekwencja

$$y_n(\mu) = \frac{\dim[\mu]}{N(G)} \sum_{g \in G} \sum_{\nu'\nu} \chi_G^{(\mu)}(g)^* c_{\nu'}^* c_{\nu} \langle \nu' | \hat{g} | \nu \rangle. \quad (1.172)$$

Elementy grup punktowych można wygodnie sparametryzować przy pomocy kątów Eulera

$$\hat{g} \rightarrow \hat{g}(s, \Omega) = (C_i)^{\frac{1}{2}(1-s)} R(\Omega); \quad s = \pm 1, \quad (1.173)$$

gdzie C_i to operacja inwersji, zaś dyskretne kąty Eulera oznaczone są symbolem Ω . Łatwo sprawdzić, że jeżeli $|nljm\rangle$ oznaczają stany sferycznego oscylatora harmonicznego, to

$$\langle n'l'j'm' | \hat{g}(s, \Omega) | nljm \rangle = \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{j'j} (-1)^{l(1-s)/2} D_{m'm}^j(\Omega), \quad (1.174)$$

gdzie $D_{m'm}^j$ - funkcje Wignera. Dostajemy więc

$$y_n(\mu) = \frac{\dim[\mu]}{N(G)} \sum_{g \in G} \sum_{n'l'j'm';nljm} \chi_G^{(\mu)}(g)^* c_{n'l'j'm'}^* c_{nljm} \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{j'j} (-1)^{l(1-s)/2} D_{m'm}^j. \quad (1.175)$$

gdzie współczynniki c_{nljm} pochodzą z transformacji bazy kartezjańskiej t do bazy sferycznej r , tak jak to jest pokazane w Dodatku C.2. Poprzez używanie bazy r , która jest dobrą bazą dla symetrii simplex, otrzymujemy:

$$\begin{aligned} y_n(\mu) &= \frac{\dim[\mu]}{N(G)} \sum_{g \in G} \sum_{\kappa'\kappa} \sum_{nlj} \sum_{m'm=+\frac{1}{2}}^j \chi_G^{(\mu)*}(g) c_{\kappa'nljm'}^* c_{\kappa nljm} \langle r_{\kappa'}; nljm' | g(s, \Omega) | r_{\kappa}; nljm \rangle \\ &= \frac{\dim[\mu]}{N(G)} \sum_{g \in G} \sum_{\kappa'\kappa} \sum_{nlj} \sum_{m'm=+\frac{1}{2}}^j \chi_G^{(\mu)*}(g) c_{\kappa'nljm'}^* c_{\kappa nljm} (-1)^{l(1-s)/2} \{ \alpha_{nljm'}^{(\kappa')*} \alpha_{nljm}^{(\kappa)} D_{m'm}^j \\ &+ \alpha_{nljm'}^{(\kappa')*} \beta_{nljm}^{(\kappa)} D_{m'-m}^j + \beta_{nljm'}^{(\kappa')*} \alpha_{nljm}^{(\kappa)} D_{-m'm}^j + \beta_{nljm'}^{(\kappa')*} \beta_{nljm}^{(\kappa)} D_{-m'-m}^j \}, \end{aligned} \quad (1.176)$$

gdzie współczynniki α oraz β wyrażają się przez:

$$\alpha_{nljm}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \beta_{nljm}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} i (-1)^{m+j} \quad (1.177)$$

$$\alpha_{nljm}^{(-)} = \frac{-1}{\sqrt{2}} i \quad ; \quad \beta_{nljm}^{(-)} = \frac{-1}{\sqrt{2}} (-1)^{m+j} \quad (1.178)$$

$$\alpha_{nljm}^{(+)*} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \beta_{nljm}^{(+)*} = \frac{1}{\sqrt{2}} i (-1)^{m+j+1} \quad (1.179)$$

$$\alpha_{nljm}^{(-)*} = \frac{1}{\sqrt{2}} i \quad ; \quad \beta_{nljm}^{(-)*} = \frac{-1}{\sqrt{2}} (-1)^{m+j}. \quad (1.180)$$

W ten sposób otrzymujemy wyrażenie końcowe w postaci:

$$\begin{aligned} yn(\mu) &= \frac{\dim[\mu]}{N(G)} \sum_{g \in G} \sum_{\kappa' \kappa} \sum_{nlj} \sum_{m' m = +\frac{1}{2}}^j \chi_G^{(\mu)*}(g) (-1)^{l(1-s)/2} \\ &\quad \left\{ c_{(+)nljm'}^* c_{(+)nljm} \{ \alpha_{nljm'}^{(+)*} \alpha_{nljm}^{(+)} D_{m'm}^j + \alpha_{nljm'}^{(+)*} \beta_{nljm}^{(+)} D_{m'-m}^j \right. \\ &\quad + \beta_{nljm'}^{(+)*} \alpha_{nljm}^{(+)} D_{-m'm}^j + \beta_{nljm'}^{(+)*} \beta_{nljm}^{(+)} D_{-m'-m}^j \} \\ &\quad + c_{(+)nljm'}^* c_{(-)nljm} \{ \alpha_{nljm'}^{(+)*} \alpha_{nljm}^{(-)} D_{m'm}^j + \alpha_{nljm'}^{(+)*} \beta_{nljm}^{(-)} D_{m'-m}^j \\ &\quad + \beta_{nljm'}^{(+)*} \alpha_{nljm}^{(-)} D_{-m'm}^j + \beta_{nljm'}^{(+)*} \beta_{nljm}^{(-)} D_{-m'-m}^j \} \\ &\quad + c_{(-)nljm'}^* c_{(+)nljm} \{ \alpha_{nljm'}^{(-)*} \alpha_{nljm}^{(+)} D_{m'm}^j + \alpha_{nljm'}^{(-)*} \beta_{nljm}^{(+)} D_{m'-m}^j \\ &\quad + \beta_{nljm'}^{(-)*} \alpha_{nljm}^{(+)} D_{-m'm}^j + \beta_{nljm'}^{(-)*} \beta_{nljm}^{(+)} D_{-m'-m}^j \} \\ &\quad + c_{(-)nljm'}^* c_{(-)nljm} \{ \alpha_{nljm'}^{(-)*} \alpha_{nljm}^{(-)} D_{m'm}^j + \alpha_{nljm'}^{(-)*} \beta_{nljm}^{(-)} D_{m'-m}^j \\ &\quad + \beta_{nljm'}^{(-)*} \alpha_{nljm}^{(-)} D_{-m'm}^j + \beta_{nljm'}^{(-)*} \beta_{nljm}^{(-)} D_{-m'-m}^j \} \left. \right\}, \quad (1.181) \end{aligned}$$

która jest obliczana numerycznie.

Można pokazać, że funkcja 1.181 zmienia się w granicach od 0 (brak symetrii) do 1 (pełna symetria funkcji falowej stanów jednocząstkowych). Posłuży ona do testowania poziomów jednocząstkowych, gdyż każdemu poziomowi można przypisać jakąś wartość funkcji 1.181. Poziomy pochodzące ze stanów zmieszanych, będą miały wartości ułamkowe, pomiędzy 0 i 1.

Można zatem powiedzieć, że $yn(\mu)$ pokazuje jak czysty jest dany stan. Oczywiście oczekujemy, że jeśli obliczymy poziomy jednocząstkowe dla deformacji odpowiadającej danym symetriom punktowym, np. tetrahedralnej lub oktahedralnej, to każdy z tych poziomów będzie można przypisać do jednej z reprezentacji nieredukowalnej danej grupy; widać więc, że reprezentacje nieredukowalne wprowadzają możliwość etykietowania stanów (spełniają rolę nowych liczb kwantowych związanych z symetriami).

1.4 Kolektywna rotacja jądrowa

W niniejszym podrozdziale omówiona zostanie struktura macierzowa hamiltonianu pola średniego oraz związanych z nim członów 'kranking' w terminach bazy stanów oscylatora używanych w tej pracy.

1.4.1 Opis rotacji w przybliżeniu “kranking”

Weryfikacja eksperymentalna istnienia symetrii geometrycznych może być ułatwiona przez wprowadzenie opisu kolektywnej rotacji systemów jądrowych. Symetrie tetrahedralna i oktahedralna, są związane głównie z własnościami jądra w stanach niezbyt odległych od stanu podstawowego (ponieważ przy wysokich spinach wyróżniony kierunek (spinu) łamać będzie wysoką symetrię początkową takiego systemu) należy więc oczekiwać, że w celu ich weryfikacji potrzebne będzie zbadanie kilku najniższych stanów wzbudzonych w pasmach rotacyjnych. Oznacza to, że należy zastosować metodę pola średniego z rotacją kolektywną. W tym podrozdziale przedstawionych zostanie pokrótce kilka szczegółów metody ‘kranking’.

Zapiszmy raz jeszcze całkowity hamiltonian układu nierotującego jako:

$$\hat{H}^\omega = \hat{H}_{WS}^\omega + \hat{H}_{pair}, \quad (1.182)$$

gdzie zdeformowany, jednocząstkowy hamiltonian Woods-Saxona \hat{H}_{WS}^ω jest wyrażony w bazie zdeformowanego oscylatora harmonicznego. Niech p będzie liczbą stanów bazowych tego oscylatora poniżej granicy obcięcia bazy (cut off). Zakładamy teraz, że p uwzględnia już tylko ilość poziomów w oknie pairingowym (obszar poziomów jednocząstkowych w okolicy poziomu Fermiego), a więc w naszym przypadku będzie wynosiło nie więcej niż N (dla neutronów) lub Z (dla protonów).

Rozpatrzmy obrót układu wokół osi O_x . Hamiltonian reprezentujący energię protonów albo neutronów w rotującym układzie współrzędnych (rotian) w przybliżeniu kranking, przyjmuje postać:

$$\hat{H}_{WS}^\omega = \hat{H}_{WS} - \omega \hat{j}_x - \lambda_F \hat{N} = \sum_{\alpha\beta}^p (e_{\alpha\beta} - \omega j_{x;\alpha\beta} - \lambda_F \delta_{\alpha\beta}) c_\alpha^\dagger c_\beta. \quad (1.183)$$

Operatory $c_\alpha^\dagger, c_\beta$ są to operatory kreacji i anihilacji cząstek i spełniają warunki antykomutacyjne:

$$\{c_\alpha, c_\beta\} = 0, \quad \{c_\alpha^\dagger, c_\beta^\dagger\} = 0, \quad \{c_\alpha, c_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.184)$$

Człon $\lambda_F \hat{N}$ zapewnia, na średnio, zachowanie liczby cząstek, gdyż w ogólności funkcje falowe będące rozwiązaniami diskutowanego problemu, $|\Psi\rangle$, traktowane w przybliżeniu pairing, nie będą funkcjami własnymi operatora liczby cząstek $\hat{N} = \sum_{\nu=1}^p c_\nu^\dagger c_\nu$.

Skoncentrujmy się na elementach macierzowych operatorów momentów pędu stanów jednocząstkowych wygenerowanych potencjałem Woods-Saxona. Przypomnijmy, że operator całkowitego momentu pędu $j_{x;\alpha\beta}$ definiujący człon kranking w rotującym hamiltonianie efektywnym jest złożeniem orbitalnego momentu pędu i spinu cząstki (wzory 1.185, 1.186, 1.187)

$$\hat{j}_x = \hat{l}_x + \hat{s}_x \quad ; \quad \hat{l}_x = i\hbar(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}); \quad (1.185)$$

$$\hat{j}_y = \hat{l}_y + \hat{s}_y \quad ; \quad \hat{l}_y = i\hbar(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}); \quad (1.186)$$

$$\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z \quad ; \quad \hat{l}_z = i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}). \quad (1.187)$$

Można wyliczyć, że w bazie funkcji b, \bar{b} (wprowadzonej i dyskutowanej w szczegółach w Dodatku C), całkowity moment pędu spełnia zależności:

$$\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle \sim \delta_{n'_x n_x}, \quad (1.188)$$

$$\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle \sim \delta_{n'_y n_y}, \quad (1.189)$$

$$\langle b' | \hat{j}_z | \bar{b} \rangle \sim \delta_{n'_z n_z}. \quad (1.190)$$

Jeśli skorzystamy z definicji

$$|b\rangle = i^{n_y} |n_x, n_y, n_z; s_z\rangle \quad (1.191)$$

oraz ze wzorów (1.185, 1.186, 1.187), to okaże się, że $\langle b' | \hat{l}_x | b \rangle$ i $\langle b' | \hat{l}_z | b \rangle$ są rzeczywiste podczas gdy $\langle b' | \hat{l}_y | b \rangle$ jest urojone, co pozwala zatem zapisać:

$$\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle = \text{rzeczywiste} \quad (1.192)$$

$$\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle = \text{urojone} \quad (1.193)$$

$$\langle b' | \hat{j}_z | b \rangle = \text{rzeczywiste}. \quad (1.194)$$

Można pokazać, że reprezentacja hamiltonianu (wz. 1.183) w zbiorze $\{|b\rangle, |\bar{b}\rangle\}$ jest rzeczywista, więc w postaci macierzowej hamiltonianu z rotacją kolektywną dla obrotu względem osi dostajemy:

X - macierz rzeczywistą o wymiarach $(2n \times 2n)$;

Y - macierz urojoną o wymiarach $(2n \times 2n)$;

Z - macierz rzeczywistą o wymiarach $(2n \times 2n)$.

Własności odwrócenia czasu operatora całkowitego momentu pędu (operator *time-odd*) są przeciwne własnościom dla hamiltonianu \hat{H}_{WS} :

$$\hat{T} \hat{H}_{WS} \hat{T}^{-1} = H_{WS} \quad ; \quad \hat{T} \hat{j} \hat{T}^{-1} = -\hat{j} \quad (1.195)$$

Oznaczając stany odwrócone w czasie przy pomocy symbolu 'bar':

$$\hat{T} |b\rangle = |\bar{b}\rangle \quad (1.196)$$

otrzymamy

$$\langle \bar{b}' | \hat{H}_{WS} | \bar{b} \rangle = \langle b' | \hat{H}_{WS} | b \rangle^* \quad (1.197)$$

$$\langle \bar{b}' | \hat{j} | \bar{b} \rangle = -\langle b' | \hat{j} | b \rangle^* \quad (1.198)$$

oraz

$$\langle b' | \hat{H}_{WS} | \bar{b} \rangle = -\langle \bar{b}' | \hat{H}_{WS} | b \rangle^* \quad (1.199)$$

$$\langle b' | \hat{j} | \bar{b} \rangle = \langle \bar{b}' | \hat{j} | b \rangle^* \quad (1.200)$$

Kilka słów na temat symetrii członów 'kranking' znajduje się w Dodatku D, a tutaj przypomnijmy tylko postać macierzową hamiltonianu w przypadku obrotu wokół osi OX (analogicznie będzie wyglądała macierz hamiltonianu dla obrotu wokół osi OZ) w bazie $|t\rangle$

(przypomnijmy: Jest to baza z konwencją faz dobraną tak, że mamy $\hat{T}|t_{\pm}\rangle = \pm|t_{\pm}\rangle$):

$$\begin{aligned}
H_x^\omega &= H - \omega_x j_x = \begin{bmatrix} \langle t'_+ | \hat{H}_x^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_+ | \hat{H}_x^\omega | t_- \rangle \\ \langle t'_- | \hat{H}_x^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_- | \hat{H}_x^\omega | t_- \rangle \end{bmatrix} \\
&= \left[\begin{array}{c|c} \text{Re}(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) + i\text{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) & \omega_x \text{Re}(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) + i\text{Re}(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) \\ \hline \omega_x \text{Re}(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) - i\text{Re}(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) & \text{Re}(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) - i\text{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) \end{array} \right] \quad (1.201)
\end{aligned}$$

Mamy więc w postaci skróconej:

$$H_x^\omega = H - \omega_x j_x = \begin{bmatrix} H & J \\ J^* & H^* \end{bmatrix}; \quad (1.202)$$

$$H_z^\omega = H - \omega_z j_z = \begin{bmatrix} H & J \\ J^* & H^* \end{bmatrix}. \quad (1.203)$$

Obrót wokół osi OY jest obrotem specyficznym w tym sensie, że pozwala na redukcję rozmiarów macierzy danego hamiltonianu poprzez usunięcie bloków niediagonalnych w terminach elementów $\langle t_- | O | t_+ \rangle$ i sprzężonych. Postać macierzowa hamiltonianu ‘kranking’ w przypadku obrotu wokół osi OY to:

$$\begin{aligned}
H_y^\omega &= H - \omega_y j_y = \begin{bmatrix} \langle t'_+ | \hat{H}_y^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_+ | \hat{H}_y^\omega | t_- \rangle \\ \langle t'_- | \hat{H}_y^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_- | \hat{H}_y^\omega | t_- \rangle \end{bmatrix} \\
&= \left[\begin{array}{c|c} \text{Re}(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) + i\text{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) & 0 \\ +\omega_y \text{Im}(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) - i\omega_y \text{Im}(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle) & 0 \\ \hline 0 & \text{Re}(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) - i\text{Re}(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) \\ & -\omega_y \text{Im}(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) + i\omega_y \text{Im}(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle) \end{array} \right]. \quad (1.204)
\end{aligned}$$

Stąd wynika, że konwencja faz zdefiniowana przy przejściu od bazy $|b\rangle$ do bazy $|t\rangle$ przy obrocie wokół osi OY, redukuje macierz zespoloną wchodzącą do diagonalizacji o wymiarach $2n \times 2n$ do dwóch macierzy zespolonych $n \times n$. Mamy więc postać:

$$H_y^\omega = H - \omega_y j_y = \begin{bmatrix} H + J & 0 \\ 0 & H^* + J^* \end{bmatrix}. \quad (1.205)$$

W następnym podrozdziale zostanie uwzględniony wpływ pairingu na rotację kolektywną.

1.4.2 Transformacja Bogolyubova i uwzględnienie pairingu

Przedstawiony model jest szeroko opisywany a głównym materiałem źródłowym tutaj użytym była praca [Voi83], dotycząca opisu zjawisk wysokospinowych w jądrach atomowych.

Przytoczone zostanie tylko kilka kluczowych wzorów, które pozwalają na zapisanie hamiltonianu pola średniego z rotacją i oddziaływaniem pairing. Ponieważ zwykle formalizm (metoda potocznie nazywana Hartree-Fock-Bogolyubov Cranking - HFBC) jest znany w metodach samozgodnych pola średniego, to oznaczenia tutaj przedstawione można uznać za uniwersalne.

Resztkowe oddziaływania dwuciałowe pairing uwzględnione są za sprawą sił monopole - pairing [Voi83]:

$$\hat{H}_{pair} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta}^p v_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma}, \quad (1.206)$$

gdzie oddziaływanie dwuciałowe, zakładając, że cząstki są identyczne, oddziaływanie monopole - pairing jest definiowane wzorem:

$$v_{\alpha\beta\gamma\delta} = -\frac{G}{4} \delta_{\alpha\bar{\beta}} \delta_{\gamma\bar{\delta}} \text{sgn}(\alpha) \text{sgn}(\gamma) \quad (1.207)$$

gdzie:

$$\text{sgn}(\bar{\alpha}) = -1; \quad \text{sgn}(\alpha) = 1; \quad |\bar{\alpha}\rangle = T|\alpha\rangle. \quad (1.208)$$

Hamiltonian pairing przyjmuje postać:

$$\hat{H}_{pair} = -\frac{G}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta}^p \delta_{\alpha\bar{\beta}} \delta_{\gamma\bar{\delta}} \text{sgn}(\alpha) \text{sgn}(\gamma) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} = -G\hat{P}^+ \hat{P} \quad (1.209)$$

gdzie operatory kreacji i anihilacji par cząstek można zapisać:

$$\hat{P}^+ = \sum_{\alpha>0} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\bar{\alpha}}^{\dagger} \quad ; \quad \hat{P} = \sum_{\alpha>0} c_{\bar{\alpha}} c_{\alpha}. \quad (1.210)$$

Symbole greckie oznaczają bazę fermionową, jednocząstkową przy częstości obrotu $\omega = 0$. Transformacja Bogolyubova pozwala przejść do obrazu kwazicząstek, oznaczonych symbolami łacińskimi.

Operatory kreacji i anihilacji kwazicząstek $\alpha_i, \alpha_i^{\dagger}$ (a więc i postać transformacji Bogolyubowa) można zapisać w postaci rozwinięcia:

$$\alpha_i^{\dagger} = \sum_{\nu} (A_{\nu}^i c_{\nu}^{\dagger} + B_{\nu}^i c_{\nu}); \quad (1.211)$$

$$\alpha_i = \sum_{\nu} (B_{\nu}^{i*} c_{\nu}^{\dagger} + A_{\nu}^{i*} c_{\nu}); \quad (1.212)$$

co w zapisie macierzowym wygląda następująco:

$$\begin{pmatrix} \alpha^{\dagger} \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^T & B^T \\ B^{\dagger} & A^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c^{\dagger} \\ c \end{pmatrix}, \quad (1.213)$$

Operatory $\alpha_i, \alpha_i^{\dagger}$ spełniają relacje antykomutacji.

$$\{\alpha_i^{\dagger}, \alpha_j\} = \delta_{ij}, \quad \{\alpha_i, \alpha_j\} = 0, \quad \{\alpha_i^{\dagger}, \alpha_j^{\dagger}\} = 0, \quad (1.214)$$

co implikuje ‘uogólnione relacje ortogonalności’:

$$\sum_{\nu} (A_{\nu}^{i*} A_{\nu}^j + B_{\nu}^{i*} B_{\nu}^j) = \delta_{ij} \quad (1.215)$$

$$\sum_{\nu} (A_{\nu}^i A_{\nu}^j + B_{\nu}^{i*} B_{\nu}^j) = 0. \quad (1.216)$$

Odwrotna transformacja Bogoliubova to wyraża się następująco:

$$c_{\nu}^{\dagger} = \sum_i (A_{\nu}^{i*} \alpha_i^{\dagger} + B_{\nu}^i \alpha_i); \quad (1.217)$$

$$c_{\nu} = \sum_i (B_{\nu}^{i*} \alpha_i^{\dagger} + A_{\nu}^i \alpha_i); \quad (1.218)$$

a w przedstawieniu macierzowym można ją zapisać jako:

$$\begin{pmatrix} c^{\dagger} \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & B \\ B^* & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{\dagger} \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad (1.219)$$

Możemy zdefiniować nową macierz Z unitarną ($Z^{\dagger} = 1$):

$$Z = \begin{pmatrix} A^T & B^T \\ B^{\dagger} & A^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (1.220)$$

Ta macierz będzie miała wymiary dwa razy większe niż wymiar wektora $c_i^{\dagger}, i = 1, 2, \dots, p$.

W celu zapisania hamiltonianu pola średniego w metodzie Hatree-Focka-Bogolyubova z ‘krankowaniem’ (HFBC), gdy $\omega \neq 0$, transformujemy hamiltonian (1.182) do reprezentacji kwazicząstkowej. Możemy teraz rozłożyć powstały hamiltonian na człony nie zawierające operatorów $\alpha, \alpha^{\dagger} \rightarrow H_0$ - odpowiada to stanowi próżni kwazicząstek, zawierające 1 parę $\alpha^{\dagger} \alpha \rightarrow H_{11}$, pary $\alpha^{\dagger} \alpha^{\dagger}, \alpha \alpha \rightarrow H_{20}$ oraz wszystkie możliwe kombinacje: $\alpha \alpha \alpha^{\dagger} \alpha^{\dagger}, \alpha \alpha \alpha \alpha^{\dagger}, \alpha \alpha \alpha \alpha \rightarrow H_4$

$$H^{\omega} = H_0 + H_{11} + H_{20} + H_4, \quad (1.221)$$

przy czym można pokazać [Voi83], że:

$$H_0 = \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (\Gamma_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} + \Delta_{\alpha\beta} \chi_{\alpha\beta}); \quad (1.222)$$

$$H_{11} = \sum_{ij, \alpha\beta} [\nu_{\alpha\beta} (A_{\alpha}^{i*} A_{\beta}^j - B_{\alpha}^j B_{\beta}^{i*}) + \Delta_{\alpha\beta} A_{\alpha}^{i*} B_{\beta}^{j*} + \Delta_{\alpha\beta}^* B_{\alpha}^{i*} A_{\beta}^j] \alpha_i^{\dagger} \alpha_j; \quad (1.223)$$

$$H_{20} = \sum_{ij, \alpha\beta} [\nu_{\alpha\beta} A_{\alpha}^{i*} B_{\beta}^{j*} + \frac{1}{2} \Delta_{\alpha\beta} A_{\alpha}^{i*} A_{\beta}^{j*} + \frac{1}{2} \Delta_{\alpha\beta}^* B_{\beta}^{i*} B_{\alpha}^j] \alpha_i^{\dagger} \alpha_j^{\dagger} + h.c. \quad (1.224)$$

Często wprowadza się notację używającą tzw. macierzy gęstości $\rho_{\alpha\beta}$ i gęstości par $\chi_{\alpha\beta}$:

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_i B_{\alpha}^i B_{\beta}^{i*}; \quad (\rho_{\alpha\beta} = \rho_{\beta\alpha}^*); \quad (1.225)$$

$$\chi_{\alpha\beta} = \sum_i A_{\beta}^i B_{\alpha}^{i*}; \quad (\chi_{\alpha\beta} = -\chi_{\beta\alpha}^*), \quad (1.226)$$

Wygodne jest również wprowadzenie oznaczenia skrótowego

$$\Delta_{\alpha\beta} = 2 \sum_{\gamma\delta} \nu_{\alpha\beta\gamma\delta} \chi_{\gamma\delta} \quad (1.227)$$

jak również następujących:

$$\Gamma_{\alpha\gamma} = 4 \sum_{\beta\delta} \nu_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\beta\delta}; \quad (1.228)$$

$$\nu_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta} + \Gamma_{\alpha\beta}; \quad (1.229)$$

$$\epsilon_{\alpha\beta} = e_{\alpha\beta} - \lambda \delta_{\alpha\beta} - \omega j_{y\alpha\beta}. \quad (1.230)$$

Zgodnie z założeniami metody HFB, wymagamy by:

$$H_{20} = 0; \quad H_{11} = \sum_i E_i^\omega \alpha_i^* \alpha_i \quad (1.231)$$

i otrzymujemy układ równań nieliniowych ze względu na A i B , zwanych równaniami HFBC:

$$\sum_{\beta} (\nu_{\alpha\beta} A_{\beta}^i + \Delta_{\alpha\beta} B_{\beta}^i) = E_i^\omega A_{\alpha}^i; \quad (1.232)$$

$$\sum_{\beta} (\nu_{\alpha\beta}^* B_{\beta}^i + \Delta_{\alpha\beta}^* A_{\beta}^i) = -E_i^\omega B_{\alpha}^i. \quad (1.233)$$

W przypadku sił monopole-pairing mamy

$$\begin{aligned} \Delta_{\alpha\beta} &= -2G \sum_{\gamma\delta} \delta_{\alpha\bar{\beta}} \delta_{\gamma\bar{\delta}} \operatorname{sgn}(\alpha) \operatorname{sgn}(\gamma) \chi_{\gamma\delta} \\ &= -\frac{2G}{4} \delta_{\alpha\bar{\beta}} \operatorname{sgn}(\alpha) \sum_{\gamma} \operatorname{sgn}(\gamma) \chi_{\gamma\bar{\gamma}} \\ &= -\frac{1}{2} \delta_{\alpha\bar{\beta}} \operatorname{sgn}(\alpha) \Delta, \end{aligned} \quad (1.234)$$

gdzie $\Delta = G \sum_{\alpha>0} \chi_{\alpha\bar{\alpha}}$ - to definicja wielkości Δ czyli przerwy energetycznej. Tych kilka wyprowadzeń pokazuje jedynie złożoność problemu jakim jest opis kwantowy rotacji jądra. zostanie on użyty w dalszej części pracy do otrzymania kinetycznych i dynamicznych momentów pędów jądra o danym kształcie co może być porównane z danymi doświadczalnymi dotyczącymi widm energetycznych.

Dyskusja teoretycznego opisu niskoenergetycznych stanów wzbudzonych kończy rozdział dotyczący metod użytych w tej monografii ale kilka szczegółów związanych z fenomenologiczną metodą Termicznych Fluktuacji Kształtów, używaną do opisu funkcji nasilenia Gigantycznego Rezonansu Dipolowego czy też prymitywny opis wibracji kwadrupolowych i oktopolowych przy pomocy hamiltonianu kolektywnego, będą przedstawione w Rozdziałach 3 i 4.

Rozdział 2

Symetrie geometryczne a stabilność jąder atomowych

Symetrie geometryczne jądra atomowego dotyczą przestrzennych własności powierzchni jądrowej opisującej dany system i można je utożsamić z symetrami kształtu jądra, przy czym nie będzie tutaj dyskutowany wpływ deformacji na symetrie parzystości, sygnatury czy simplexu.

Specyfika obliczeń w wielowymiarowych przestrzeniach deformacji wymaga dokładnego przeanalizowania, które stopnie swobody są ważne i wnoszą nową jakość do badań.

Przykłady powierzchni energii potencjalnej liczonych przy pomocy metody makroskopowo-mikroskopowej z użyciem modelu Yukawa-plus-exponential dla kształtów osiowych były przedstawione na przykład w pracach [Cwi92] i [Smo93] a dla nieosiowych parametrów deformacji heksadekapolowej w artykule [Ghe99]. Natomiast badania z użyciem nowszego modelu kropłowego w realizacji ‘Lublin-Strasbourg Drop’ (LSD), były także dyskutowane w szeregu artykułów. W artykule [I] skupiono się głównie na porównaniu energii otrzymanej na ścieżce do rozszczepienia przy minimalizacji po parzystych osiowych parametrach deformacji i nieosiowej kwadrupolowej deformacji (α_{20} , α_{22} , α_{40}) w stosunku do energii obliczonych z dodatkową minimalizacją po nieosiowych heksadekapolowych parametrach: (α_{42} , α_{44}). Pokazano, że ścieżka do rozszczepienia jest różna w obu przypadkach i energie całkowite wzdłuż tej ścieżki też mają różny kształt. Dodanie nieosiowych parametrów deformacji kwadrupolowej zmienia tylko głębokość drugiego minimum o około 0.5 MeV. Taki test daje wskazówkę, że przy planowaniu obliczeń na dużą skalę, nieosiowości dają często efekty drugorzędne, chyba że okaże się, iż sam stan podstawowy jest niestabilny na efekty kształtów trójosiowych.

Scenariusz, o którym mowa jest oczekiwany dla jąder podwójnie magicznych w sensie symetrii tetrahedralnej, gdzie liczby protonów i neutronów są liczbami magicznymi wynikającymi z zaistnienia minimów o dyskutowanej symetrii (np.: [VIII]). Takie badania przeprowadzone dla szeregu izotopów Fm, No i Rf [II] z uwzględnieniem wyższych multipoli, pokazały, że sprzężenie nieosiowości kwadrupolowej i heksadekapolowej może obniżyć także barierę na rozszczepienie otrzymaną bez uwzględniania nieosiowości. Co więcej wyniki otrzymane z metody makroskopowo-mikroskopowej zgadzają się, co do deformacji stanu podstawowego i jego energii a także pozycji bariery na rozszczepienie, z obliczeniami HFB z siłami Gogny co było pokazane w [Dud05] dla izotopów U, Cf i Fm poprzez porównanie energii całkowitej w funkcji momentu kwadrupolowego Q_2 .

Ponieważ ciekawe efekty są spodziewane dla deformacji tetrahedralnych, czyli α_{32} , sprawdzano także [Dud04, Sch04], jakie zakresy tego parametru należy użyć do obliczeń

i jakich wyników można oczekiwać. Wcześniejsze prace takie jak: [Naz84, Sob88, Ska91] koncentrowały się głównie na dyskusji efektów powstałych na skutek wprowadzenia osiowej deformacji oktopolowej do obliczeń a w artykule [Ska92] uwzględniono nałożenie deformacji nieosiowej kwadrupolowej γ na kształty oktopolowe dla szeregu izotopów między innymi: Ba, Ra i Th. Podkreślono tam duże znaczenie uwzględnienia w obliczeniach zawierających deformacje oktopolowe, a także kwadrupolowego parametru trójosiowego γ .

Badania dotyczące wpływu nieosiowej deformacji kwadrupolowej na powierzchnie energii całkowitej dla jąder z okolic Th, pokazano w [I]. Mapy energii zrzutowanej na płaszczyznę deformacji kwadrupolowych (β, γ) skonfrontowano z mapami energii zrzutowanej na płaszczyznę deformacji oktopolowych $(\alpha_{30}, \alpha_{32})$. Dla szeregu jąder z obszaru aktynowców można zaobserwować istnienie minimów tetrahedralnych, które obniżają energię jądra nawet o 2.5 MeV, przy założeniu, że pozostałe deformacje są zerowe. Nie jest to efekt występujący zawsze ale tylko dla specyficznych zestawów liczb protonów i neutronów, zwanych dalej *tetrahedralnymi liczbami magicznymi*. Występowanie liczb magicznych, wiąże się ze strukturą mikroskopową jądra a jego dyskusja opiera się o ewolucję poziomów jednocząstkowych w funkcji wybranej deformacji. Tak jak to pokazano w [IV] dla poziomów jednocząstkowych policzonych z potencjałem Woodsa-Saxona w funkcji deformacji tetrahedralnej, widoczne są duże przerwy energetyczne dla kwadrupolowych liczb magicznych ($Z=82$ i $N=126$) ale pojawiają się też przerwy o podobnej wielkości dla $Z=90$ i $N=136$ dla deformacji tetrahedralnych niezerowych, co może być znakiem istnienia liczb magicznych tetrahedralnych. Wyniki obliczeń w regionie $82 < Z < 100$ pozwalają jakościowo wnioskować, że dla ustalonej liczby protonów i wzrastającej liczby neutronów efekt symetrii tetrahedralnej wzrasta a relatywna głębokość minimów energetycznych obniża się o 5-6 MeV w porównaniu z 3.5 MeV, gdy bierzemy pod uwagę symetrię oktahedralną. Spowodowane jest to wzrostem gęstości poziomów jednocząstkowych dla kształtów sferycznych, w porównaniu z gęstością poziomów dla kształtów tetrahedralnych.

Należy podkreślić jednak, że w większości jąder, stan podstawowy jest zdeformowany kwadrupolowo, natomiast można się spodziewać tetrahedralnych lokalnych minimów energetycznych, które mogą być podstawą rotacyjnych pasm tetrahedralnych. Badanie wpływu symetrii geometrycznych a w szczególności symetrii tetrahedralnych i oktahedralnych na powierzchnie energii potencjalnej a co za tym idzie na własności jąder statycznych bądź wolno rotujących, składało się z kilku etapów, które będą po kolei omówione w tym rozdziale.

Stabilność jądra ze względu na pewne symetrie geometryczne, może zależeć od własności reprezentacji nieredukowalnych grupy punktowej, względem której kształt jest niezmienny a w szczególności od liczby reprezentacji i ich wymiarów [Dud07, VIII]. Należy przypomnieć, że poziomy jednocząstkowe należące do danej reprezentacji nieredukowalnej nigdy się nie przetną w funkcji deformacji zachowującej tę symetrię- tzw. reguła Landau-Zener'a nieprzecinania się poziomów (*non crossing rules*) - i wypełniają studnię potencjału. Oznacza to, że im większa liczba reprezentacji nieredukowalnych tym mniejsza gęstość poziomów związanych z daną reprezentacją i w konsekwencji większe w średniej odległości poziomów jednocząstkowych w danej reprezentacji. Dyskusja zależności średnich odległości poziomów dla grup symetrii T_d^D i C_{2v}^D [Dud02] a także dla grup tetrahedralnych i oktahedralnych [Dud03a, Sch04] pozwoliła na uogólnienie zapisu liczb kwantowych, gdyż każda grupa punktowa ma generować swoje własne liczby magiczne w analogii do liczb magicznych charakteryzujących symetrię sferyczną: $Z, N=8, 20, 28, 50, 82$ i 126 . Obliczenia mikroskopowe bazujące na realistycznych potencjałach pola średniego z symetrią tetrahe-

dralną dają liczby magiczne [Dud02] $Z, N=16, 20, 32, 40, 56-58, 64, 70, 90-94, 112$ oraz $N=136$ i 142 . Inne symetrie mogą generować inne zbiory liczb magicznych.

Pomiędzy wszystkimi grupami punktowymi z dużą liczbą reprezentacji nieredukowalnych, dwie są szczególnie ciekawe: tetrahedralna T_d^D i oktahedralna O_h^D , gdyż każda zawiera czterowymiarowe reprezentacje nieredukowalne, co efektywnie powinno zwiększyć lokalne odległości międzypoziomowe, czyli w pewnych okolicznościach stworzyć nowe przerwy energetyczne. W przypadku symetrii tetrahedralnej każdy poziom jednocząstkowy należy do jednej z trzech nieredukowalnych reprezentacji: dwóch dwuwymiarowych i jednej - czterowymiarowej. Pole średnie w deformacji tetrahedralnej nie zachowuje parzystości w przeciwieństwie do pola średniego o symetrii oktahedralnej, gdzie stany o parzystości ujemnej mogą koegzystować ze stanami o parzystości dodatniej. Ponadto każda z parzystości może należeć do jednej z trzech reprezentacji nieredukowalnych: dwóch - dwuwymiarowych i jednej - czterowymiarowej.

Poniżej, w pierwszym etapie przedstawione zostaną poziomy jednocząstkowe dla szeregu jąder w funkcji deformacji oktopolowych wraz z mapami energii całkowitej dla jąder, gdzie obserwowane są duże przerwy energetyczne w widmach poziomów. Następnie przedstawione będą wyniki analizy gęstości poziomów jednocząstkowych z uwzględnieniem przynależności do różnych reprezentacji grup punktowych. Gęstości poziomów są elementem metody wyznaczania energii powłokowych, tak więc przedstawione są mapy energii rozłożonych na poszczególne składowe takie jak: energia powłokowa dla protonów i neutronów, energia korelacji pairing dla protonów i neutronów w funkcji parametrów deformacji oktopolowych. Po minimalizacji tych energii mikroskopowych można było przedstawić wyspy stabilności, czyli zweryfikować w jakich obszarach jąder efekty pochodzące od symetrii tetrahedralnych i oktahedralnych są widoczne, a także gdzie minima energetyczne są czułe na te deformacje.

Policzona została także energia całkowita dla wszystkich badanych jąder a kilka szczególnie ciekawych przypadków zostanie przedyskutowanych w nawiązaniu do eksperymentalnych wyników dotyczących współistnienia kształtów.

Jako zakończenie tej części dyskusji zostaną pokazane badania niskoenergetycznych stanów wzbudzonych przy pomocy metody *kranking* w celu interpretacji pasm rotacyjnych o ujemnej parzystości jako pasm tetrahedralnych.

2.1 Efekty powłokowe a stabilność jąder

Obliczenia dla obszar jąder superciężkich były wykonywane wielokrotnie różnymi metodami, a wszystko po to, by oszacować czy występuje wyspa stabilności, gdzie eksperymentalnie można wyprodukować takie jądra mimo, że wzdłuż ścieżki stabilności istnieje obszar, gdzie jądra mają zbyt krótkie czasy życia by można je było zaobserwować. W artykułach [Mye66] i [Mol86] stwierdzono, że stabilność tych jąder w dużej mierze zależy od energii mikroskopowych w stanie podstawowym, bo to one mają główny wpływ na wysokość bariery na rozszczepienie, gdyż energia makroskopowa w tym obszarze nie buduje żadnej bariery. W latach 90-tych poprzedniego wieku np. w artykule [Sob88] badano wpływ różnych osiowych deformacji na energię całkowitą aktynowców. Stwierdzono, że dla fermów ($Z=100$) deformacja β_6 może obniżać energię całkowitą o około 1 MeV podczas gdy dla hasu ($Z=108$) ta deformacja ma zanedbywalny wpływ. Dla torów i radonów, deformacje wyższe niż β_8 są także do zaniechania ale nieparzyste rzędy parametrów deformacji ($\beta_3, \beta_5, \beta_7$) są bardzo ważne dla lekkich aktynowców.

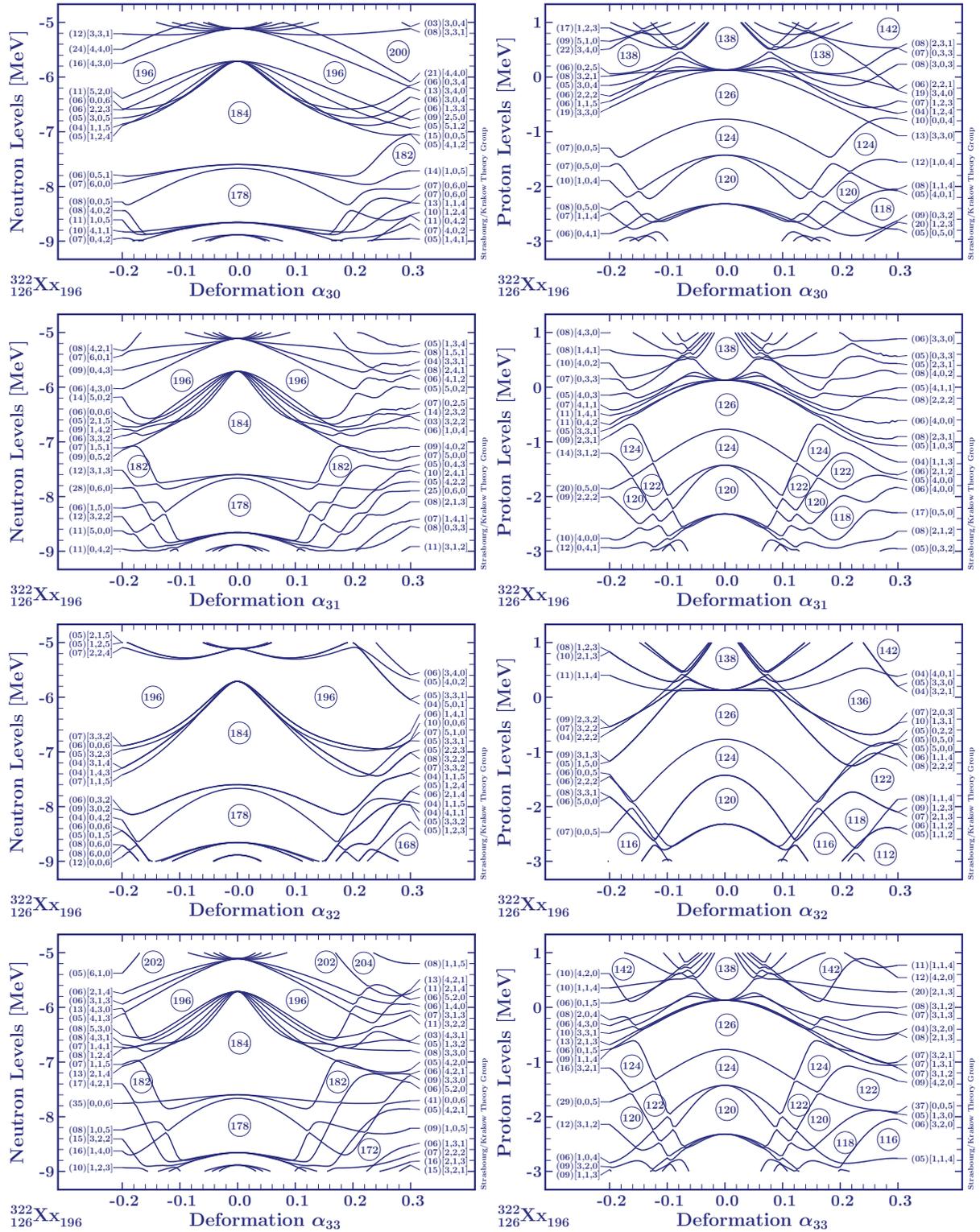
W tym podrozdziale skupimy się na zbadaniu wpływu deformacji oktopolowych – osiowych i nieosiowych, a następnie ograniczymy się tylko do deformacji tetrahedralnej, jako przypadku szczególnego oktopoli i deformacji oktahedralnej, jako dalszego kroku w poszukiwaniu stabilnych jąder o wysokich symetriach.

2.1.1 Niestabilność oktopolowa

Badanie efektów powłokowych należy zacząć od obliczenia poziomów jednocząstkowych, w tym przypadku z potencjału Woods-Saxona (nasza realizacja to parametryzacja COMPACT [Dub05a]) w funkcji deformacji, której wpływ badamy. Rysunki 2.1 pokazują jak zmieniają się poziomy jednocząstkowe w funkcji deformacji oktopolowej osiowej (α_{30}) i nieosiowych (α_{31} , α_{32} , α_{33}). Patrząc na poszczególne części rysunku 2.1, można sprawdzić, gdzie występują przerwy energetyczne i które deformacje są szczególnie preferowane.

Jeśli chodzi o poziomy jednocząstkowe dla protonów to, jak widać z ilustracji Rys. 2.1, sferyczne przerwy energetyczne dla $Z=126$ ale także niewiele mniejsze przerwy dla $Z=124$ i 120 i występują dla każdej deformacji. Podobnie jest z przerwami energetycznymi dla neutronów pojawiającymi się dla liczb $N=178$ i 184 . Z tego zestawienia poziomów jednocząstkowych w funkcji deformacji oktopolowych wynika, że bardzo ważną rolę odgrywa deformacja tetrahedralna. Poziomy neutronowe pokazują, że liczbą magiczną będzie $N=196$ gdyż przy niezerowej deformacji tetrahedralnej α_{32} przerwa energetyczna jest porównywalna z przerwą dla jądra klasycznie magicznego o $N=184$ i wynosi około 2 MeV. Dla poziomów protonowych, obserwuje się przerwę energetyczną dla $Z=136$ porównywalną z przerwą dla tradycyjnie magicznego jądra o $Z=126$.

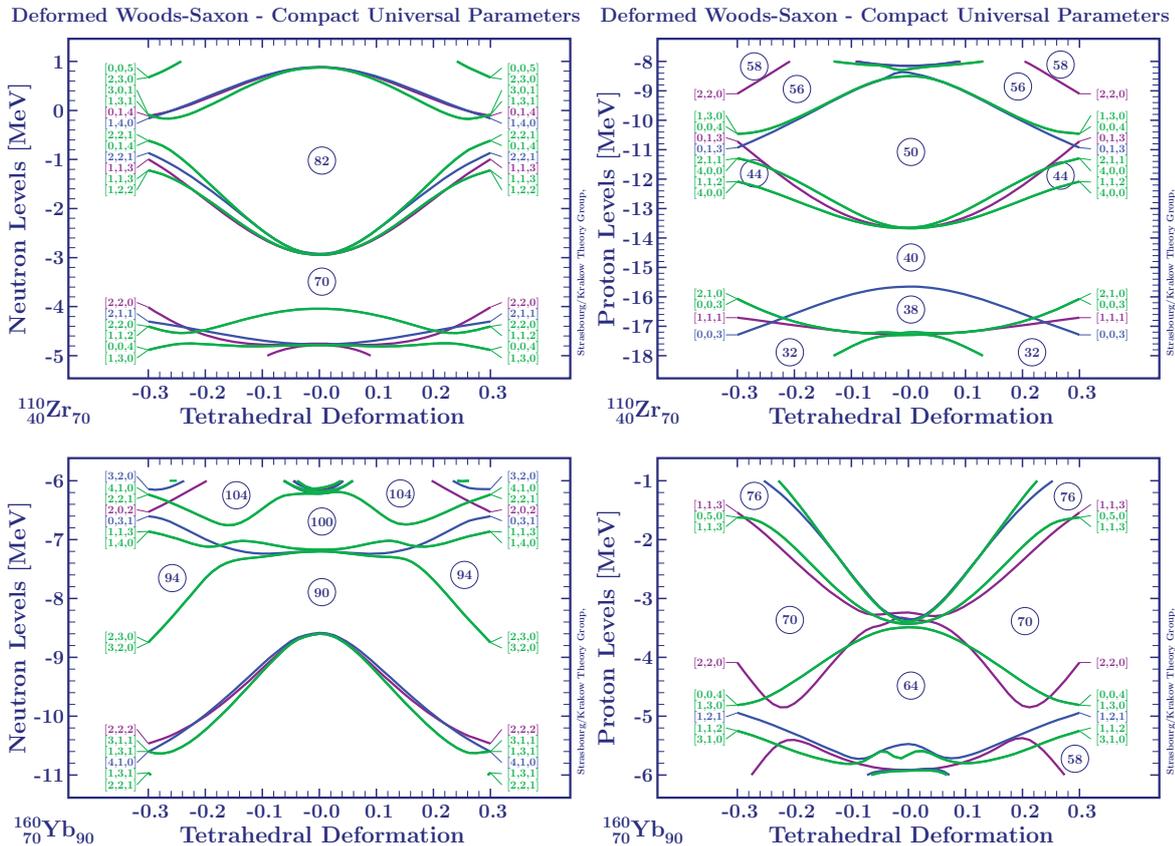
Duże przerwy energetyczne oznaczają, że związanie kolejnej pary nukleonów jest trudniejsze, przez co układ jest stabilniejszy. Zazwyczaj przyjmowano, że zdecydowanie najbardziej uprzywilejowanym i stabilnym kształtem dla jąder o podwójnie magicznych liczbach związanych z symetrią sferyczną powinna być sfera, gdyż tam są największe odległości między poziomami jednocząstkowymi, ale tę samą logikę można zastosować do obserwacji liczb magicznych związanych z symetriami grup punktowych, wyrażającymi się na przykład przez deformację tetrahedralną α_{32} . Nowe liczby magiczne indukowane poprzez przerwy energetyczne widoczne na diagramach poziomów jednocząstkowych dla $Z=136$ i $N=196$, mogą być znalezione dla innych obszarów masowych jąder [IX].



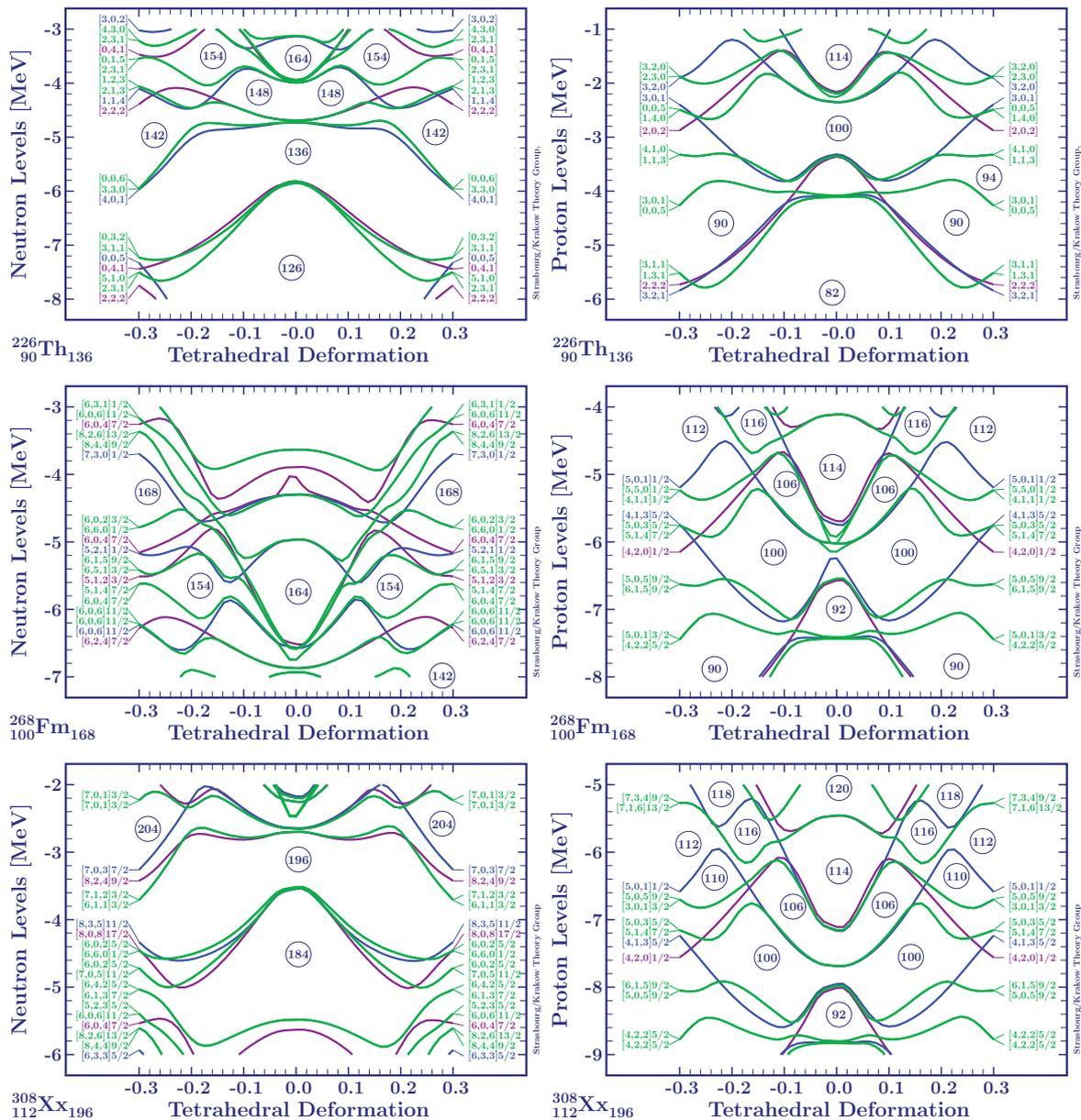
Rysunek 2.1: Poziomy jednocząstkowe protonowe i neutronowe w funkcji deformacji α_{30} , α_{31} , α_{32} i α_{33} dla jądra $Z=126$, $N=196$ przy założeniu, że wszelkie inne deformacje są równe zero. Taka ilustracja pokazuje wstępowanie (lub nie) szczególnie dużych przerw energetycznych w funkcji wzrastającej deformacji - przy ustalonej symetrii jądra.

2.1.2 Stabilność tetrahedralna

Podobne efekty, jakie otrzymano w przypadku superciężkiego jądra przy $Z=126$ oraz $N=196$, które być może długo jeszcze nie zostanie wyprodukowane, zaobserwowano w jądrach lżejszych takich jak $Z=40$ czy też $Z=70$. Z pary rysunków 2.2 (górze) dla $Z=40$, $N=70$ widać, że przerwa energetyczna dla neutronów w okolicy $N=70$ i dla protonów $Z=40$ jest porównywalna z przerwami dla $Z=50$ i $N=82$ czyli może to być kolejna para liczb magicznych tetrahedralnych. Podobnie dla poziomów energetycznych liczonych w okolicy $Z=70$ i $N=90$ (Rys.2.2, dół) - przerwa energetyczna dla $N=90$ jest porównywalna z przerwą dla $Z=70$ więc te dwie liczby mogą być liczbami magicznymi neutronowymi. Sytuacja wygląda analogicznie dla poziomów liczonych w okolicy $Z=90$ i $N=136$, $Z=100$ i $N=168$ oraz $Z=112$ i $N=196$ (rys.2.3), gdzie oprócz przerwy dla liczby $Z=90$, pojawia się duża przerwa dla $Z=100$ i dla $N=168$. Podsumowując można stwierdzić, że występowanie przerw energetycznych, które definiują stabilność jądra ze względu na zmianę jego deformacji, pozwala na oszacowanie nowych liczb magicznych takich jak: 40, 70, 90, 100, 112, 126 dla protonów i 70, 90, 136, 168, 196 dla neutronów.



Rysunek 2.2: Poziomy jednocząstkowe protonowe i neutronowe w funkcji deformacji α_{32} dla jądra ($Z=40$, $N=70$) i ($Z=70$, $N=90$). Różne kolory krzywych oznaczają przynależność do poszczególnych reprezentacji grupy tetrahedralnej. Oznaczenia kolorów - w tekście.

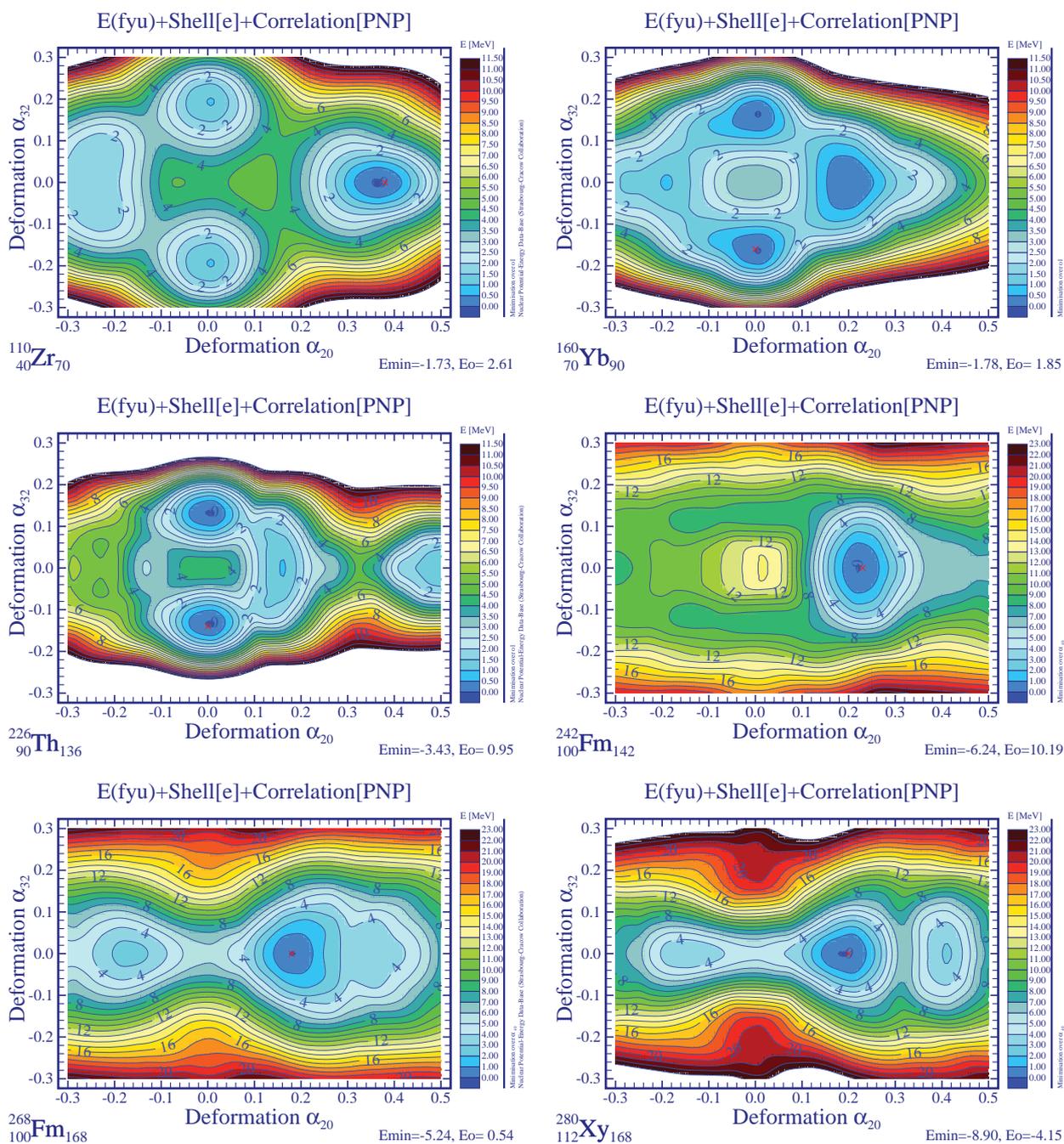


Rysunek 2.3: Podobne do Rys. 2.2 ale centrowane na $(Z=90, N=136)$, $(Z=100, N=168)$ i $(Z=112, N=196)$.

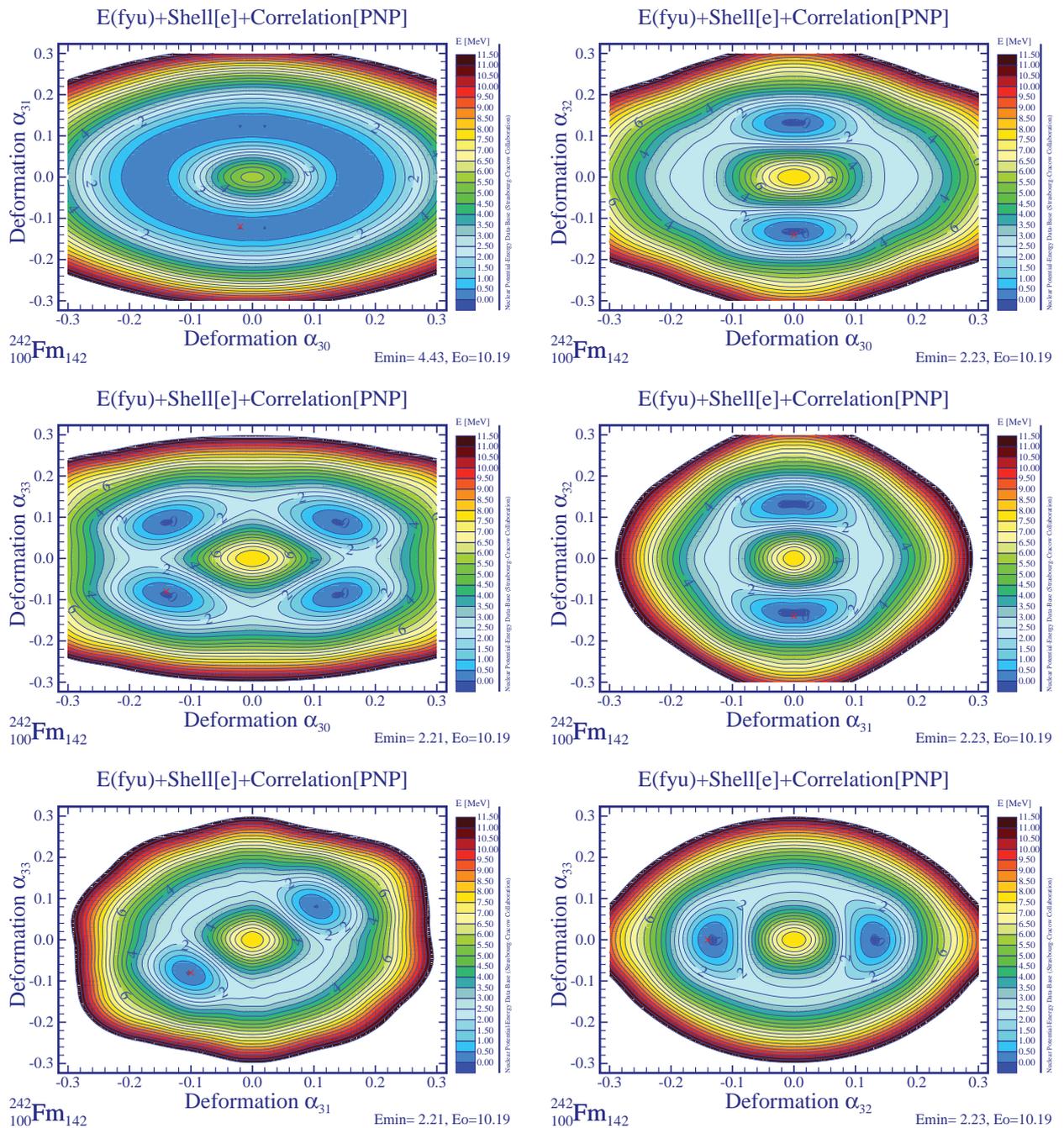
Powyższe rysunki pokazują rzadko spotykaną informację, dyskutowaną jedynie w pracy [Goz03]. Pokazują one praktyczne zastosowanie teorii grup punktowych w celu zweryfikowania, czy dany poziom energetyczny należy do danej reprezentacji grupy. Zastosowanie funkcji yn (wzór 1.181) pozwala na jednoznaczne przypisanie danego poziomu do reprezentacji grupy symetrii punktowych. Jest to kluczowe w przypadku, gdy dwa poziomy mające te same liczby kwantowe jak parzystość czy sygnaturę, ale należące do innych reprezentacji, mogą się przecinać. Linie zielone oznaczają czterowymiarowe reprezentacje nieredukowalne a linie niebieskie i fioletowe- dwuwymiarowe reprezentacje tetrahedralnej grupy symetrii punktowych. Oznacza to, że mamy poczwórną lub podwójną degenerację danego poziomu energetycznego. Grupa tetrahedralna T_d ma 48 elementów symetrii a każdą z nich można zapisać przy pomocy trzech charakterów. Dzięki funkcji yn (wzór 1.181) można sprawdzić jaką reprezentację posiada dany poziom.

Korzystając z bazy map energii całkowitych (patrz referencja [XX]), w szybki sposób

można sprawdzić jak wyglądają mapy energii, czy faktycznie minima energetyczne są stowarzyszone z dużymi przerwami energetycznymi i jakie są parametry deformacji odpowiadające danemu minimum. Rysunki 2.4 pokazują mapy energii na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ dla jąder, dla których na wykresach poziomów jednocząstkowych widoczne były duże przerwy energetyczne dla niezerowych parametrów deformacji tetrahedralnej. Mapa energii dla ^{268}Fm nie pokazuje żadnego minimum tetrahedralnego, mimo, że dla obu liczb Z i N są widoczne duże przerwy energetyczne ale odpowiadają one różnym wartościom parametrów α_{32} , przez co efekty się wygaszają. Idąc dalej w interpretacji tych wyników można przyjąć, że w tej metodzie preferowane są takie same deformacje dla gęstości protonów i neutronów. Jednocześnie na serii rysunków 2.5 można powiązać minimum tetrahedralne widoczne na mapie z Rys. 2.4 dla ^{242}Fm z minimami energii dla $\alpha_{32}=0.15$. Co więcej, takie cięcia w przestrzeni parametrów deformacji pozwalają stwierdzić, że to właśnie α_{32} wygeneruje minimum energetyczne a pozostałe deformacje oktupolowe są bez znaczenia. Minima widoczne na płaszczyźnie $(\alpha_{31}, \alpha_{33})$ należą do tej samej deformacji tetrahedralnej, gdyż z warunków matematycznych złożenie deformacji $(\alpha_{31}, \alpha_{33})$ daje w efekcie kształt o deformacji α_{32} (Rys. 1.2, b).



Rysunek 2.4: Mapy energii całkowitej złożonej z energii makroskopowej Folded-Yukawa ($E(\text{fyu})$), energii mikroskopowej (energia powłokowej Strutinskiego (Shell[e]) i energii korelacji pairing (Correlation [PNP])) na płaszczyźnie deformacji (α_{20} , α_{32}) dla jąder ($Z=40$, $N=70$), ($Z=70$, $N=90$), ($Z=90$, $N=136$), ($Z=100$, $N=142$, $N=168$) oraz ($Z=112$, $N=168$).



Rysunek 2.5: Cięcia przestrzeni czterowymiarowej parametrów deformacji oktopolowej (α_{30} , α_{31} , α_{32} , α_{33}) dla ($Z=100$, $N=142$).

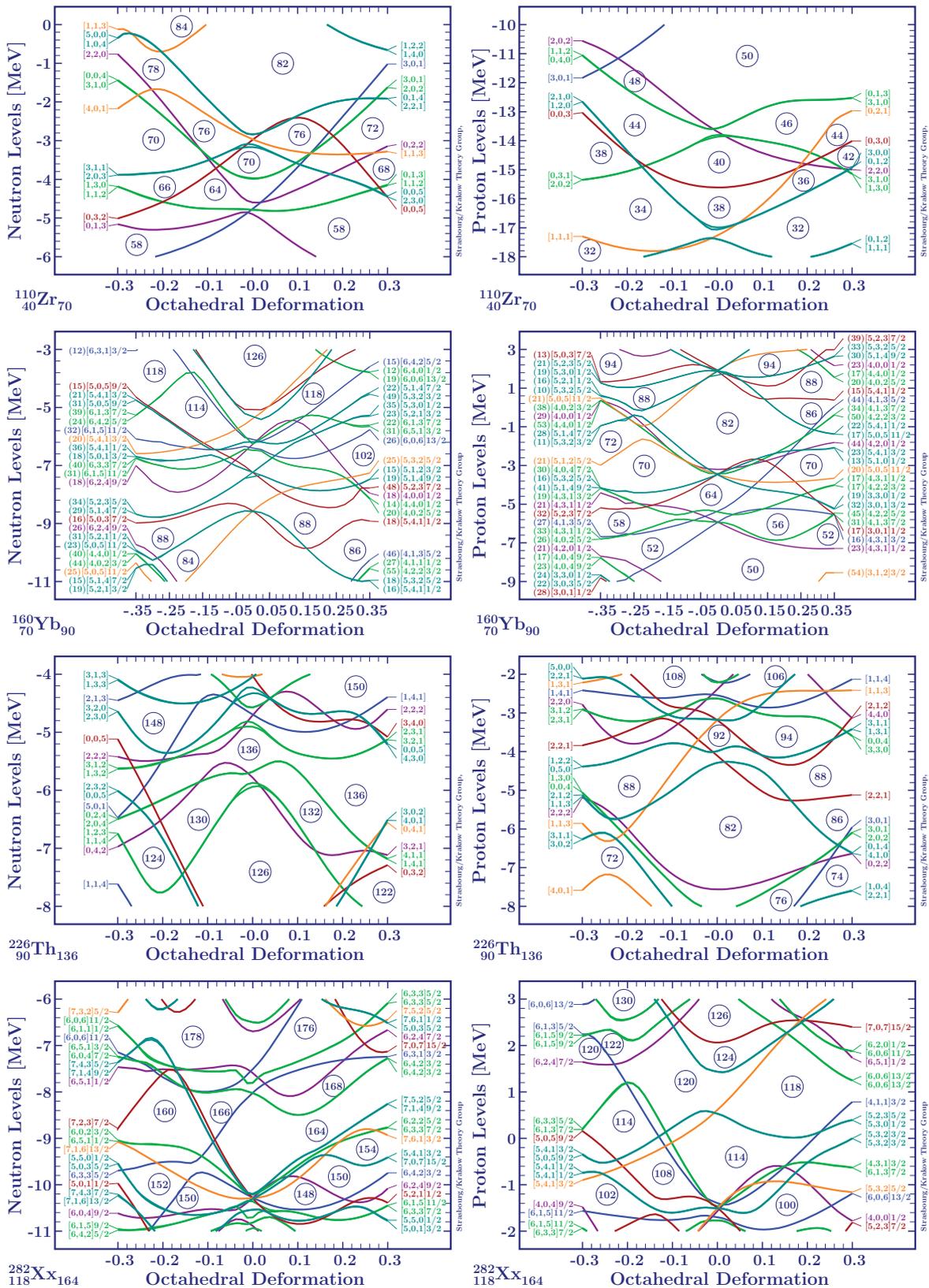
2.1.3 Stabilność oktahedralna

Deformacja oktahedralna o_1 jest to złożenie współczynników stojących przy harmonikach sferycznych Y_{40} i $Y_{4\pm 4}$ z odpowiednimi współczynnikami: $\alpha_{4\pm 4} = -\alpha_{40} \cdot \sqrt{14/5}$ w pierwszym rzędzie. Znalezienie oktahedralnych liczb magicznych wiąże się ze studiowaniem poziomów jednocząstkowych ale w funkcji deformacji oktahedralnej o_1 . Rysunki 2.6 pozwalają na oszacowanie przerw energetycznych i deformacji im odpowiadających dla różnych obszarów masowych. Przy dyskusji liczb magicznych oktahedralnych dochodzi kolejne utrudnienie związane z niesymetrycznością kształtów otrzymanych z dodatnimi i ujemnymi parametrami deformacji oktahedralnej (patrz Rys. 1.2, c-d).

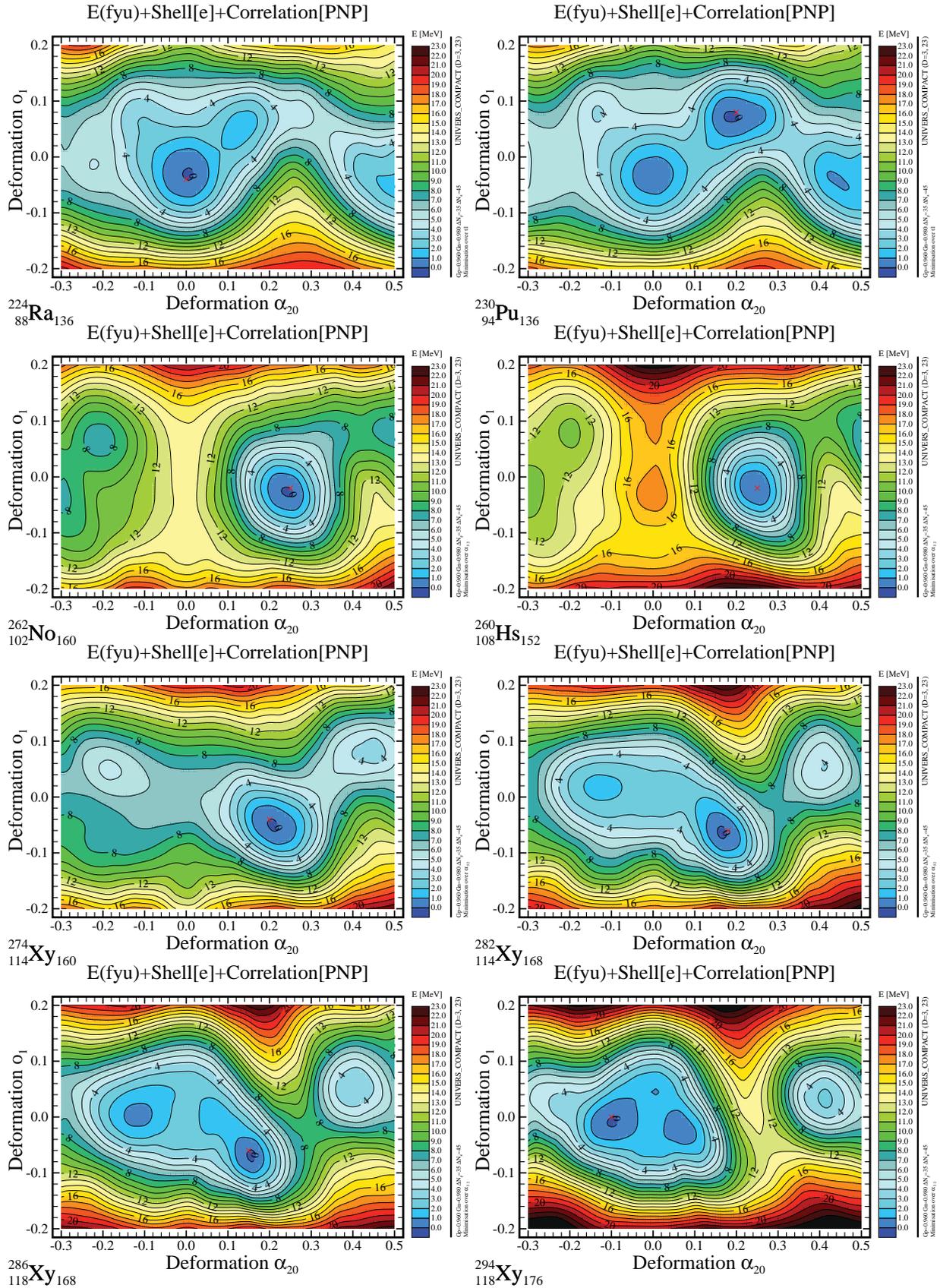
Schemat poziomów jednocząstkowych dla neutronów obliczony w okolicy $Z=118$ i $N=164$, przedstawiony na rys. 2.6 jest bardzo gęsty ale dla $N=164$ przy dodatniej wartości deformacji α_{40} pojawia się duża przerwa energetyczna. Największa jest dla kształtów sferycznych ale istnieje też dla deformacji oktahedralnej. Następna przerwa energetyczna pokazuje współlistnienie liczb magicznych $N=178$ dla ujemnego α_{40} i $N=176$ dla dodatniego α_{40} . Dla ujemnego α_{40} istnieje też przerwa dla $N=160$. Podobne rozważania dla poziomów protonowych pozwalają na znalezienie liczb magicznych $Z=114$ (dla kształtu sferycznego) oraz $Z=120$ dla ujemnego α_{40} i $Z=118$ dla dodatniego α_{40} . W ten sposób można wnioskować, że jądra o $Z=120$, $N=178$ i $Z=118$, $N=176$ są dobrymi kandydatami do szukania symetrii oktahedralnej. Patrząc na pozostałe obszary masowe, symetria oktahedralna preferuje liczby 34/32, 58, 70/72, 88/86, 120/118, 124/136 148/150 oraz 178.

Podobnie jak w przypadku symetrii tetrahedralnej, tutaj także każdy kolor krzywej oznacza inną reprezentację nieredukowalną. Grupa symetrii oktahedralnych ma 96 elementów grupy symetrii punktowych. Kolor zielony i turkusowy oznacza reprezentację czterowymiarową a pozostałe kolory: reprezentacje dwuwymiarowe, przy czym turkusowy, pomarańczowy i brązowy to poziomy o parzystości dodatniej a zielony, fioletowy i niebieski ukazują poziomy o parzystości ujemnej.

Dopiero mapy energii całkowitych przedstawione na płaszczyźnie parametrów deformacji kwadrupolowo - oktahedralnej (Rys. 2.7) pozwalają na stwierdzenie, które przerwy energetyczne wygenerowały minima dla niezerowej deformacji oktahedralnej. Są to: ($Z=88$, $N=136$), ($Z=94$, $N=136$), ($Z=114$, $N=168$), ($Z=118$, $N=168$) a dla pozostałych obszarów masowych należałoby przeanalizować podobne mapy energetyczne. Tak więc badanie symetrii punktowych wyższych rzędów nie może się skupić tylko na dyskusji poziomów jednocząstkowych i przerw energetycznych między nimi, ale musi być stowarzyszone z energiami całkowitymi otrzymanymi przy pomocy tych poziomów a służy głównie jako pierwszy krok do poszukiwań jąder posiadających kształty o danej symetrii.



Rysunek 2.6: Poziomy energii jednocząstkowych dla protonów (prawy) i neutronów (lewy) w funkcji deformacji oktahedralnej w okolicach ($Z=40$, $N=70$), ($Z=70$, $N=90$), ($Z=90$, $N=136$) i ($Z=118$, $N=164$). Różne kolory krzywych oznaczają przynależność do poszczególnych reprezentacji grupy oktahedralnej. Oznaczenia kolorów - w tekście.



Rysunek 2.7: Mapy energii całkowitej na płaszczyźnie kwadrupolowo-oktahedralnej zminimalizowane po tetrahedralnym parametrze deformacji dla wybranych jąder ciężkich i superciężkich, związanych z dużymi przerwami energetycznymi widocznymi na Rys. 2.6

2.2 Analiza jakościowa gęstości poziomów nukleonowych w terminach symetrii

Poziomy jednocząstkowe niosą dużo informacji ale trudno jest śledzić ich wpływ na budowanie energii wiązania jądra jako całości - a zatem również jednej z najważniejszych wielkości obserwowalnych: masy jądra, która odgrywa podstawową rolę w badaniach jąder egzotycznych. Używając metody Strutińskiego można stwierdzić, że mała gęstość poziomów jednocząstkowych w okolicy poziomu Fermiego spowoduje obniżenie energii powłokowej. Wprawdzie na końcowy efekt jakim jest masa jądra ma wpływ także energia pairing, która przeważnie działa przeciwnie do energii powłokowej, ale sumaryczna energia mikroskopowa dla jąder magicznych (uzyskanych dzięki dużym przerwom energetycznym) jest dużo niższa niż dla jąder sąsiednich.

Celem tego rozdziału będzie jakościowa charakterystyka powiązania i wyrażenia związku pomiędzy geometrycznymi symetriami jąder atomowych, reprezentowanymi przy pomocy powierzchni jądra (ale które to symetrie nie pozwalają na wnioskowanie wprost o wpływie geometrii na energię jądra), a z drugiej strony właśnie gęstości poziomów nukleonowych, które w sposób jakościowy, dzięki twierdzeniu Strutińskiego, na takie (globalne) wnioski pozwalają.

Gęstości poziomów możemy wyznaczać wprost z definicji:

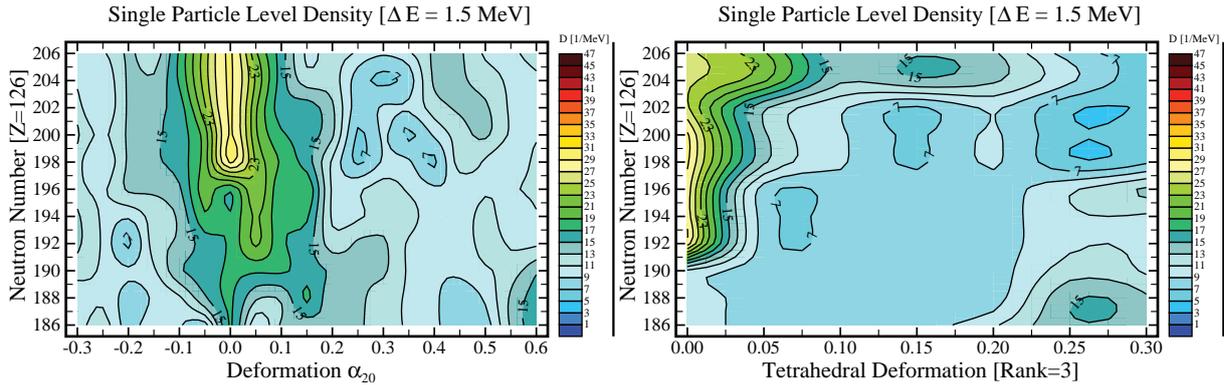
$$g_{\Delta e}(\lambda) = \frac{\Delta N}{2\Delta e}. \quad (2.1)$$

W powyższym wyrażeniu zakładamy pewną wartość 'okna energetycznego' Δe nad i pod energią Fermiego, λ , i liczymy liczbę poziomów spełniających warunek $e_i \in [\lambda - \Delta e, \lambda + \Delta e]$; ta liczba oznaczona jest powyżej jako ΔN . Energia Fermiego w takim podejściu to z definicji energia średnia pomiędzy ostatnim poziomem obsadzonym i pierwszym poziomem nieobsadzonym. Dla uniknięcia niepotrzebnych komplikacji zakładamy tutaj, że wszystkie obliczenia wykonane będą dla jąder parzysto-parzystych.

Definicja 'okna energetycznego' jest technicznie istotnym elementem ilustracji tak określonej gęstości ponieważ jego dobór będzie zmieniał znaczenie fizyczne wielkości zdefiniowanej w powyższym równaniu. Przy dostatecznie małym rozmiarze okna, gęstość poziomów wprowadzona powyżej, ilustruje fluktuacje związane ze strukturą powłokową i aby ten aspekt akcentować musimy wybierać rozmiar okna stosunkowo niewielki w porównaniu do tzw. dużych powłok (*N-shell*). W tym przypadku fluktuacje gęstości mogą być korelowane (nawet jeśli tylko jakościowo) z fluktuacjami pełnej energii jądrowej. Należy zwrócić uwagę, że istnienie takiej korelacji zapewnia sposób funkcjonowania metody Strutińskiego. Jest to własność czasami określana jako twierdzenie Strutińskiego. Jednakże należy pamiętać, że sama metoda Strutińskiego pozostaje od samego początku wyrażeniem fenomenologicznym a ostateczne wartości energii jądrowej będą funkcjonalnym doboru *variantu* energii makroskopowej. Dyskusja zachowania gęstości poziomów nukleonowych jest globalną i w pewnym sensie uniwersalną metodą podejścia do problemu 'podatności systemów jądrowych na generowanie nowych minimów energetycznych', gdy badane jądra atomowe przybierają kształty odpowiadające pewnej symetrii lub też od takiej symetrii odchodzą. W tym sensie analiza *porównawcza* gęstości poziomów (która ma charakter testu nieco akademickiego) pozostaje instruktywna. Przy powiększaniu okna energetycznego gęstość poziomów zdefiniowana powyżej, przyjmować będzie graniczną wartość odwrotności średniej odległości międzypoziomowej.

Praktycznej realizacji definicji gęstości poziomów można dokonać na kilka sposobów, np. zadając rozmiar energetyczny okna poprzez zdefiniowanie wielkości Δe , albo zadając liczbę poziomów, które mają się znaleźć w oknie. W tym przypadku Δe będzie uzależniona od położenia energii Fermiego. Okazuje się, że w przypadku dobrze kontrolowanego użycia tych dwóch podejść, wyniki końcowe oszacowań są zbliżone.

Gęstość zdefiniowana powyżej jest przedstawiona w funkcji deformacji kwadrupolowej i tetrahedralnej dla jednocząstkowych poziomów neutronowych (rys. 2.8) przy $E_{win} = 2 \Delta e = 2 \text{ MeV}$.



Rysunek 2.8: Gęstość dla neutronowych poziomów jednocząstkowych w funkcji deformacji kwadrupolowej (lewy) i tetrahedralnej (prawy).

Do badania globalnych własności energii jądrowych można, dzięki własnościom podejścia Strutińskiego, użyć korelacji efektów powłokowych oraz zachowania gęstości poziomów jednonukleonowych w podejściu pola średniego. W takim przypadku można się posłużyć gęstością tzw. gładką, używaną do liczenia energii powłokowych. Gęstość ta zdefiniowana jest formalnie poczynając od wyrażenia tej gęstości przy pomocy dystrybucji δ -Dirac'a jak poniżej:

$$\begin{aligned}
 g(e) &= \sum_{n=1}^{\infty} \delta(e - e_n) = \frac{1}{\gamma} \sum_{n=1}^{\infty} \delta\left(\underbrace{\frac{e - e_n}{\gamma}}_{\mu}\right) = \frac{1}{\gamma} \sum_{n=1}^{\infty} \delta(\mu_n) \\
 &= \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp^{-\mu_n^2} \sum_{m=0}^{\infty} c_m H_m(\mu_n)
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

gdzie w ostatnim przekształceniu użyto reprezentacji delt dirakowskich w rozwinięciu w bazie wielomianów Hermite'a, $H_m(\mu_n)$. Ze względu na symetrię dystrybucji Dirac'a w rozwinięciu występują wyłącznie wielomiany rzędu parzystego.

Wykorzystując ortogonalność wielomianów można łatwo pokazać, że współczynniki rozwinięcia mają postać:

$$c_n = (-1)^{n/2} \frac{1}{2^n (n/2)!}. \tag{2.3}$$

Zgodnie z sugestią Strutińskiego, powyższe wyrażenie przedstawia się zazwyczaj jako sumę

tzw. części gładkiej, \tilde{g} , i oscylującej:

$$\begin{aligned} g(e) &= \tilde{g}(e) + \delta g(e) \\ &= \overbrace{\frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\mu_n^2) \sum_{m=0}^p c_m H_m(\mu_n)}^{\tilde{g}(e)} + \overbrace{\frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\mu_n^2) \sum_{m=p+2}^{\infty} c_m H_m(\mu_n)}^{\delta g(e)}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Powyżej wprowadzono współczynnik obcięcia (cut-off parameter) p , zazwyczaj przyjmowany jako $p = 6$. Liczba cząstek znajdujących się poniżej poziomu Fermiego λ jest:

$$n(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} \left(\frac{dn}{de} \right) de = \int_{-\infty}^{\lambda} g(e) de = \sum_{\nu=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\lambda} \delta(e - e_{\nu}) de = n \quad (2.5)$$

gdzie: $\int_{-\infty}^{\lambda} \delta(e - e_{\nu}) de = 1$ jeśli $e_{\nu} < \lambda$ i $\int_{-\infty}^{\lambda} \delta(e - e_{\nu}) de = 0$ jeśli $e_{\nu} > \lambda$.

Zauważmy, że podejście Strutińskiego do wyznaczania tej funkcji gęstości zależy od dwóch parametrów empirycznych, p oraz γ , definiowanych w taki sposób, aby wynik końcowy możliwie nie zależał od dobranych wartości; jak się okazuje, w tej metodzie jest to możliwe. Parametr γ zazwyczaj jest definiowany przez wartości porównywalne z energetycznymi rozmiarami głównych powłok, typowo

$$\gamma = 1.2 \times \frac{41}{A^{1/3}} \text{ MeV}. \quad (2.6)$$

Ten ostatni dobór używany jest wprost do wyliczania energii powłokowej w metodzie Strutińskiego, gdzie w tym szczególnym zastosowaniu, parametr rozmycia ma z definicji *uśredniać wszelkie fluktuacje*.

W naszym przypadku, wręcz na odwrót, jesteśmy zainteresowani uwypukleniem ‘fluktuacji’ gęstości poziomów, nie tyle po to aby wyliczać energie powłokowe, ale raczej po to aby wypracować szybki i prosty test pozwalający porównywać typowe zachowanie tychże fluktuacji *i ich amplitud* w funkcji przesuwania energii Fermiego, a jednocześnie w funkcji wybranych parametrów deformacji charakteryzujących wybrane symetrie. Przy tym badaniu, w naszym przypadku, będziemy się koncentrować na deformacji kwadrupolowej jako tej, która definiuje skalę porównawczą (reference behaviour), podczas gdy testowanymi relatywnie geometriami będą symetria tetrahedralna (‘nie-osiove deformacje oktopolowe’) w porównaniu z symetrią osiową deformacji oktopolowej (‘geometria gruszko-kształtna’).

W celu umożliwienia adaptacji gęstości Strutińskiego do naszych celów wprowadzimy czynnik skalujący, g ,

$$\Delta E = g \cdot \hbar\omega = g \times \frac{41}{A^{1/3}} \text{ MeV}, \quad (2.7)$$

którego dobór w postaci [$g=0.25, 0.33, 0.42, 1.0$] odpowiadać będzie oknom energetycznym, w przybliżeniu charakteryzującym w miarę ilustratywnie zachowanie gęstości dla bardzo ciężkich jąder, odpowiednio $\Delta E=1.5, 2, 2.5$ i 6 MeV (Rys. 2.9). Oczekujemy, że im większe będzie rozmycie, czyli szersze okno energetyczne, tym mniej szczegółów będzie widocznych na odpowiednich diagramach. Typowe wyniki przedstawione są na Rys. 2.9, 2.10, 2.11.

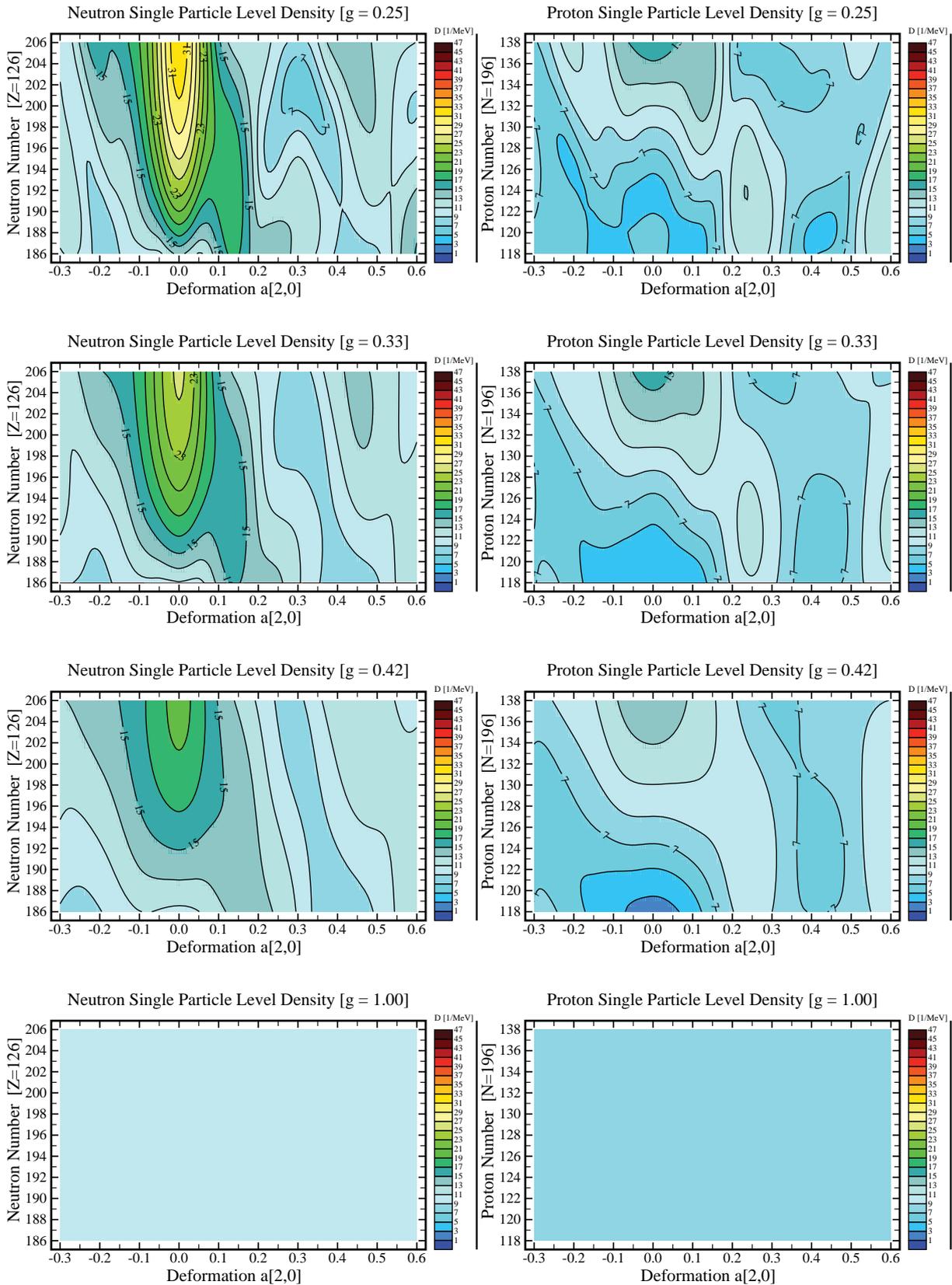
Jak wspomniano wyżej, do liczenia energii powłokowej Strutińskiego zwyczajowo używana jest wartość $\Delta E = 1.2 \times 41 A^{-1/3}$, co odpowiada oknu 6 MeV, a jak widać z diagramów

u dołu rysunków (przy $g=1$) - fluktuacje, które są naszym głównym celem, nie są już wtedy widoczne. Zauważmy, że najwyższa gęstość jest otrzymana dla neutronów, w przybliżeniu jako 32 poziomów na MeV przy uwzględnieniu degeneracji Kramersa. Na Rys. 2.10 pokazane są gęstości Strutińskiego poziomów neutronowych i protonowych dla różnych okien energetycznych dla osiowej deformacji oktupolowej α_{30} . W tym przypadku także rozmycie gra decydującą rolę w dyskusji efektów pochodzących od przerw energetycznych. Potwierdza to znaną zasadę, że γ Strutińskiego używana do liczenia poprawki powłokowej, musi być weryfikowana poprzez sprawdzenie warunku 'plateau' przy przejściu z jednego obszaru masowego do innego.

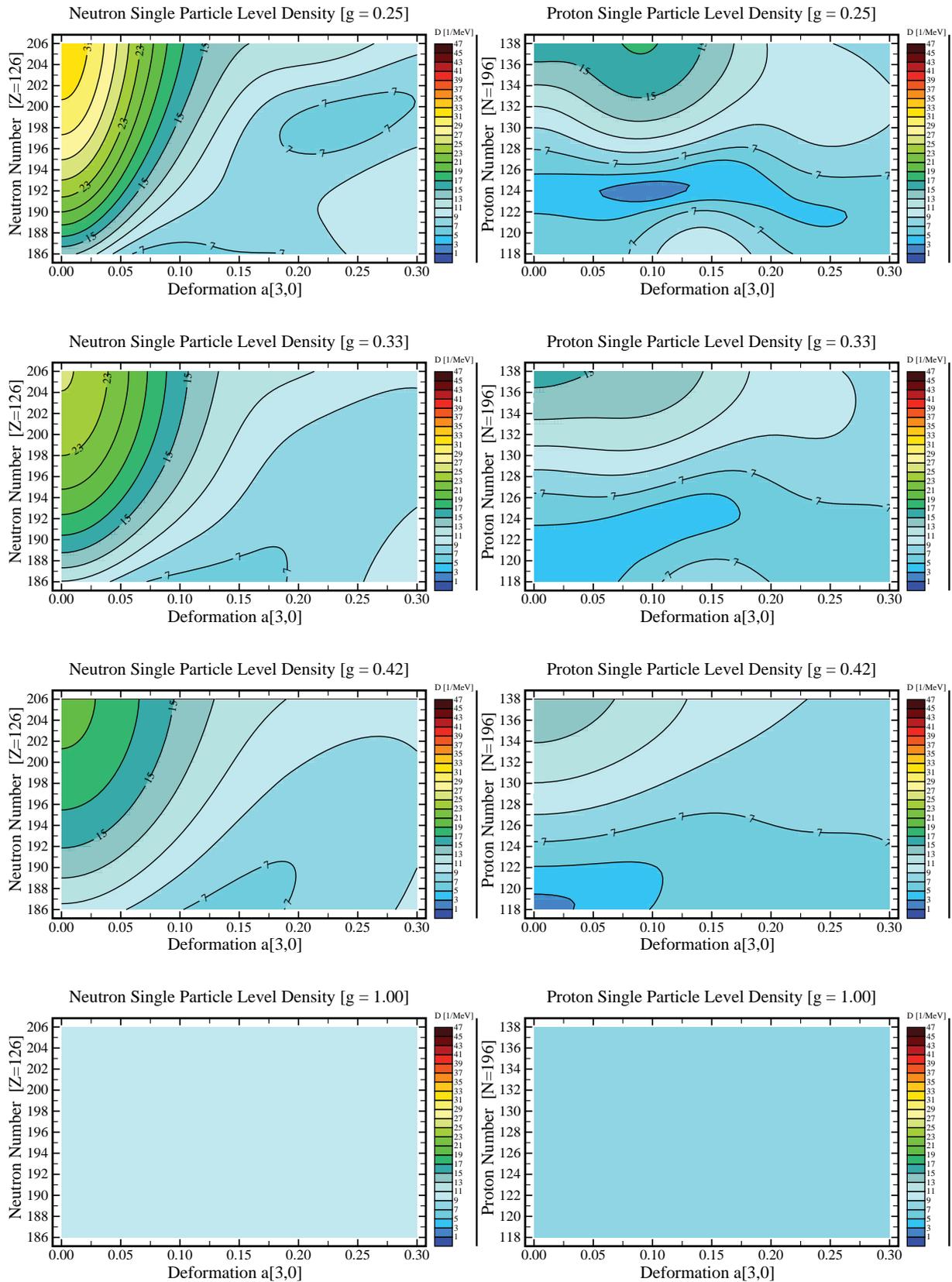
Studiowanie kształtów egzotycznych, a co za tym idzie i symetrii punktowych, raz jeszcze wymaga spojrzenia na osiowe i nieosiowe deformacje oktupolowe i gęstości Strutińskiego obliczone dla parametrów deformacji α_{30} , α_{31} , α_{32} i α_{33} dla neutronów i protonów (Rys. 2.11). Na rysunku 2.11 przedstawione są gęstości poziomów jednocząstkowych w funkcji liczby protonów i neutronów, dla zmiennej deformacji oktupolowej osiowo symetrycznej i asymetrycznej. Deformacje α_{30} , α_{31} i α_{33} generują systematycznie mniejsze minima gęstości neutronowych niż deformacja tetrahedralna α_{32} .

Dla gęstości protonowych, oprócz minimów blisko kształtów sferycznych, gdzie podatności oktupolowe występują dla wszystkich czterech realizacji ale dla niewielkich liczbowo wartości parametrów deformacji – pojawia się minimum tetrahedralne dla $Z=136$, przy dużej ($\alpha_{32} \sim 0.25$) deformacji tetrahedralnej. Ten wynik w połączeniu z podobnym dla neutronów przy $N=196$ sugeruje możliwość najsilniejszych efektów symetrii tetrahedralnej w 'bardzo ciężkim' rejonie jąder superciężkich: $Z \approx 136$ oraz $N \approx 196$.

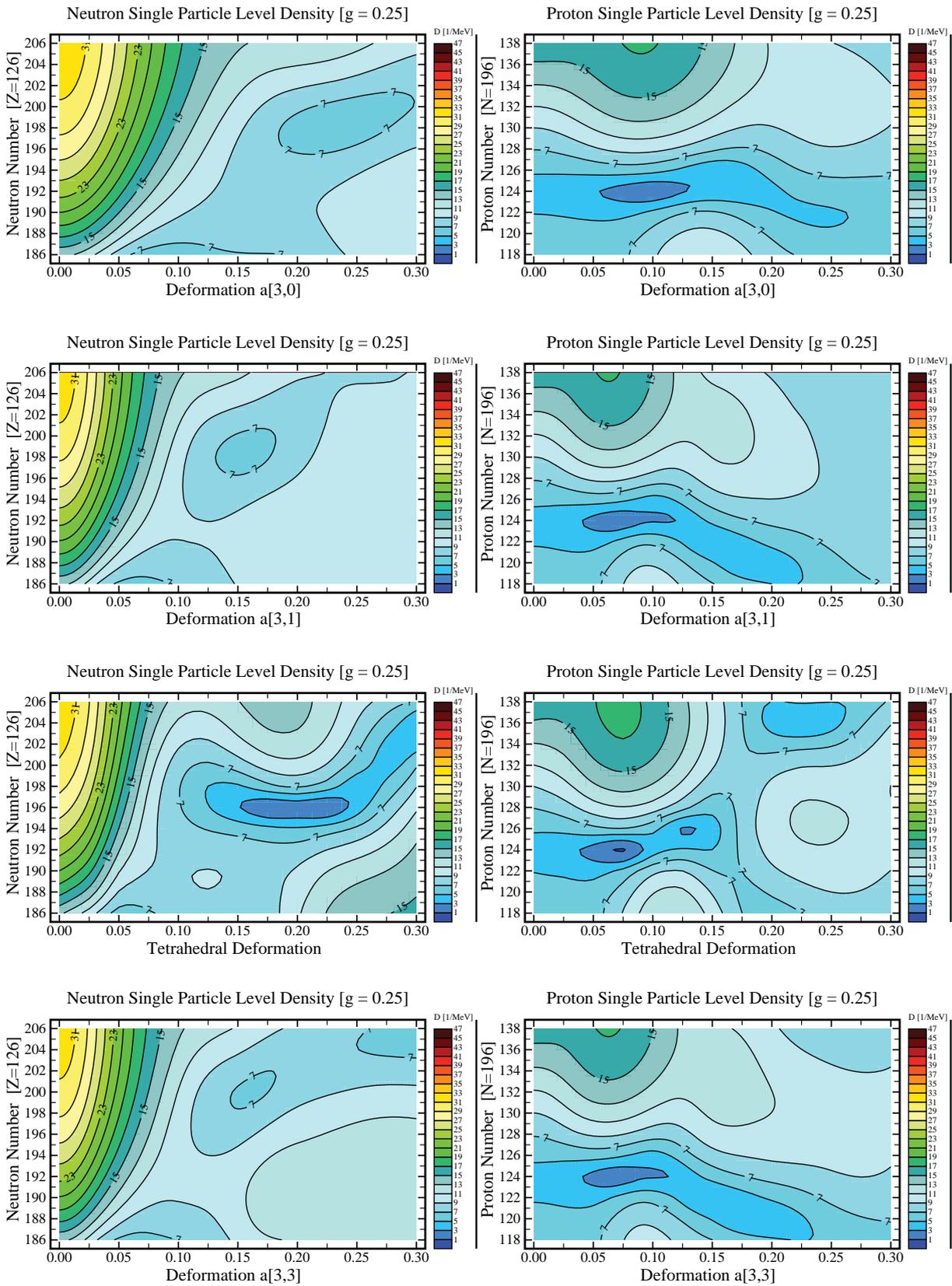
Ten wynik jest instruktywny na poziomie dyskusji 'akademickiej' odpowiadającej na pytanie, gdzie należy oczekiwać najsilniejszych efektów tetrahedralnych. Niestety z 'praktycznego' punktu widzenia, należy przypuszczać, że ten obszar masowy będzie długo jeszcze niesłyszalnie trudnym do osiągnięcia w terminach możliwych eksperymentów. W tym kontekście będzie interesujące również poszukiwanie innych obszarów masowych, gdzie podobne efekty tej symetrii są widoczne.



Rysunek 2.9: Gęstość Strutinskiego dla neutronowych (lewa kolumna) i protonowych (prawa kolumna) poziomów energetycznych w oknach energetycznych 1,5, 2, 2,5 i 6 MeV ($\Delta E = 1.2 \cdot 41 \cdot A^{-1/3} = 6$ MeV dla $Z=126, N=196$) wokół poziomu Fermiego dla deformacji kwadrupolowej. Z powyższego porównania wnosimy że wartość $g=0.25$ uwypukla w sposób dostatecznie czuły fluktuacje w terminach przesuwania poziomu Fermiego z jednej strony i zmian deformacji kwadrupolowej z drugiej.



Rysunek 2.10: Podobny do rys. 2.9 ale dla osiowej deformacji oktopolowej.

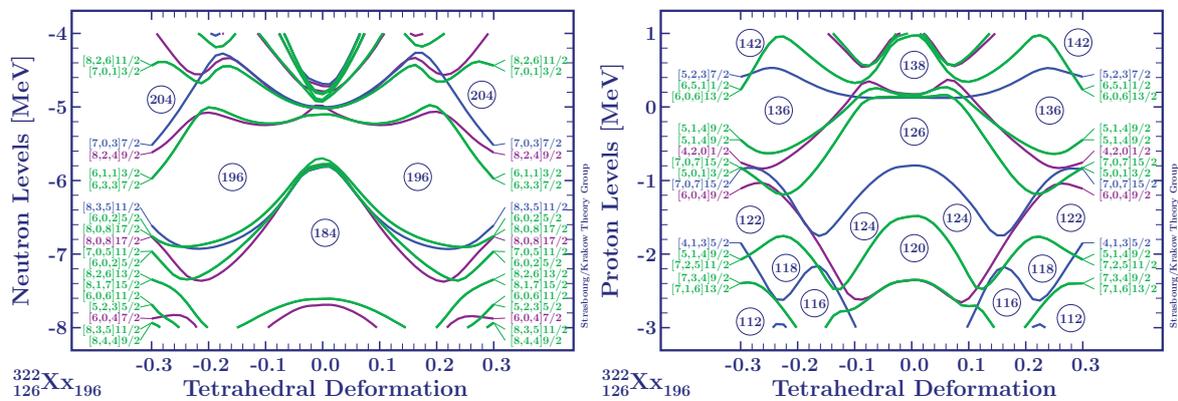


Rysunek 2.11: Gęstość Strutińskiego dla neutronowych (lewa kolumna) i protonowych (prawa kolumna) poziomów energetycznych w oknie energetycznym 1.5 MeV ($\Delta E = 0.25 \cdot 41 \cdot A^{-1/3} = 1.5$ MeV dla $Z=126, N=196$) wokół poziomu Fermiego dla wszystkich deformacji oktopolowych: α_{30} , α_{31} , α_{32} i α_{33} .

2.2.1 Symetria tetrahedralna i reprezentacje nieredukowalne

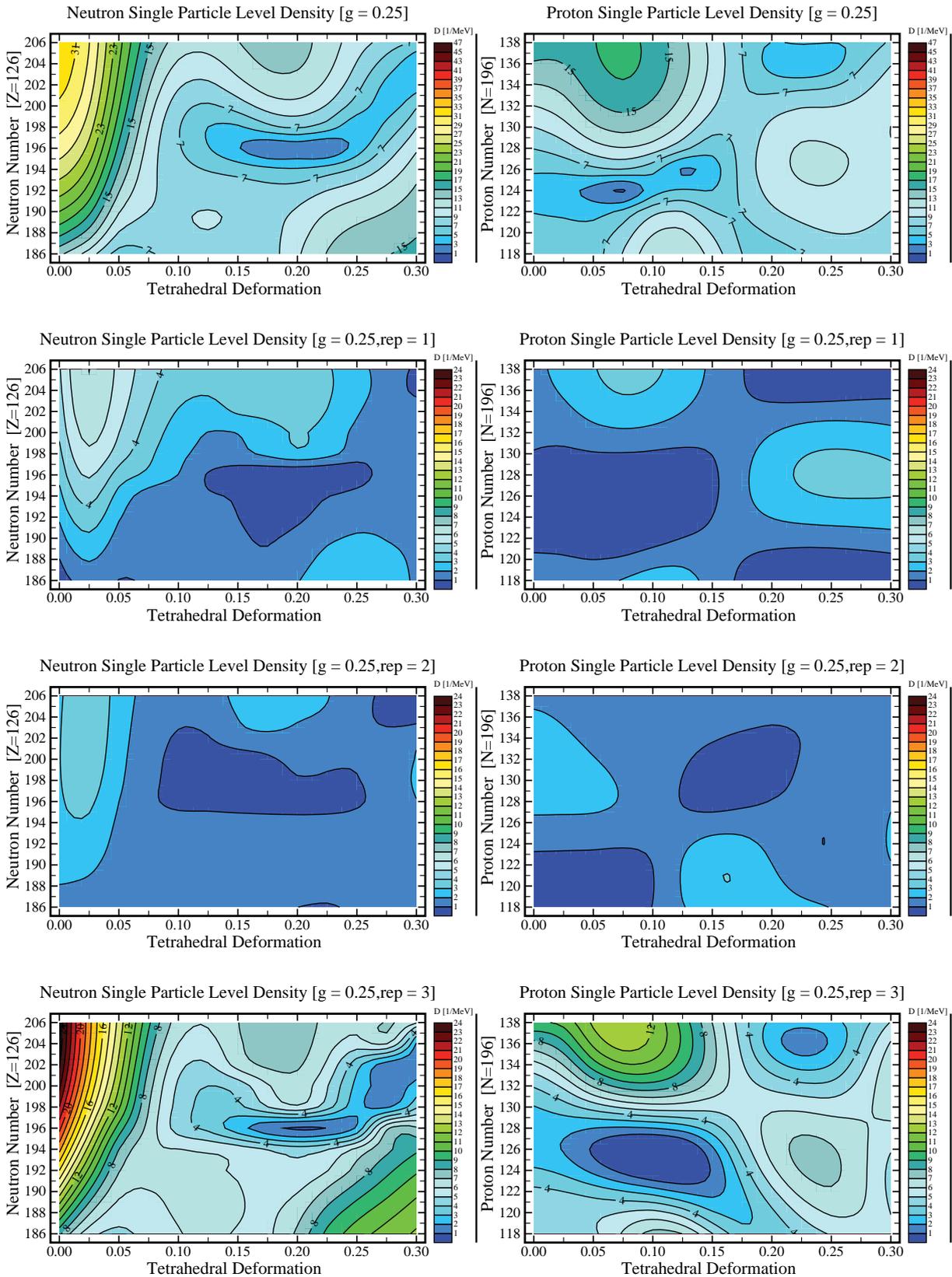
W odróżnieniu od wszystkich innych grup punktowych (za wyjątkiem oktahedralnej), jedną z najistotniejszych w naszym kontekście cech symetrii tetrahedralnej jest posiadanie przez niektóre poziomy jednocząstkowe degeneracji czterokrotnej.

Ta cecha odróżnia te dwie grupy, tetrahedralną i oktahedralną, od wszystkich pozostałych, w których realizuje się wyłącznie symetria podwójna (*Kramers double degeneracy*).

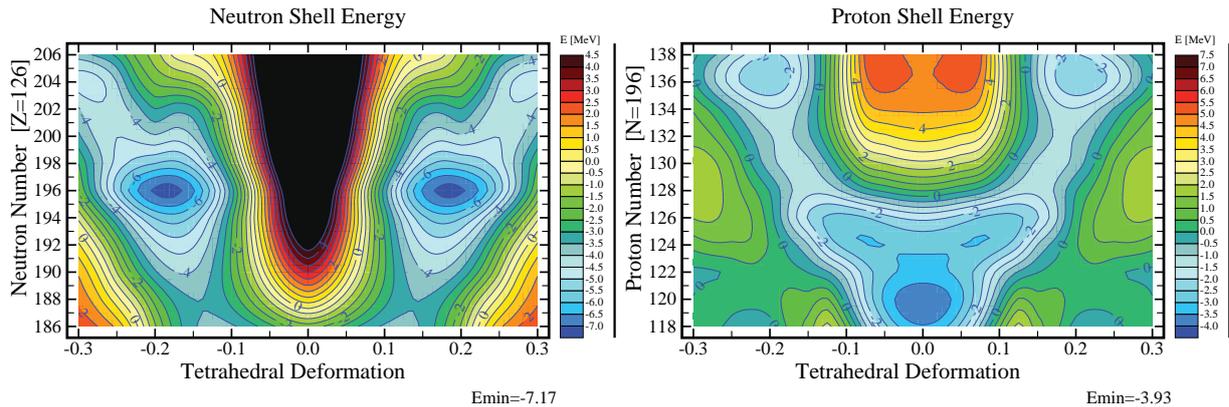


Rysunek 2.12: Energie jednocząstkowe poziomów nukleonowych w funkcji deformacji tetrahedralnej dla całego obszaru jąder ekstremalnie superciężkich. Kolorem zielonym oznaczone są stany należące do reprezentacji czterowymiarowych, będące właśnie elementem strukturalnie ‘egzotycznym’ w porównaniu z pozostałymi. W celu ułatwienia czytelności rysunku, krzywe są etykietowane przy pomocy oznaczeń nilssonowskich. Rysunek pokazuje dramatyczne efekty powłokowe przy niezerowych deformacjach tetrahedralnych, w tym, dla liczby protonów $Z=136$ z przerwą energetyczną większą niż ta dla konfiguracji sferycznej przy $Z=126$ oraz dla neutronów przy $N=196$, porównywalna ze sferyczną liczbą magiczną $N=184$.

Opierając się na teorii reprezentacji grup punktowych możemy przypisać poszczególne poziomy do odpowiednich reprezentacji nieredukowalnych, tak jak to było pokazane na rys. 2.12. Dzięki tej informacji będziemy mogli przeanalizować w skali porównawczej gęstości generowane przez reprezentacje dwuwymiarowe (sytuacja charakterystyczna dla zwykłej degeneracji Kramersa) w porównaniu z egzotycznymi reprezentacjami czterowymiarowymi. Na rys. 2.13 pokazano pełną gęstość poziomów włączając wszystkie 3 reprezentacje nieredukowalne naraz, podczas gdy pozostałe panele pokazują rozkład tej gęstości w terminach trzech reprezentacji oddzielnie. Oznaczenie [rep] podaje numer reprezentacji, gdzie do reprezentacji dwuwymiarowej oznaczonej jako rep=1 należą poziomy w kolorze fioletowym z rys. 2.12, podobnie rep=2 - odpowiada reprezentacji dwuwymiarowej z poziomami oznaczonymi na niebiesko a rep=3 to symbol odpowiadający reprezentacji czterowymiarowej (kolor zielony na rys.2.12).



Rysunek 2.13: Gęstość Strutińskiego dla neutronowych (lewa kolumna) i protonowych (prawa kolumna) poziomów energetycznych w oknach energetycznych 1.5 MeV w funkcji deformacji tetrahedralnej α_{32} . Oznaczenie 'rep' (IRREPS) odnosi się do numeru reprezentacji i dyskutowane jest w tekście.



Rysunek 2.14: Energia powłokowa dla neutronów (lewa kolumna) i protonów (prawa kolumna) w funkcji deformacji α_{32} .

Analiza wyników na rys. 2.13 pokazuje, że reprezentacje czterowymiarowe są *decydujące* jeśli idzie o zachowanie gęstości poziomów a więc mają bardzo znaczący wpływ na generowanie minimów energetycznych w przypadku symetrii tetrahedralnej. W szczególności, z porównania prezentowanych ilustracji staje się jasne, że minima otrzymane przy użyciu pełnych gęstości złożonych z wkładów pochodzących od wszystkich trzech reprezentacji nieredukowalnych, w rzeczywistości są zdominowane wkładami reprezentacji czterowymiarowych.

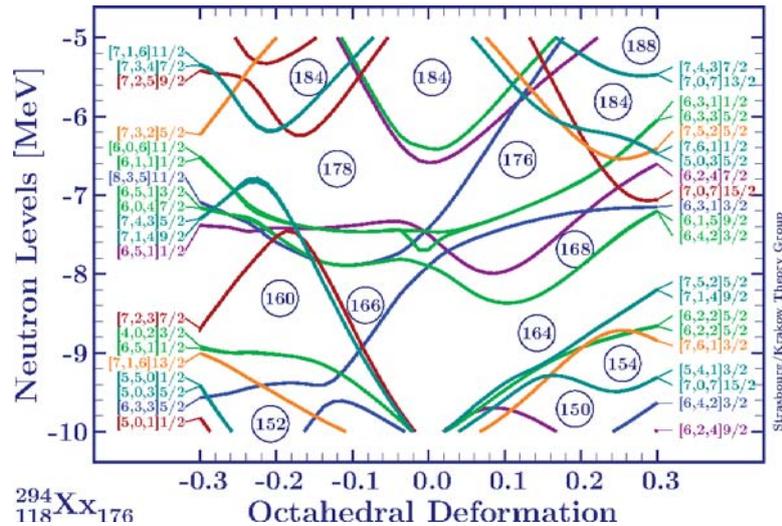
Na zakończenie tej serii ilustracji będziemy chcieli pokazać również zachowanie energii powłokowych otrzymywanych w metodach fenomenologicznych z metody Strutińskiego – w porównaniu z jakościowymi przewidywaniami opartymi na analizie samych gęstości jednonukleonowych poziomów energetycznych. Porównanie to (rys. 2.14) w pełni potwierdza wyniki dyskusji z poprzedzającego rozdziału jeśli idzie o rozłożenie wkładów do energii wiązania pochodzących od najsilniejszych (tj. najbardziej ujemnych) energii powłokowych.

2.2.2 Symetria oktahedralna

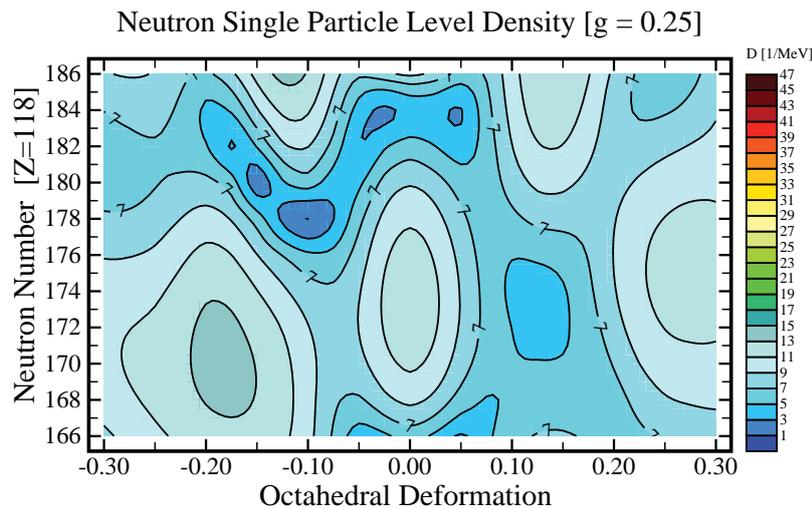
Grupa oktahedralna charakteryzuje się sześcioma reprezentacjami nieredukowalnymi, po trzy w każdej parzystości, a w każdej parzystości odnajdujemy po dwie reprezentacje dwuwymiarowe i po jednej czterowymiarowej. Rysunki 2.15 i 2.17 ilustrują rozkład poziomów jednocząstkowych w funkcji deformacji oktahedralnej (podobne do Rys. 2.6 ale scentrowane na $Z=118$ i $N=176$) do porównanie z mapami gęstości tych poziomów na rys. 2.16 i 2.18 dla neutronów i protonów odpowiednio. Dla symetrii oktahedralnej policzone są gęstości poziomów albo całkowite (rys. 2.16 i 2.18) albo też rozdzielone na poszczególne reprezentacje nieprzywiedlne (rys. 2.19 i 2.20) oznaczone przez [rep], gdzie rep=1 to poziomy fioletowy z rys. 2.16 i 2.18 (lewy), rep=2 - poziomy niebieski i rep=3 - zielony, rep=4 - brązowy, rep=5 - pomarańczowy a rep=6 są turkusowe. Jak to już było powiedziane w poprzednim podrozdziale: rep=3 i 6 pokazują poziomy czterokrotnie zdegenerowane a pozostałe są tylko dwukrotnie zdegenerowane. Poziomy o rep=1,2,3 mają parzystość ujemną a pozostałe – dodatnią.

Tak więc mapy gęstości poziomów jednocząstkowych pozwalają na stwierdzenie, ile poziomów w gęstości *pochodzi* na średnioz danej reprezentacji i która z nich jest dominująca.

Przełożenie gęstości poziomów na energię powłokową jąder ilustruje rys. 2.21 gdzie widoczne są minima dla $Z=118$ i $N=184$, kompatybilne z minimami gęstości poziomów z Rys. 2.16, 2.18.

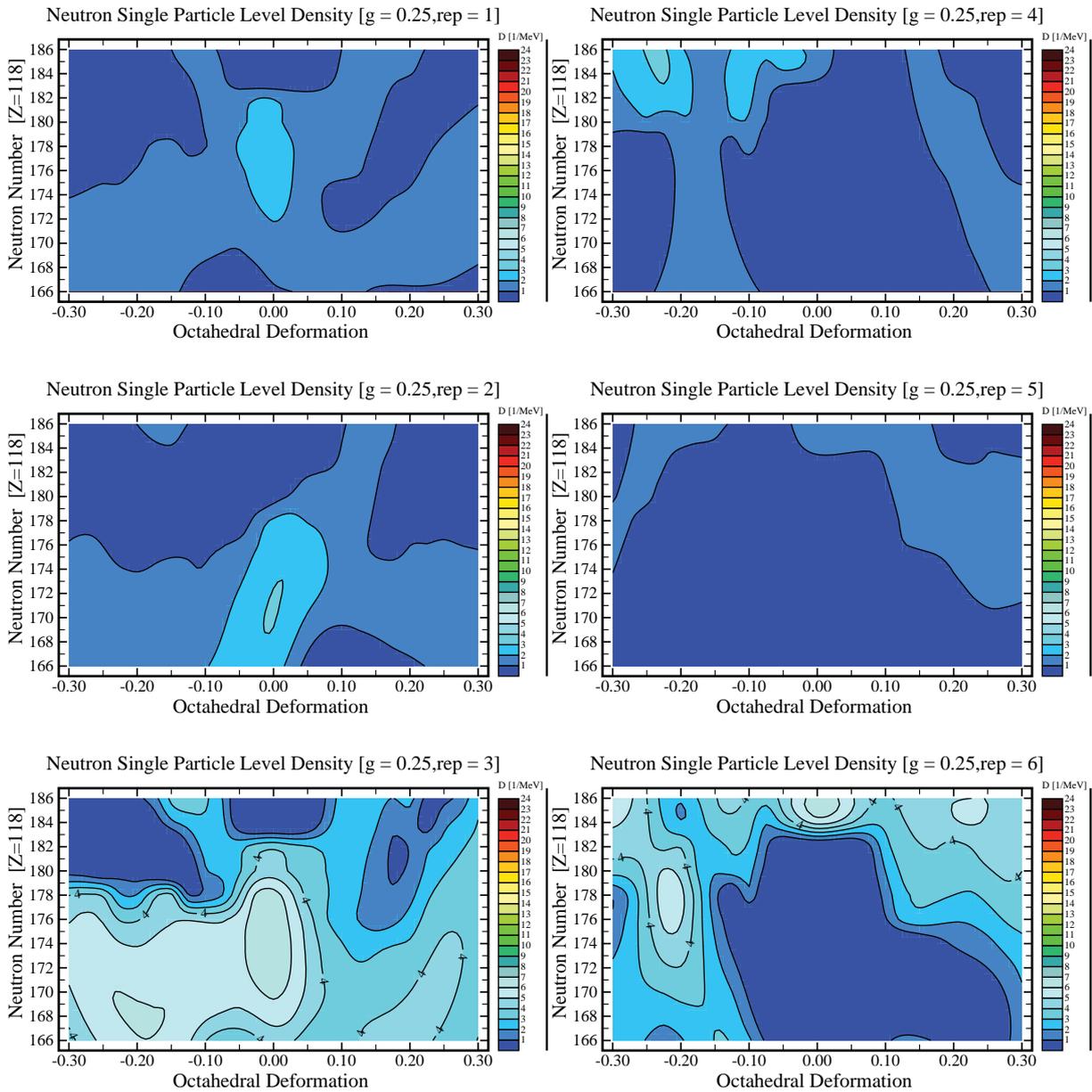


Rysunek 2.15: Poziomy energii jednocząstkowych dla neutronów w funkcji deformacji oktaedralnej w okolicach $N=176$. Reprezentacje czterowymiarowe w parzystości dodatniej oznaczone są kolorem jasnozielonym a w parzystości ujemnej kolorem ciemnozielonym.

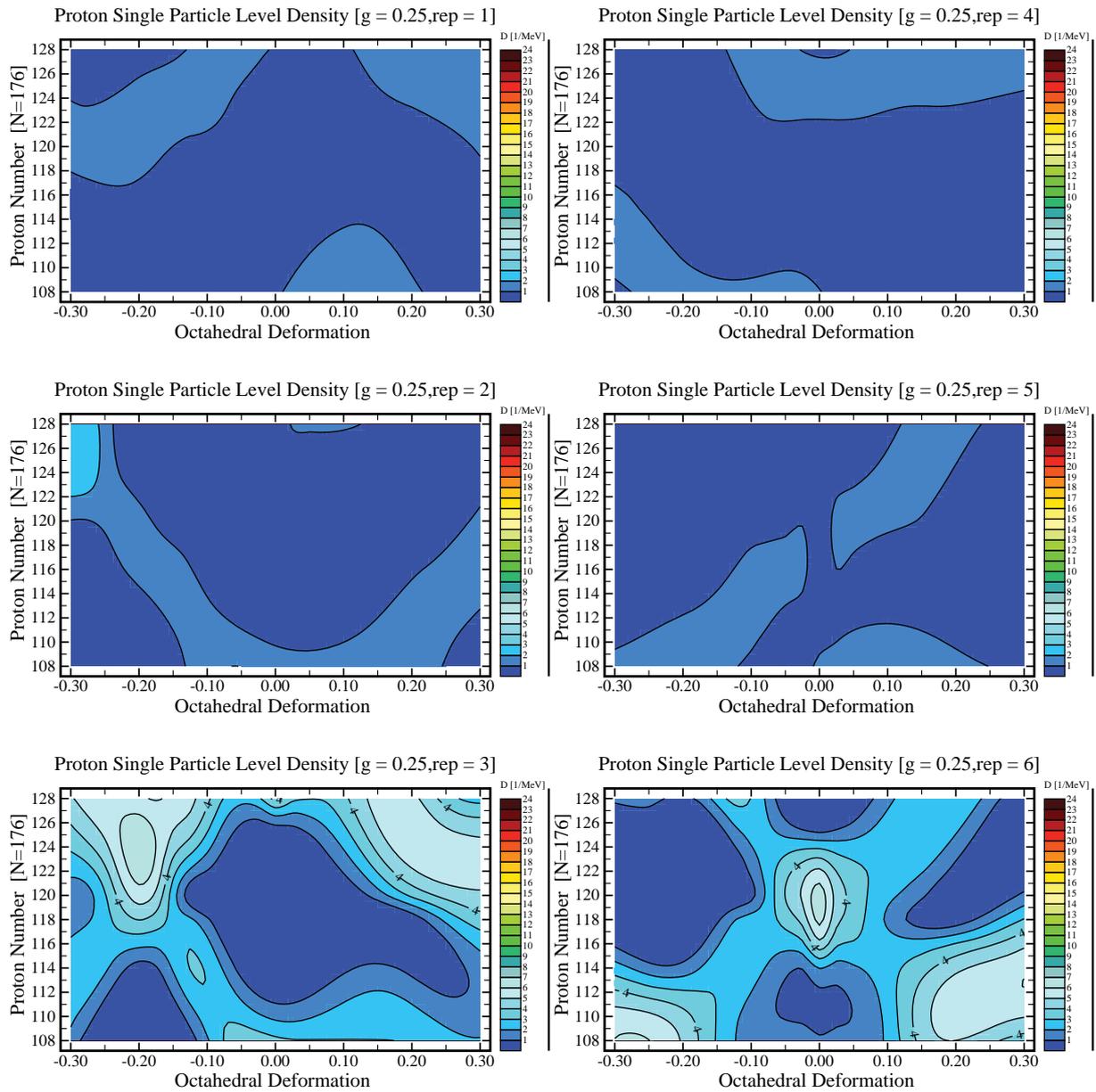


Rysunek 2.16: Gęstość poziomów zgodnie z podejściem Strutińskiego dla neutronowych poziomów energetycznych w oknie energetycznym 1.5 MeV dla $Z=126$, $N=196$) wokół poziomu Fermiego dla deformacji oktaedralnej.

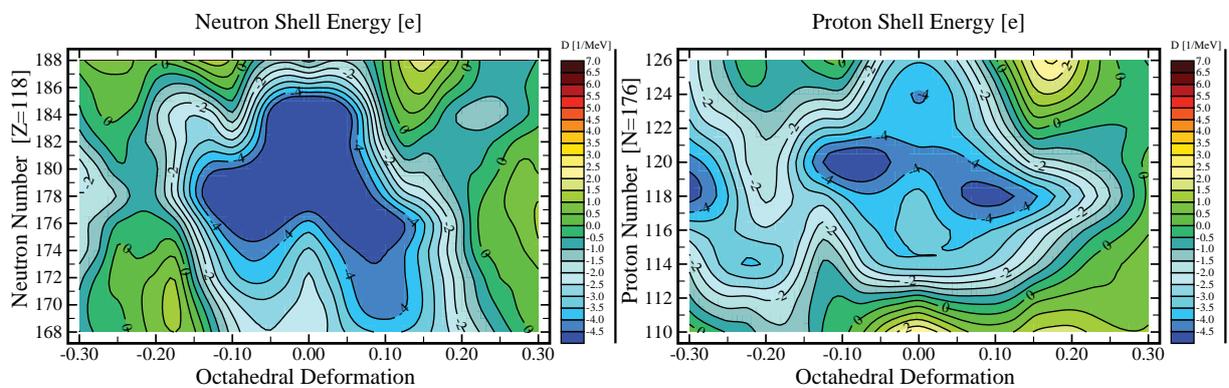
Kolejny podrozdział poszerza dyskusję o symetriach egzotycznych jąder o uwzględnienie energii pairing i obliczenia energii mikroskopowych.



Rysunek 2.19: Gęstość liczona metodą Strutińskiego dla neutronowych poziomów jednocząstkowych w oknie energetycznym 1.5 MeV dla $Z=118$ i $N=176$) wokół poziomu Fermiego dla deformacji oktaedralnej.



Rysunek 2.20: Podobny do rys. 2.19 ale dla protonów.



Rysunek 2.21: Energia powłokowa dla neutronów (lewa kolumna) i protonów (prawa kolumna) w funkcji deformacji oktahebralnej.

2.3 Energie powłokowe i pairing a symetrie związane z deformacjami oktupolowymi

Ważnym elementem dyskusji stabilności układów jądrowych są wkłady od oddziaływań pairing, które w połączeniu z energią powłokową dyskutowaną wcześniej określają pełny obraz stabilności (lub niestabilności) jądrowej. W tym rozdziale włączymy do dyskusji uwzględnienie efektów tych oddziaływań.

O ile wkłady energii powłokowej dominują efekt stabilizacji jądrowej pod wpływem oddziaływań jądrowych (i są wprost skorelowane z gęstością stanów jedno-nukleonowych), o tyle oddziaływania pairing są zazwyczaj przeciwnego znaku w porównaniu z energiami powłokowymi osłabiając w ten sposób efekty stabilizujące. Jest więc zrozumiałe, że przez porównanie skali tych odpowiadających przyczynków będziemy w stanie otrzymać pełniejszy obraz badanych dwóch tendencji.

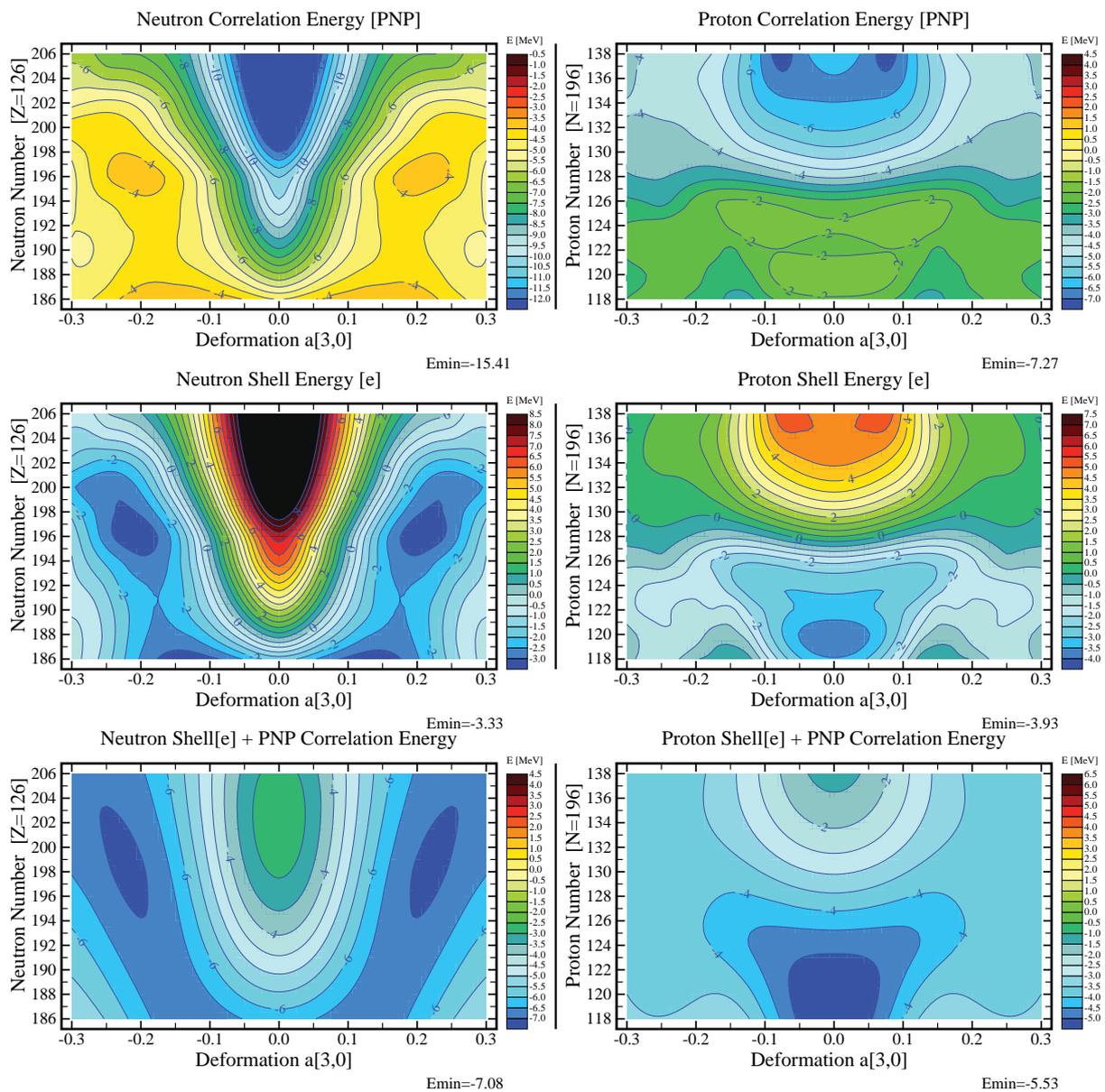
Półjakościowa dyskusja efektów gęstości (mała gęstość oznacza tendencję stabilizacji przy odpowiednich deformacjach i liczbach cząstek) doprowadziła w poprzedzających rozdziałach do wyznaczenia obszarów jąder, gdzie dyskutowane symetrie mogą być realizowane. Uwzględnienie oddziaływań pairing nie zmienia tego wniosku w żaden znaczący sposób jak jest to widoczne na Rys. 2.22, 2.23, 2.24, 2.25, gdzie przedstawiono człony energii mikroskopowej: energię korelacji pairing (*Proton/Neutron Correlation Energy*), energię powłokową (*Proton/Neutron Shell Energy*) oraz ich sumy, co pozwala na skorelowanie minimum energetycznych z odpowiednimi gęstościami poziomów jądrowych.

Na Rysunkach 2.22, 2.23, 2.24, 2.25 pokazano ewolucje tych energii w funkcji osiowych i nieosiowych parametrów deformacji oktupolowej, przez co można stwierdzić, dla jakich wartości liczb protonów i neutronów pokazują się duże minima energetyczne, oraz który parametr je generuje. Raz jeszcze potwierdza się obserwacja z poprzednich rozdziałów, że liczba $N=196$ powinna być liczbą preferowaną jeśli idzie o stabilizację w terminach deformacji oktupolowych – osiowej, gdyż w deformacji $\alpha_{30} = 0.2$ obniżenie energii makroskopowej poprzez wkład powłokowy (z pairingiem) dla neutronów wynosi $E \approx -7$ MeV (Rys. 2.22) względem energii jądra sferycznego, a alternatywnie nawet -9 MeV, gdy brana jest pod uwagę deformacja tetrahedralna $\alpha_{32} = 0.2$ (Rys. 2.24).

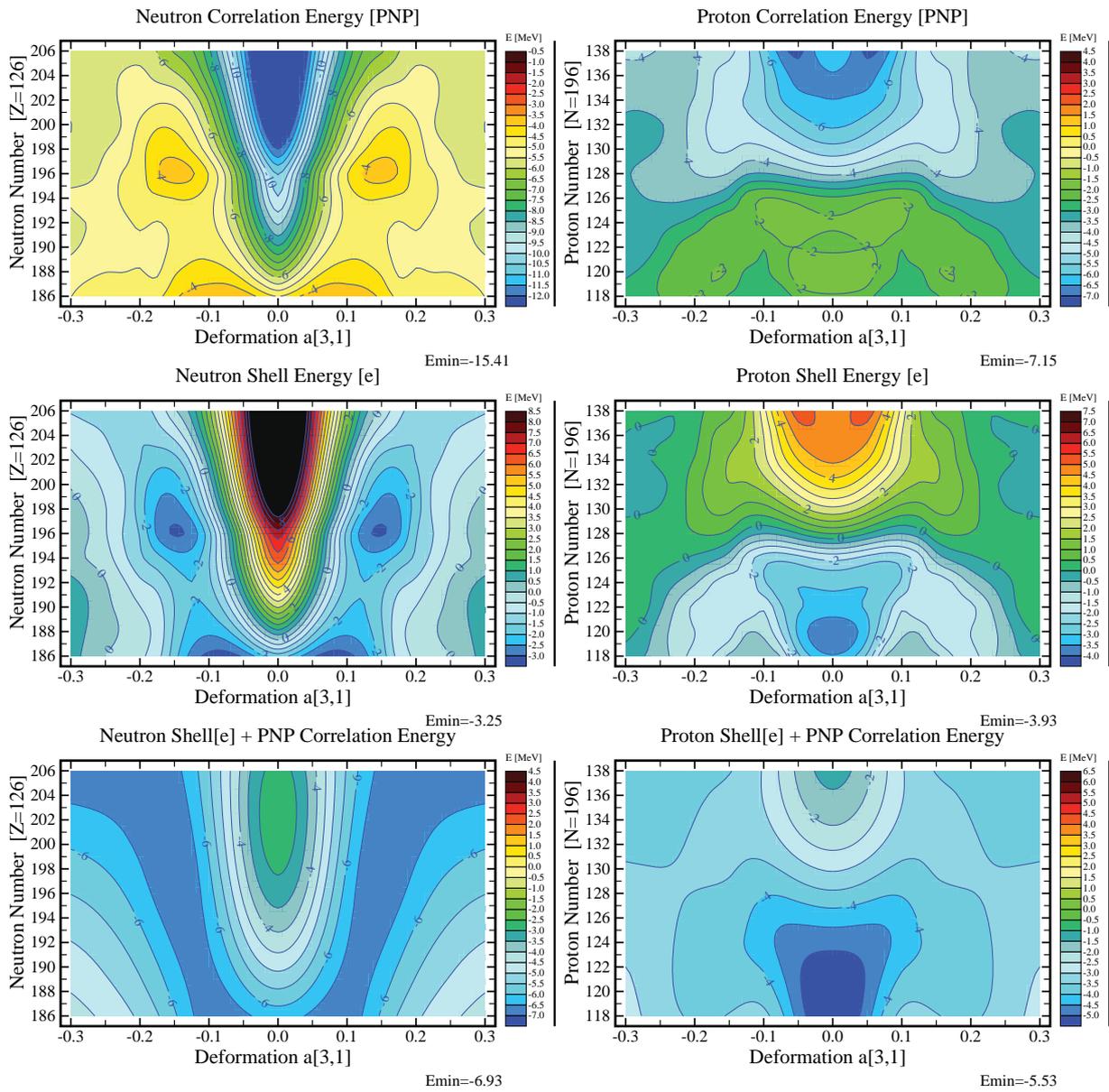
Pozostałe deformacje oktupolowe, α_{31} oraz α_{33} wnoszą porównywalne wkłady w terminach energii powłokowych, chociaż typowo o 1 do 2 MeV słabsze. To prowadzi do wniosku, że jądra, dla których ta silna podatność oktupolowa występuje są, ogólnie biorąc, silnie oktupolowo niestabilne we wszystkich czterech symetriach (typach deformacji).

Przedstawione ilustracje w pełni potwierdzają dobrze znany wniosek, że głównym członem energii mikroskopowej, który generuje minima w terminach deformacji oktupolowych jest energia powłokowa, natomiast silny pairing będzie działał w fazie przeciwnej.

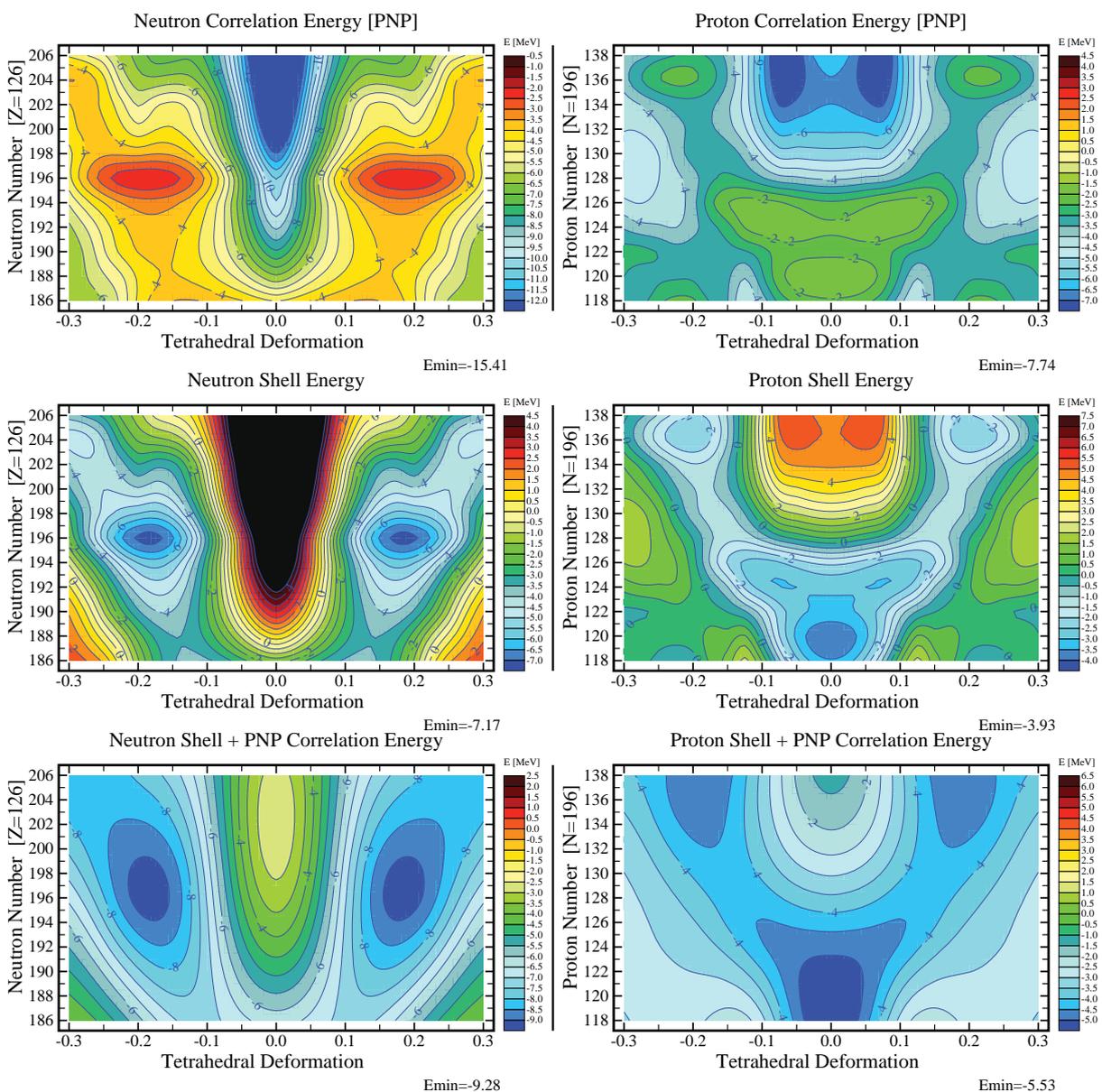
Należy podkreślić również, że deformacja tetrahedralna powoduje duże różnice w energii mikroskopowej między sąsiednimi jądrami, co prowadzi do wniosku o bardzo wybiórczym występowaniu symetrii geometrycznych na mapie nuklidów.



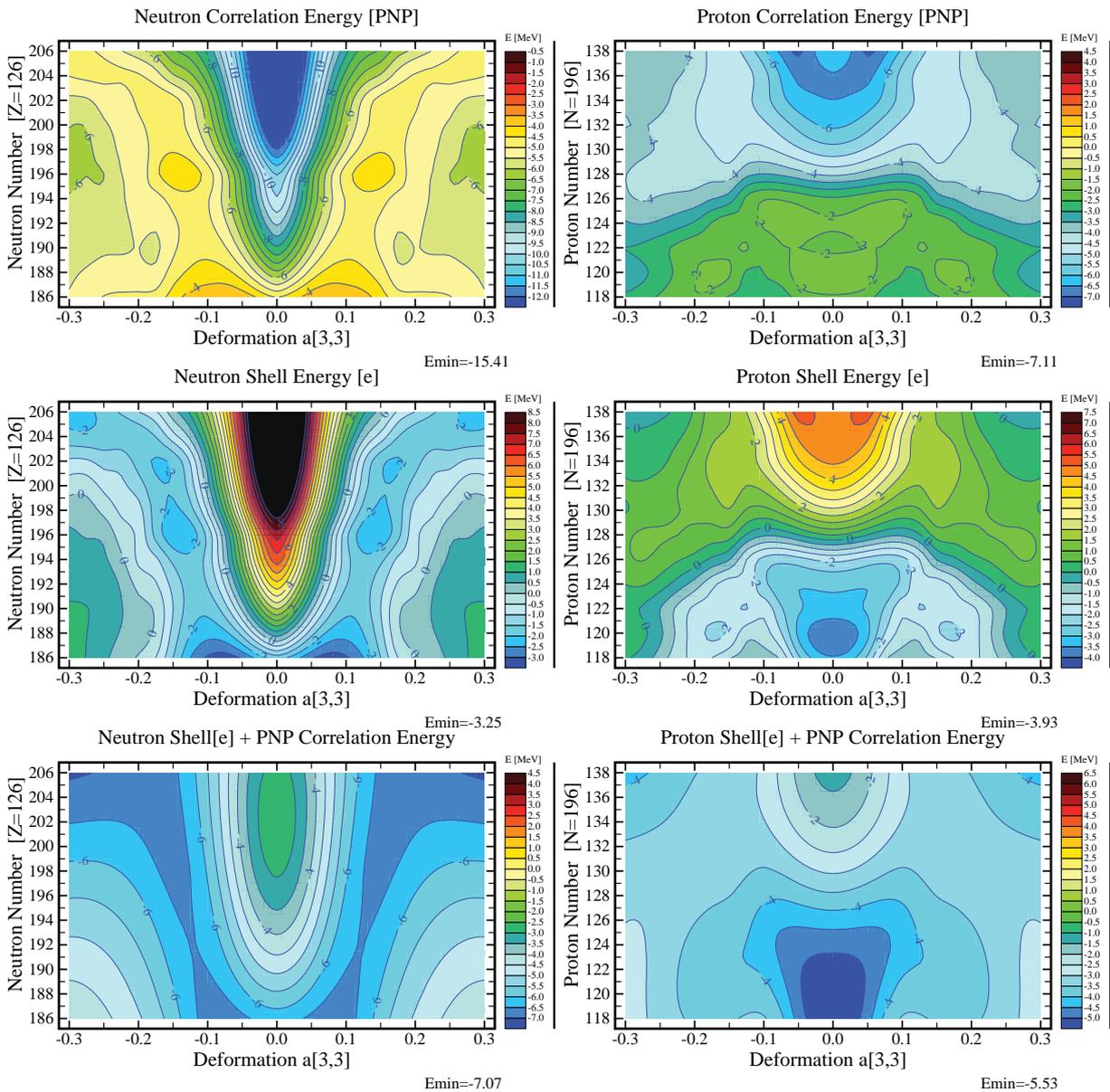
Rysunek 2.22: Energia korelacji pairing (górny), energia powłokowa (środkowy) i suma tych energii (dolny) dla neutronów (lewa kolumna) i protonów (prawa kolumna) w funkcji deformacji α_{30} .



Rysunek 2.23: Podobne do rys. 2.22 ale w funkcji deformacji α_{31}



Rysunek 2.24: Podobne do rys. 2.22 ale w funkcji deformacji α_{32}



Rysunek 2.25: Podobne do rys. 2.22 ale w funkcji deformacji α_{33}

2.4 Wyspy stabilności jądrowej na płaszczyźnie (Z, N)

Nowe wyspy stabilności tj. grupy jąder żyjących dłużej niż otaczające je (na płaszczyźnie (Z, N)) jądra atomowe, mogą być badane przy pomocy teorii grup punktowych, która jest również bardzo użyteczna do wyznaczenia odpowiadających nowym symetriom - nowych liczb magicznych. Poprzez związek między silnymi przerwami energetycznymi oraz indukowanymi przez nie liczbami magicznymi i energiami powłokowymi, patrz poprzedzające rozdziały, teoria grup punktowych pozwala na wyznaczenie obszarów, gdzie efekty energii wiązania jąder atomowych są szczególnie silne.

W ramach teorii pola średniego jedno z najbardziej intuicyjnych kryteriów stabilności jest oparte na istnieniu dużych przerw energetycznych w jednocząstkowych widmach nukleonowych. Im większa jest taka przerwa tym większa, na średnio, będzie energia potrzebna

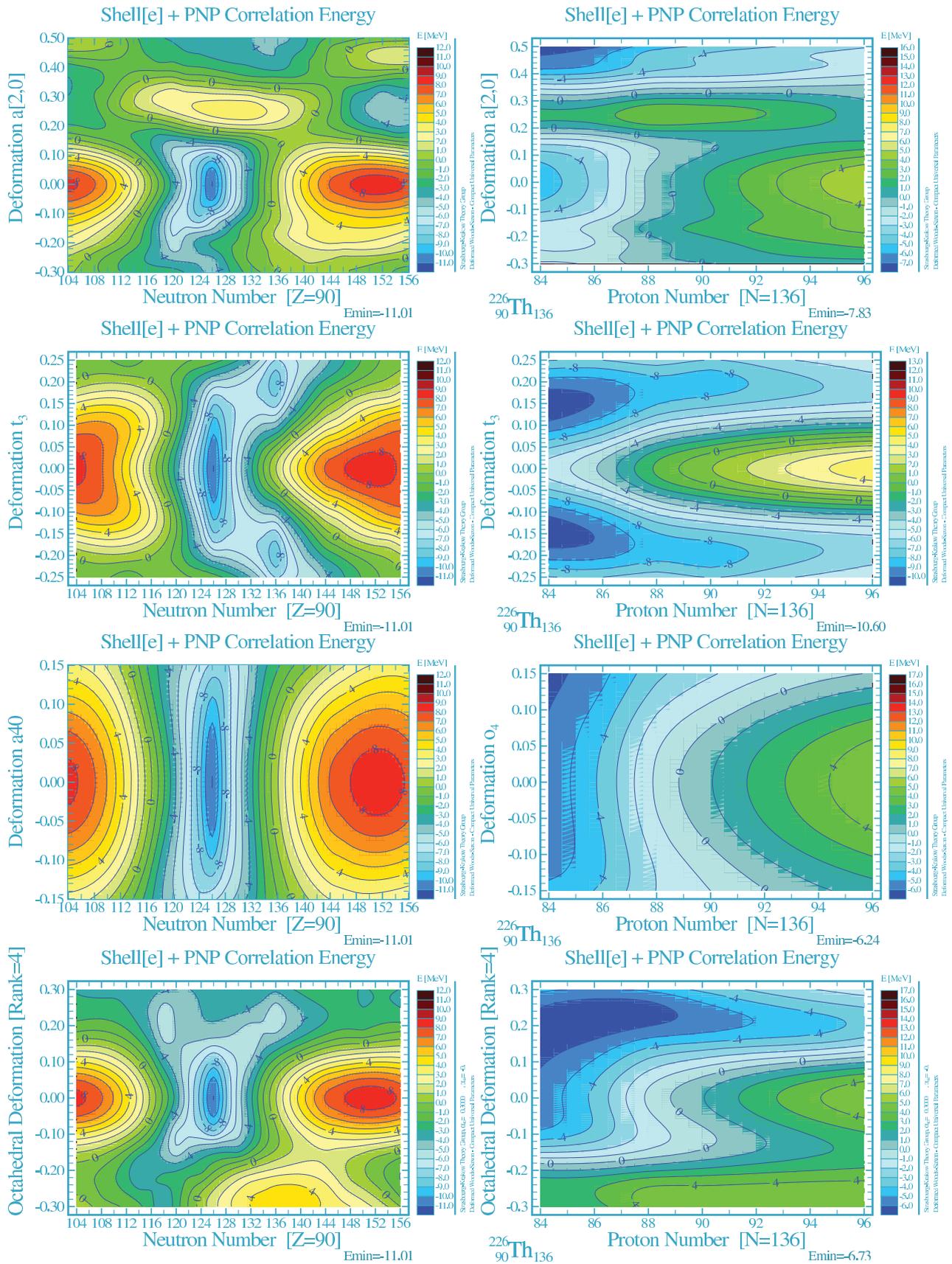
aby zniszczyć odpowiadający jej stan kwantowy poprzez reakcje jądrowe - a więc tym większa będzie stabilność jądra w odpowiadającym stanie. Jednakże, aby mogły powstać duże przerwy energetyczne odpowiadające pewnym kształtom jąder atomowych w pewnym zakresie energii, gdzie indziej w skali energii będzie musiała zwiększać się gęstość energetyczna tychże stanów. Jednym z najprostszych mechanizmów prowadzących do zwiększania gęstości poziomów jest degeneracja energetyczna w pewnym obszarze wzbudzeń, jak np. degeneracja stanów zdeformowanego osiowo oscylatora przy stosunku pólasi jak 2:1. W ogólności, inne formy degeneracji prowadzić będą również do wzmocnienia fluktuacji gęstości, a więc zwiększona będzie szansa na generowanie większych przerw międzypoziomowych, tak jak to było zilustrowane dla jąder (super)ciężkich w poprzednim rozdziale.

Opierając się na tych przesłankach w artykule [Dud07] zaproponowano ogólne podstawy matematyczne optymalizacji warunków na znajdowanie dużych przerw energetycznych w widmach jednocząstkowych. Główne kryterium tam przedstawione opiera się na własnościach grup punktowych ze szczególnie dużą liczbą reprezentacji nieredukowalnych oraz z reprezentacjami nieredukowalnymi o najwyższym możliwym wymiarze. W przypadku, gdy grupy takie są grupami symetrii hamiltonianu, wspomniane powyżej warunki implikują powstawanie stosunkowo dużych przerw energetycznych i prowadzą do wzrostu stabilności jądra.

Symetrami, które zostały przebadane zgodnie z tymi przesłankami są to symetrie: tetrahedralna i oktahedralna. Charakteryzują się one istnieniem, odpowiednio, trzech i sześciu reprezentacji nieredukowalnych, a między nimi występują reprezentacje o wymiarze 4 prowadzące do czterokrotnych degeneracji poziomów nukleonowych. Każda z tych grup punktowych generuje własne liczby magiczne, otrzymane przy pomocy realistycznego pola średniego Woodsa-Saxona. Obliczenia zostały wykonane dla wielu obszarów masowych ($Z=24-140$). Najniższy rząd symetrii tetrahedralnej może być zamodelowany przy pomocy harmonik sferycznych Y_{32} . Jeśli teraz obliczymy energie mikroskopowe z tymi deformacjami, to się okazuje, że pojawiają się efekty powłokowe silne albo bardzo silne a nawet konkurencyjne do efektów otrzymanych z tradycyjnych obliczeń sferycznych przerw energetycznych.

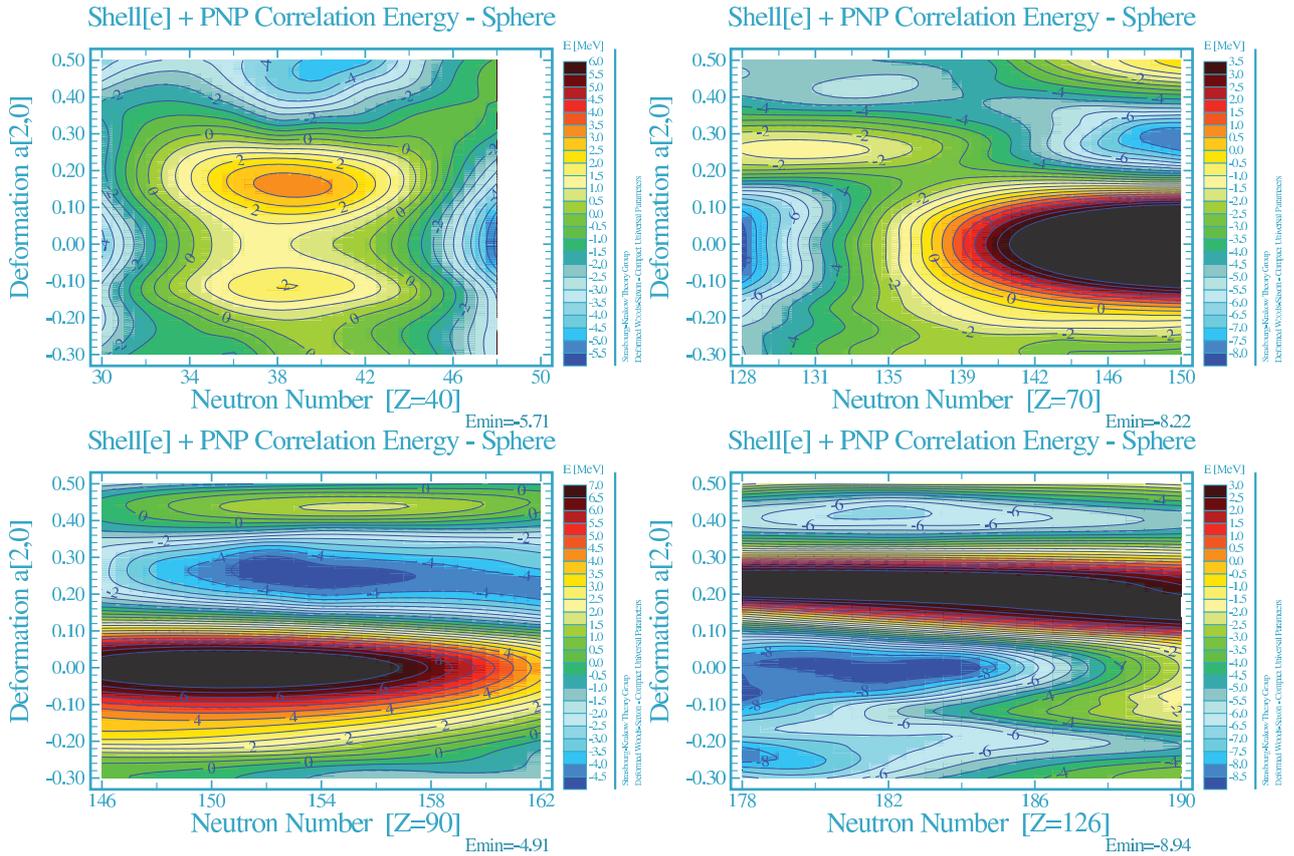
W niniejszym rozdziale rozpoczniemy dyskusję efektów powłokowych przy użyciu często stosowanego podejścia tj. poprzez wyrażenie energii powłokowej jako sumy wkładu obliczanego przy pomocy metody Strutinskiego oraz pochodzącego od energii pairing z metody rzutowania na dobrą liczbę cząstek (PNP), (Równ. 1.166). Celem pierwszych diagramów tu pokazanych będzie ilustracja wielkości amplitud wahań w skali energii do jakich prowadzić mogą energie powłokowe w warunkach maksymalizacji efektu poprzez minimalizację wspomnianych energii.

Ilustracje na rys. 2.26 przedstawiają energię mikroskopową obliczoną wzdłuż osi: α_{20} (pierwszy rząd), α_{32} (drugi rząd), α_{40} (trzeci rząd) i deformacji oktahedralnej (czwarty rząd) dla poszczególnych jąder. W przypadku deformacji $\alpha_{20} = 0.0$ istnieje duże minimum energetyczne dla magicznej liczby $N=126$, zaś w deformacji tetrahedralnej mamy konkurencyjne minima dla $N=126$ i $N=136$, przy czym te drugie są dla znacząco niezerowej deformacji tetrahedralnej, co potwierdza fakt że liczba 136 jest 'tetrahedralna' liczbą magiczną dla neutronów. W przypadku protonów istnieje minimum dla $Z=82$, rozciągające się w szeroką dolinę dla niezerowych α_{32} a deformacja oktahedralna może je jeszcze pogłębić, jeśli będziemy minimalizować energię jądra jednocześnie po deformacjach o symetriach wyższego rzędu: tetrahedralnej i oktahedralnej.



Rysunek 2.26: Energia mikroskopowa dla obszaru jąder z okolicy $Z=90$, $N=136$. Dyskusja w tekście.

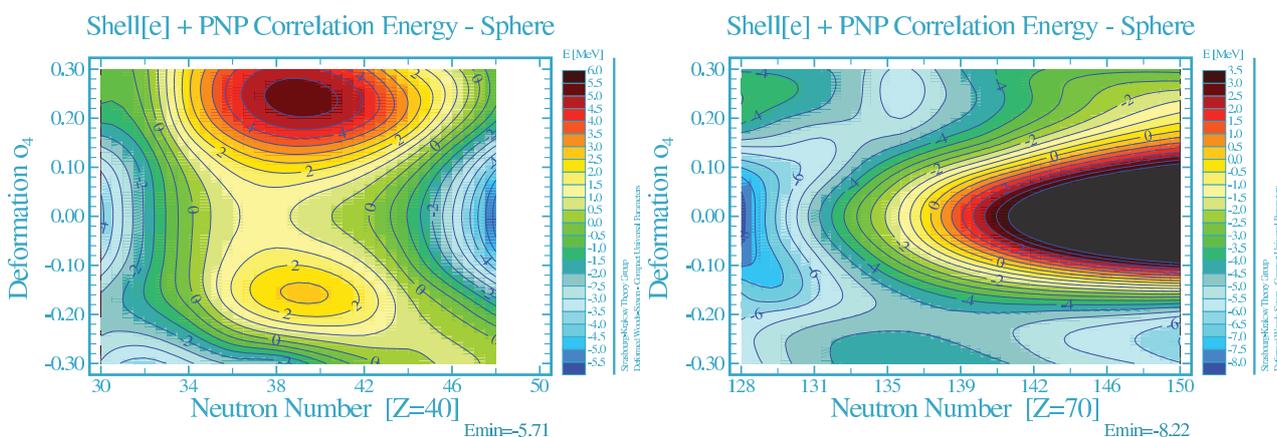
Podczas gdy zachowanie energii powłokowej dla neutronów w funkcji deformacji kwadrupolowej, jest zdominowane w oczywisty sposób sferyczną liczbą magiczną $N=126$, w przypadku deformacji tetrahedralnej zwracają uwagę silne energie wiązania w okolicy $N=136$ oraz $Z=84-90$ (w tym ostatnim przypadku w postaci dolin odchodzących płasko w kierunku ‘wschodnim na mapie’; podobne zachowanie stabilizujące daje się odczytać z obecności płaskich dolin w terminach deformacji oktahedralnej dla tych samych liczb protonów.)



Rysunek 2.27: Ilustracja porównawcza skali efektów powłokowych dla izotopów Zr, Yb, Th i jądra superciężkiego $Z=126$ w funkcji deformacji kwadrupolowej. Jądra centralne, dla których diagonalizowano hamiltonian z potencjałem WS wybrane zostały biorąc pod uwagę, że odpowiadające im liczby protonów są tetrahedralnymi liczbami magicznymi.

Obliczenia nasze, jak również innych autorów np.: [Tag13], wskazują, że szczególnie uprzywilejowanym obszarem dla symetrii tetrahedralnej jest obszar cyrkonów ($Z=40$). Należy oczekiwać, że w kilku jądrach z tego zakresu, deformacja równowagi w stanie podstawowym niesie symetrię tetrahedralną, natomiast minimum konkurencyjne ma bardzo dużą deformację kwadrupolową (superdeformacja!). Ta sytuacja jest szczególnie interesująca, gdyż jak się wydaje, w tym obszarze jąder konkurują dwie egzotyczne deformacje, jeśli idzie o stabilność w stanie podstawowym i przy niskich energiach wzbudzenia. Energia mikroskopowa będąca sumą energii powłokowej Strutinskiego i energii pairing z metody rzutowania na dobrą liczbę cząstek (PNP), (Równ. 1.166), pokazana na rysunkach 2.27 obliczona była w funkcji deformacji kwadrupolowej, z minimalizacją po parametrze deformacji α_{40} i pokazana dla szeregu izotopów cyrkonu $Z=40$. Wyniki te wskazują na istnienie silnych efektów powłokowych dla wielkich deformacji α_{20} np.: dla $N=40$ jest duże minimum przy deformacji $\alpha_{20} = 0.5$. Eksperymentalna wartość deformacji kwadrupolowej dla ^{82}Zr wynosi 0.29 ± 0.06 i patrząc na systematykę, powinna być większa dla lżejszego izotopu.

Podobnie w przypadku izotopów Th i $Z=126$ na rysunku 2.27, gdzie mamy minimum formujące się w kierunku $N=126$ dla $\alpha_{20} = 0.0$, czyli mamy jądro magiczne sferyczne, a także mniejsze minima przy $\alpha_{20} = 0.3$ dla $N=136$. Główną różnicą pomiędzy Rys. 2.26 i 2.27 jest właśnie złożenie dwóch lub więcej parametrów deformacji i minimalizacja energii mikroskopowej. Rysunki 2.27 i 2.28 to tylko akademicki przykład jak możemy śledzić pojawianie się obszarów jąder o szczególnie silnych efektach powłokowych. Deformacje dające kształty jąder osiowosymetrycznych pozwalają na potwierdzenie wszystkich klasycznych liczb magicznych, a nowe liczby magiczne związane z deformacjami o symetriach wyższych rzędów pojawią się na mapkach takich jak rys. 2.28, gdzie energie mikroskopowe przedstawione są w funkcji deformacji oktahedralnej.

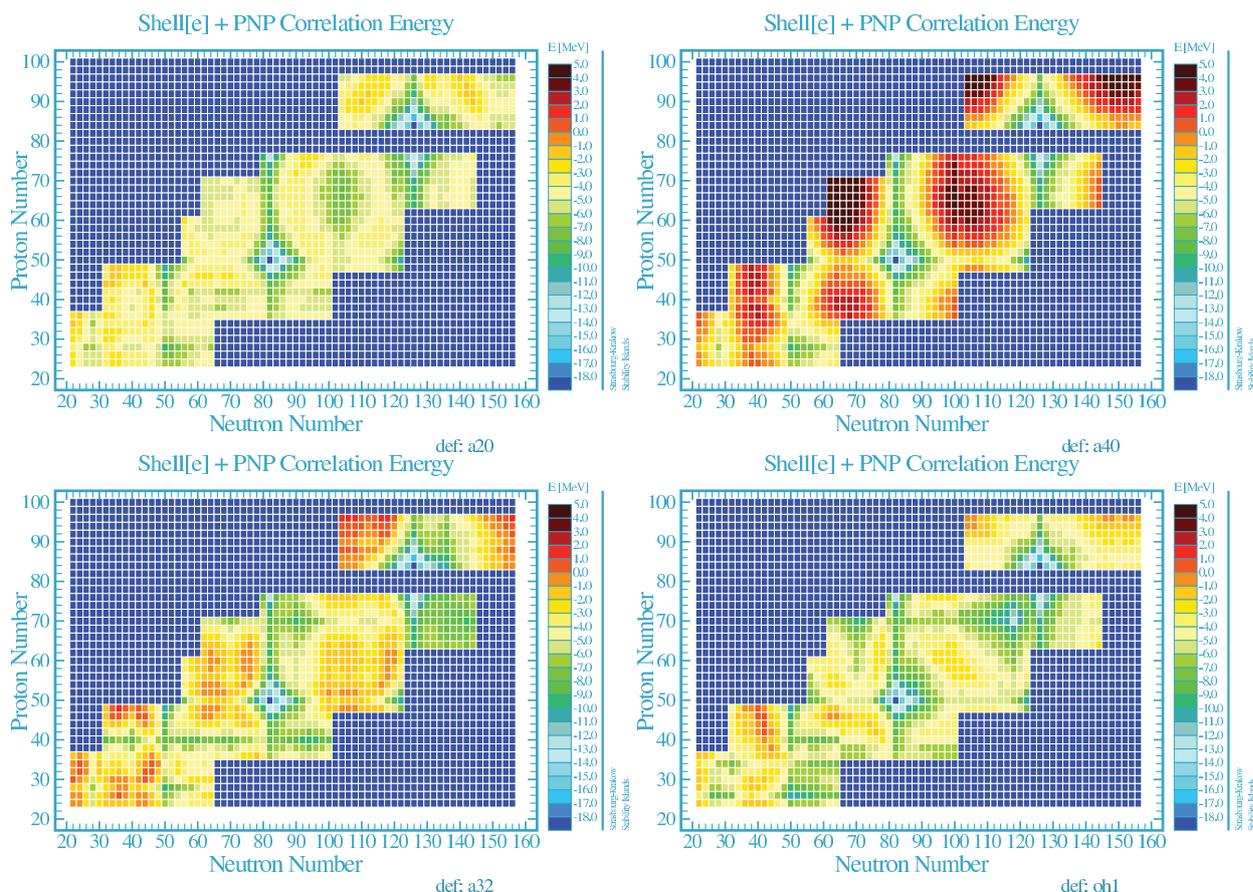


Rysunek 2.28: Mapy efektów powłokowych dla izotopów Zr (lewy) i Yb (prawy) w funkcji deformacji oktahedralnej, minimalizowana po deformacji tetrahedralnej.

Ilustracje dyskutowane do tej pory miały za cel wskazanie na typowe zachowanie energii powłokowych w kilku charakterystycznych obszarach jąder atomowych – głównie kierując się kryterium poszukiwania i analizowania efektów symetrii tetrahedralnej oraz oktahedralnej. Posługując się tymi i podobnymi wynikami możemy zaprezentować rezultaty analizy stabilności w postaci bardziej skondensowanej, ilustrującymi porównawczo efekty stabilności na płaszczyźnie (Z,N) .

Na Rys. 2.29 każdy prostokąt przedstawia energię mikroskopową danego jądra otrzymaną poprzez minimalizację po współczynnikach deformacji α_{20} , α_{40} , α_{32} i oktahedralnej. Główne liczby magiczne takie jak $Z(N)=50,82,126$ są widoczne niezależnie od typu deformacji, która jest studiowana. Energia minimalna zależy w dużej mierze od uwzględnienia deformacji wyższych rzędów, takich jak heksapolowe czy też o symetriach egzotycznych: tetrahedralnej i oktahedralnej. Tradycyjnie w celu otrzymania energii stanu podstawowego, uwzględniane są deformacje α_{20} , α_{22}, α_{40} , oraz osiowe wyższego rzędu a złożenie deformacji o wyższych symetriach powinno pozwolić na znalezienie jąder o mniejszych energiach mikroskopowych, niż ich sąsiedzi na płaszczyźnie (Z,N) . Umożliwiło to znalezienie obszarów, gdzie energia mikroskopowa jest mniejsza od energii mikroskopowej jądra sferycznego.

Na koniec tego podrozdziału pokazany jest Rys. 2.30, z artykułu [VII], gdzie zaznaczono obszary jąder, które mogą się okazać bardziej stabilne, niż dotychczas uważano, właśnie ze względu na włączenie do obliczeń współczynników deformacji, zapewniających jądom szczególne kształty: symetrii tetrahedralnej lub/ oraz oktahedralnej. Na Rys. 2.30, są przedstawione różnicę energii powłokowej otrzymanej przez minimalizację po kwadrupolowych i heksadekapolowych deformacjach minus energie powłokowe z minimalizacją po



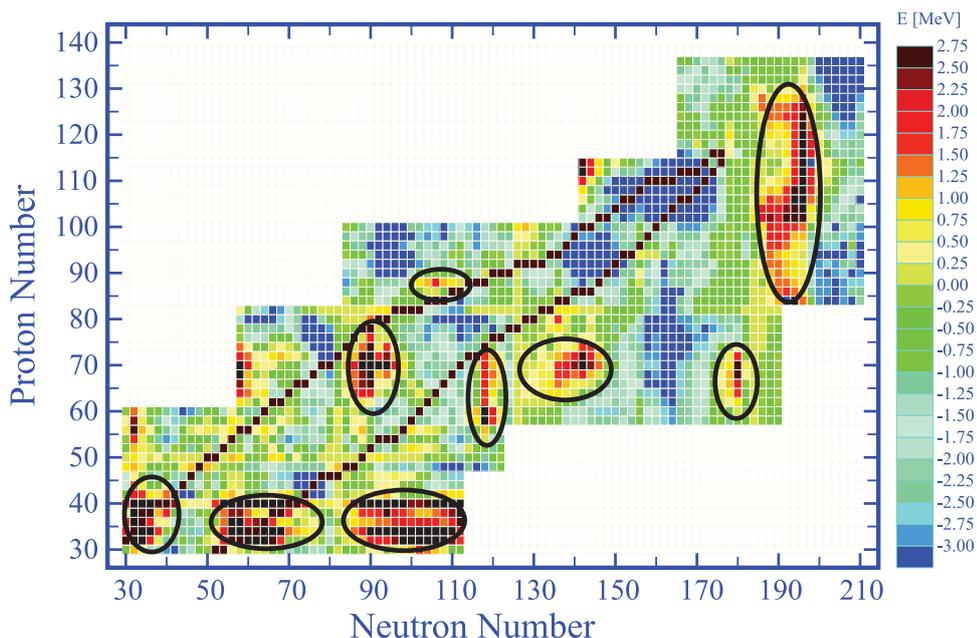
Rysunek 2.29: Minima energii mikroskopowej zrzutowane na płaszczyznę (Z,N) dla wszystkich obszarów masowych przy założeniu minimalizacji po deformacjach: kwadrupolowej, heksadekapolowej, tetrahedralnej i oktahedralnej. Wyspy stabilności występują dla Z,N=28, 50, 82, 126.

tetrahedralnych i oktahedralnych deformacjach ($E_{min}(\alpha_{20}, \alpha_{40}) - E_{min}(\alpha_{32}, \alpha_{40,44})$). W ten sposób dodatnie energie znajdujące się głównie na obszarach obwiedzonych czarnymi liniami, reprezentują efekty powłokowe pochodzące z deformacji tetrahedralnych i oktahedralnych silniejsze niż pochodzące z deformacji klasycznych. Kropkowane linie pokazują zakresy jąder znanych eksperymentalnie. Jak można zauważyć wiele z nowych wysp stabilności (obwiedzonych czarnymi liniami w celu zwrócenia uwagi) leży poza tymi granicami, szczególnie w obszarze neutrono nadmiarowych jąder.

2.5 Przykłady zachowania pełnej energii jądra: Jądra supercieężkie

Energia całkowita złożona z energii makroskopowej i energii mikroskopowej, która była ilustrowana do tej pory, powinna w ogólności odzwierciedlać sytuację, która opisana została w poprzednich rozdziałach, ponieważ energia makroskopowa jest gładką funkcją deformacji a zatem wszelkie fluktuacje pochodzą wyłącznie od części powłokowej. Właśnie energia całkowita jest wielkością porównywalną z doświadczeniem.

Ilustracje wpływu deformacji egzotycznych na energię całkowitą jąder rozpoczniemy od rys. 2.31, którego lewa część pokazuje zmiany energii całkowitej w funkcji deformacji



Rysunek 2.30: Wyspy stabilności oszacowane przez badanie efektów powłokowych wynikających z deformacji klasycznych i symetrii wyższych rzędów [VIII]. Kropkowane linie pokazują zakresy jąder znanych eksperymentalnie. Czarne linie wskazują obszary o największym wpływie deformacji egzotycznych (tetrahedralnych i oktahedralnych) na energię mikroscopową czyli potencjalne nowe wyspy stabilności. Skopiowane z artykułu [VII].

kwadrupolowej dla izotopów $Z=126$. Dla stosunkowo małych liczb neutronów, widoczne są trzy minima (dla $N=186-194$) a dla najcięższych jąder tu przedstawionych, występuje tylko jedno minimum i bardzo szeroka bariera na rozszczepienie. Porównując zachowanie energii dla izotonów można zauważyć, że dla $Z=118-126$ występuje współzawodnictwo kształtów prolate i oblate, a dla jąder o wyższym Z , występują tylko kształty oblate. Celem tego porównania jest nie tyle koncentracja nad maksymalną dokładnością opisu energii (taki dokładny opis wymagałby uwzględnienia większej liczby parametrów deformacji) ale raczej porównanie wiodących efektów powłokowych wzdłuż ścieżek najniższej pełnej energii jądra. Zaletą takiego porównania jest to, że efekty powłokowe przy różnych kombinacjach Z oraz N są porównywane przy, w dobrym przybliżeniu, realistycznych kształtach (a co za tym idzie i symetriach) rozważanych jąder atomowych. Zwraca uwagę istnienie charakterystycznych punktów ‘węzłowych’, w pobliżu których przecinają się liczne krzywe. W okolicy tych szczególnych punktów, energie powłokowe są często bliskie sobie (i nie odległe od zera.) Analogiczna struktura przedstawiona jest dla izotopów wybranych jąder superciężkich po prawej stronie omawianego rysunku, przy $N=196$.

Na rysunku 2.32 przedstawiona została ewolucja energii całkowitej w funkcji deformacji nieosiowej γ , dla ustalonego wydłużenia jądra $\beta = 0.25$. Jak widać z tego porównania, izotopy pierwiastka $Z=126$ przy $N=186-196$ przybierają, zgodnie z obliczeniami, kształt oblate ($\gamma = 60^\circ$), a pozostałe - są nieczułe na tą deformację. Oznacza to, że w rozważanym obszarze masowym, uwzględnienie deformacji nieosiowej kwadrupolowej może obniżyć energię jądra nawet o 6 MeV. Minima energetyczne, gdzie deformacja tetrahedralna odgrywa najważniejszą rolę, zostały znalezione (rys. 2.33) w obszarze jąder superciężkich od $Z=118$ i $N=190$ aż do $N=196$ z do $Z=126$.

Jednym z obszarów jąder superciężkich często dyskutowanym w literaturze, jest ob-

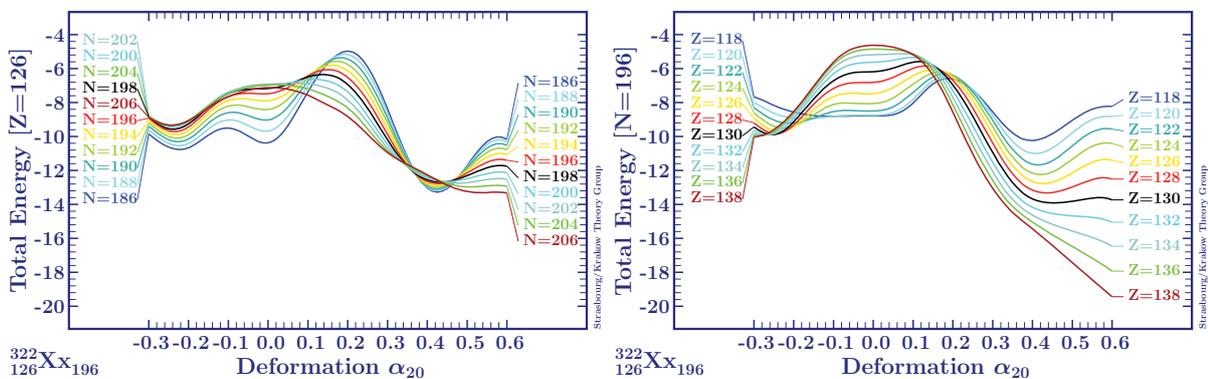
szar z okolic sferycznych liczb magicznych $Z=114$ i $N=164$. Ponieważ odpowiadające temu obszarowi jądra atomowe są względnie często badane, jednym z pytań, które można sobie postawić, jest jakim rozkładom mas fragmentów rozszczepienia (symetrycznym czy też asymetrycznym) odpowiadać będzie proces rozszczepiania tych jąder – gdyby taki mechanizm został wybrany do identyfikacji zdarzeń jądrowych.

Wokół $\alpha_{20} = 0.4$ istnieje rozległa dolina w deformacji oktupolowej. Ta niestabilność pojawia się dla $Z=100$ i $N=164$ ale dla cięższych pierwiastków obserwowana jest w regionie $N=172$. Niestabilność dla α_{30} przy superdeformacji ($\alpha_{30} > 0.6$) była badana w [Cwi94] w regionie aktywności: ^{220}Rn , ^{222}Ra , ^{232}Th i ^{234}U . Na rysunkach 2.34 widoczna jest olbrzymia dolina dla niezerowej deformacji oktupolowej ale bariera między dodatnimi i ujemnymi parametrami oktupolowymi jest bardzo niska, co sugeruje, że rozkłady masy fragmentów rozszczepienia będą się charakteryzować płaskimi krzywymi – bez jednoznacznego uprzywilejowania dwóch mas charakterystycznych.

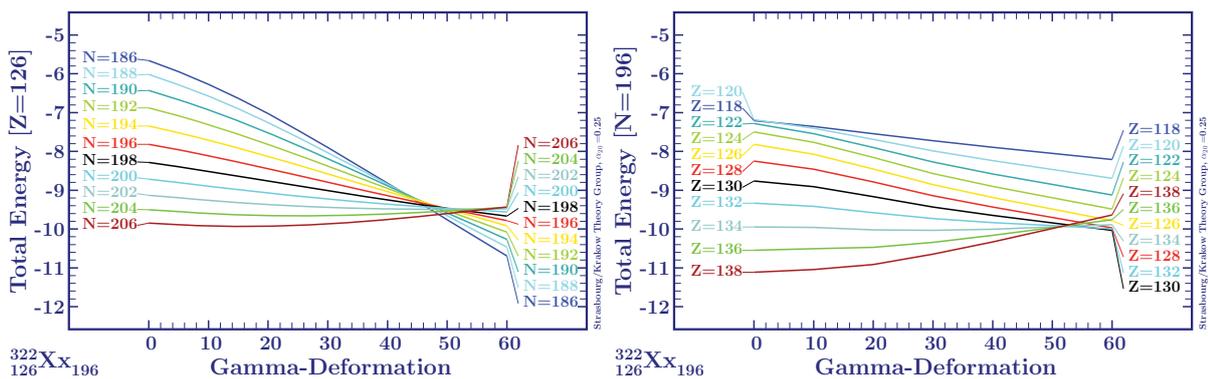
Dla $Z > 108$ i $N \approx 172$ obliczenia z deformacją tetrahedralną dają niższą energię, niż gdy bierze się pod uwagę osiową deformację oktupolową, co widać porównując mapy energii z Rys. 2.34 (prawa i lewa kolumna) dla odpowiednich jąder.

Uwaga:

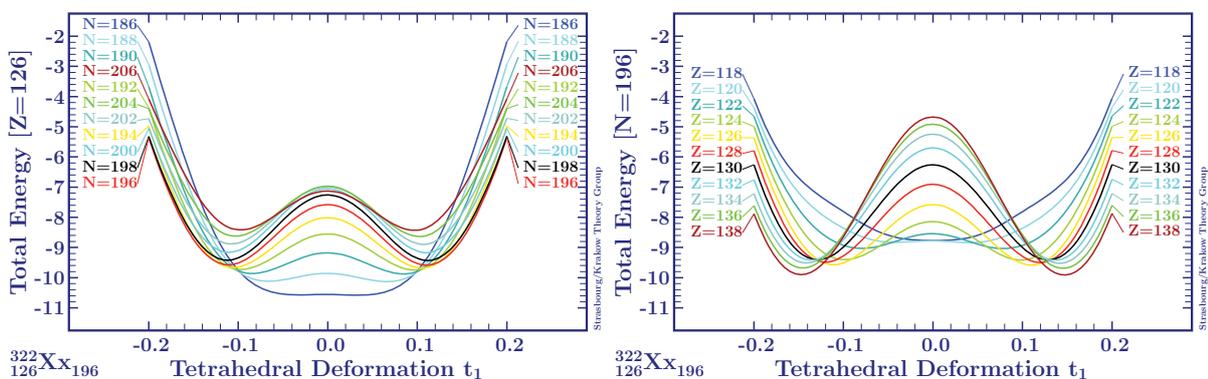
Dyskusja wpływu nieosiowych parametrów oktupolowych na powierzchnie energii potencjalnej ostatnio była prowadzona też w [Jac10, Jac11] a wyniki tam przedstawione różnią się ze względu na różny sposób liczenia energii makroskopowej i energii pairing oraz zastosowanie minimalizacji po 10 parametrach deformacji. Zostało potwierdzone, że obszar jąder superciężkich jest podatny na efekty powłokowe ale nie zaobserwowano globalnych minimów tetrahedralnych.



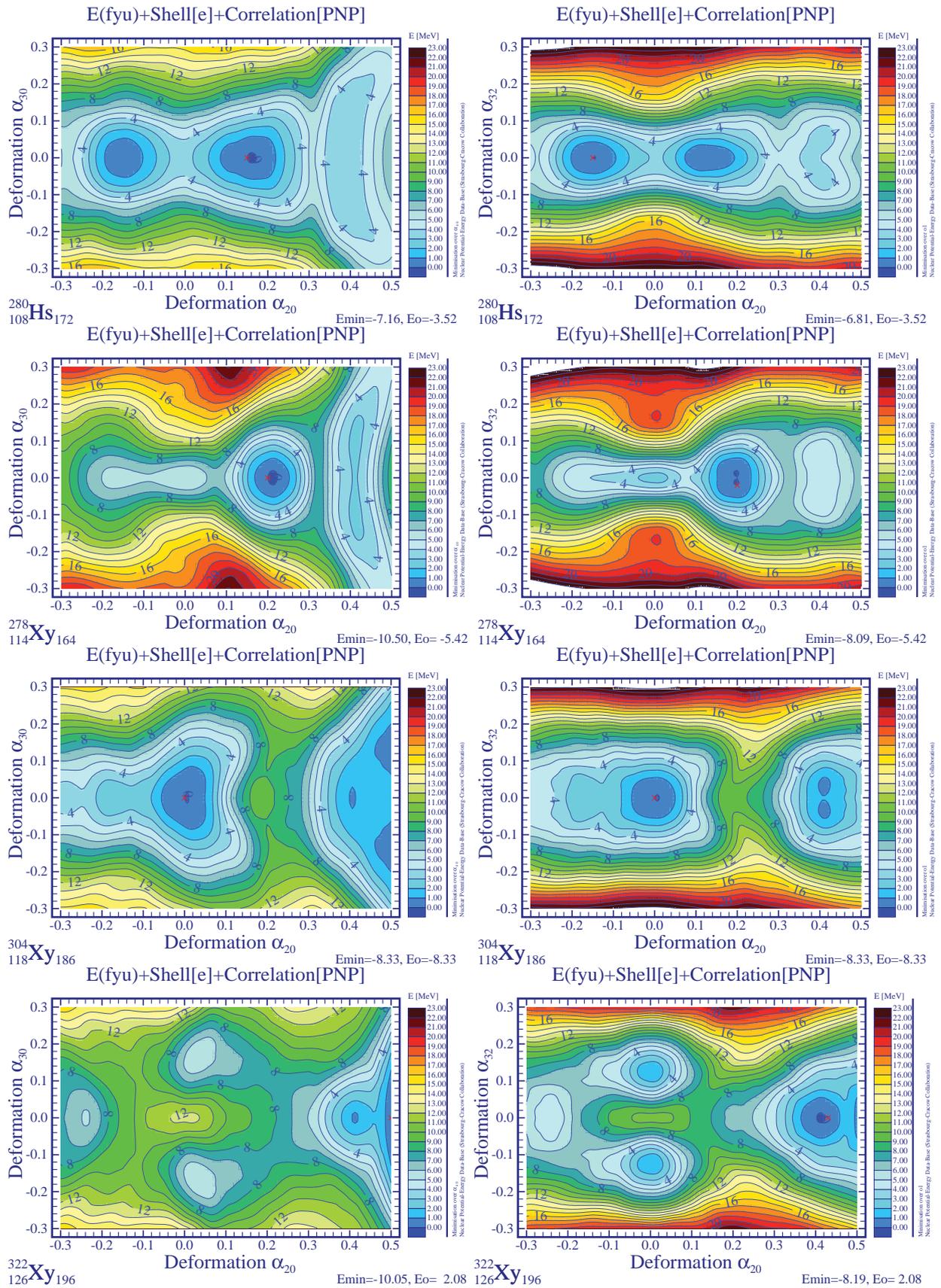
Rysunek 2.31: Energia całkowita dla izotopów $Z=126$ (lewy) i izotonów $N=196$ (prawy) względem parametrów deformacji kwadrupolowej.



Rysunek 2.32: Podobny do Rys. 2.31 ale dla deformacji nieosiowej γ dla ustalonego wydłużenia jądra $\beta = 0.25$.



Rysunek 2.33: Podobny do Rys. 2.31 ale w funkcji deformacji tetrahedralnej



Rysunek 2.34: Niestabilność oktopolowa dla superdeformacji kwadrupolowej. Mapa energii całkowitej na płaszczyźnie $\alpha_{30}(\alpha_{20})$ z minimalizacją po α_{40} (lewa kolumna) oraz na płaszczyźnie $\alpha_{32}(\alpha_{20})$ z minimalizacją po deformacji oktahebralnej dla $Z = 108, N = 172, Z = 114, N = 164, Z = 118, N = 186$ i $Z = 126, N = 196$.

2.6 Pasma rotacyjne a kształty egzotyczne

W poprzednich rozdziałach omówione zostały pokrótce tematy związane z obliczaniem energii całkowitej w funkcji deformacji jądra bez uwzględnienia rotacji. W przypadku metody mikroskopowo-makroskopowej rotację możemy uwzględnić poprzez wprowadzenie przybliżenia *cranking* (ang. ‘*cranking*’). Przybliżenie *cranking* było dyskutowane w podrozdziale 1.4.

Występuje ono w dwóch wariantach:

1) Przybliżenie pola średniego, lub 2) Przybliżenie pola średniego z uwzględnieniem oddziaływań *pairing*. W tym ostatnim przypadku odpowiadająca teoria jest znana w literaturze pod nazwą *Cranking Hartree-Fock Bogolyubow Method* (rozdz. 1.4.2). W niniejszej monografii zastosujemy tę drugą metodę, ponieważ uwzględnienie oddziaływań *pairing* prowadzi do bardziej realistycznego opisu.

Celem tego rozdziału jest ilustracja jakiej dokładności opisu należy oczekiwać w przypadku stosowania fenomenologicznego pola średniego z jednoczesnym uwzględnieniem jądrowej rotacji kolektywnej.

Powierzchnie energii potencjalnej, dyskutowane w poprzednim rozdziale pozwalają na otrzymanie deformacji jądra w stanie podstawowym, odpowiadającemu minimum globalnemu energii, a także deformacji w stanach wzbudzonych. Pasma rotacyjne przypisane deformacji kwadrupolowej a oparte na stanach podstawowych jąder parzysto-parzystych można znaleźć w szeregu jąder a ich głównym wyznacznikiem jest sekwencja spinów i parzystości ($I^\pi = 0^+, 2^+, 4^+, 6^+, \dots$) oraz w przybliżeniu paraboliczna zależność energii w funkcji spinu [Boh75]. Cechą charakterystyczną pasm rotacyjnych oktapolowych tzw. jednofononowych jest natomiast ujemna parzystość. W przypadku pasm opartych na stanach o deformacji tetrahedralnej, spodziewane było zachowanie podobne do pasm oktapolowych, przy czym przejścia E2 pomiędzy najniższymi stanami powinny zniknąć lub ich intensywność powinna być bardzo mała [VIII, XV].

Ostatnio opublikowano [Tag13] także wyniki dotyczące pasm rotacyjnych dla jąder z okolic ^{160}Yb otrzymane dla deformacji tetrahedralnej, ale za pomocą metody pola średniego, przy pomocy rzutowania momentu pędu i parzystości.

Eksperymentalne udowodnienie istnienia stanów tetrahedralnych powinno przede wszystkim polegać na znalezieniu pasm rotacyjnych bez przejść E2. Taki przypadek jest łatwy do udowodnienia, gdyż rozkład materii jądrowej z symetrią tetrahedralną generuje zerowy moment kwadrupolowy, podczas gdy jądro jest dobrze zdeformowane i jego orientację w przestrzeni można dobrze zdefiniować. Oznacza to obecność rotacyjnego rozkładu kolektywnych poziomów energetycznych i brak przejść E2. Z jednej strony istnieje wiele pasm, które można przypisać symetrii tetrahedralnej w jądrach, które uznajemy za podwójnie magiczne ale problem w tym, że brak przejść E2 może być też spowodowany istnieniem bardzo silnych przejść E1, które silnie konkurują z przejściami E2. Ponadto ostatnie badania grupy lubelskiej nad zmieszaniem stanów kwantowych [Goz10], pokazują, że warunek znikania przejść E2 nie koniecznie musi być spełniony, gdyż kształt z niewielką domieszką deformacji kwadrupolowej, nadal może posiadać symetrie wyższych rzędów.

Dane doświadczalne użyte w tym rozdziale, pochodzą w większości z bazy danych energii poziomów wzbudzonych i ich charakterystyk, stworzonej w oparciu o bazę danych NNDC [NNDC] przez grupę strasburską na potrzeby kolaboracji TETRANUC dla aktywności ‘Actinide Data Base’ ale obejmującej cały obszar jąder od ziem rzadkich do aktywności.

Najprostszymi wielkościami efektywnymi opisującymi pasma rotacyjne są tzw. kinematyczny moment bezwładności $\mathcal{J}^{(1)}$ i dynamiczny moment bezwładności $\mathcal{J}^{(2)}$ zdefinio-

wane jako:

$$\mathcal{J}^{(1)} = \frac{\hbar I_y}{\omega} = \hbar^2 I_y \left[\frac{dE}{dI_y} \right]^{-1} \quad (2.8)$$

$$\mathcal{J}^{(2)} = \hbar \frac{dI_y}{d\omega} = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E}{dI_y^2} \right]^{-1} \quad (2.9)$$

gdzie: I_y - moment pędu wzdłuż osi rotacji, która poprzez konwencję jest wybrana jako oś O_y w systemie rotującym, ω - częstość rotacji, E - energia poziomu rotacyjnego.

Do testu metody dla pasm rotacyjnych w obszarze aktynowców można użyć bogatej bazy danych eksperymentalnych zebranych dotąd w literaturze. Tutaj posłużymy się kilkoma przykładami dot. w szczególności pasm oktopolowych (tzw. octupole vibrational bands).

Pierwszym testem metody kranking jest odtworzenie staggeringu poziomów rotacyjnych w jądrze Th^{228} i porównanie z wynikami opublikowanymi w pracy [Bon05] w analitycznym modelu kwadrupolowo-oktopolowy (*analytic quadrupole octupole axially symmetric model (AQOA)*), a także danymi doświadczalnymi. Staggering to przesunięcie w energii pasm o spinach parzystych (widmo kwadrupolowe) względem pasm o spinach nieparzystych (widmo oktopolowe).

Na rysunku Rys. 2.35 (lewy), skopiowanym z pracy [Bon05], przedstawiona jest energia poziomu o spinie L , podzielona przez energię jądra o spinie równym 2, gdzie $R(L) = E(L)/E(2_1^+)$. Tak samo dla poziomów o spinach parzystych jak i nieparzystych. Energia poziomu o spinie L jest to suma energii poszczególnych stanów od 1 do L . Na rysunku 4 z tej samej pracy [Bon05] (Rys. 2.35, prawy) jest pokazane względne przemieszczenie się poziomów o ujemnej i dodatniej parzystości $\Delta E(L)$ (tzw. "staggering"), gdzie do wzoru

$$\Delta E(L) = E(L) - \frac{E(L-1) + E(L+1)}{2} \quad (2.10)$$

przyjmuje się L - spiny nieparzyste.

Do badania efektu staggeringu wzięte zostało jądro ^{228}Th . Rysunek 2.36 pokazuje zmianę energii poszczególnych poziomów o parzystości dodatniej i ujemnej należących do pasm oktopolowego i opartego na kwadrupolowym stanie podstawowym. Niebieskie kwadraty to dane eksperymentalne, które są dobrze odtworzone przez obliczenia teoretyczne (czerwone kółka). Obliczenia teoretyczne w modelu kranking zostały wykonane dla deformacji $\alpha_{20} = 0.26$ - by odtworzyć pasmo kwadrupolowe a dla pasma oktopolowego z $\alpha_{30} = 0.12$, które to wartości zostały odczytane z map energii całkowitych jako deformacje minimów lokalnych bądź globalnych, pokazanych na Rys. 2.37.

Tabela 2.1 pokazuje wartości energii poziomów teoretycznych i doświadczalnych [Art97], gdzie $\Delta E(L)$ to względne przesunięcie poziomów o parzystości ujemnej i dodatniej, pozwala na oszacowanie wielkości staggeringu. Porównanie tej wielkości wyliczonej z widma doświadczalnego z teoretycznymi przewidywaniami pokazuje, że teoretyczny staggering zdefiniowany w równaniu 2.10 jest większy do około 10% ale sam fakt odtwarzania danych eksperymentalnych jest bardzo pozytywny.

Energia całkowita Th^{228} przedstawiona na płaszczyźnie β, γ (rys. 2.37, lewy) i na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ pozwala na oszacowanie deformacji jądra w minimum czyli w stanie podstawowym i w stanach wzbudzonych a co za tym idzie także na liczenie pasm rotacyjnych dla jąder o dobrze określonym kształcie i w efekcie - jeśli pasmo teoretyczne zgadza się z pasmem eksperymentalnym - na dyskusję np: o współlistnieniu kształtów.

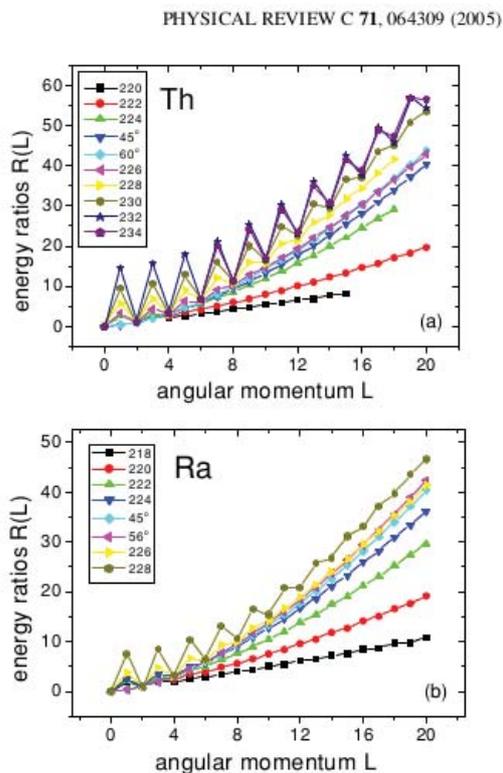


FIG. 2. (Color online) (a) Experimental energy ratios $R(L) = E(L)/E(2_1^+)$ for ^{220}Th [27], ^{222}Th [28], ^{224}Th [29], ^{226}Th [30], ^{228}Th [31], ^{230}Th [32], ^{232}Th [32,33], and ^{234}Th [32], compared to theoretical predictions for $\phi = 45^\circ$ and $\phi = 60^\circ$. (b) Same as (a) but for ^{218}Ra [34,35], ^{220}Ra [27], ^{222}Ra [32,36], ^{224}Ra [32,36], ^{226}Ra [32,36], and ^{228}Ra [32], compared to theoretical predictions for $\phi = 45^\circ$ and $\phi = 56^\circ$.

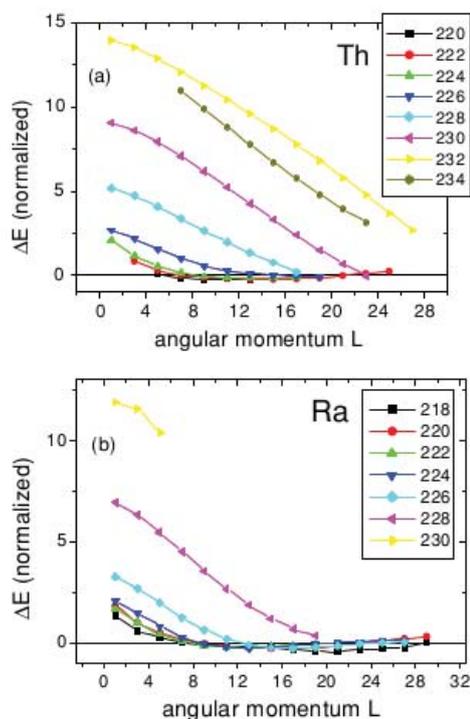


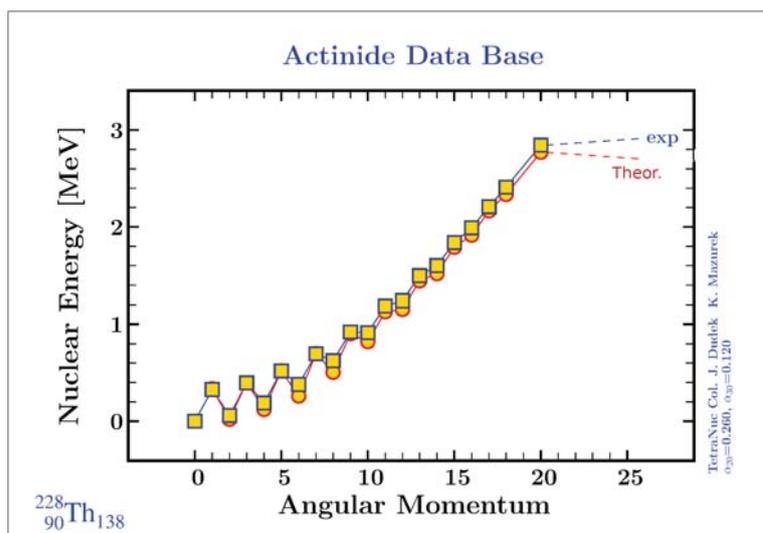
FIG. 4. (Color online) (a) Experimental energy staggering ΔE [Eq. (33)], normalized to the 2_1^+ state of each nucleus, for ^{220}Th [27], ^{222}Th [28], ^{224}Th [29], ^{226}Th [30], ^{228}Th [31], ^{230}Th [32], ^{232}Th [32,33], and ^{234}Th [32], as a function of the angular momentum. (b) Same as (a) but for ^{218}Ra [34,35], ^{220}Ra [27], ^{222}Ra [32,36], ^{224}Ra [32,36], ^{226}Ra [32,36], ^{228}Ra [32], and ^{230}Ra [32].

Rysunek 2.35: Eksperymentalne i teoretyczne stosunki energii stanów wzbudzonych oraz wielkość staggeringu między pasmami o stanach z parzystych i nieparzystych spinach (skopiowane z pracy [Bon05] w celu zilustrowania staggeringu poziomów rotacyjnych).

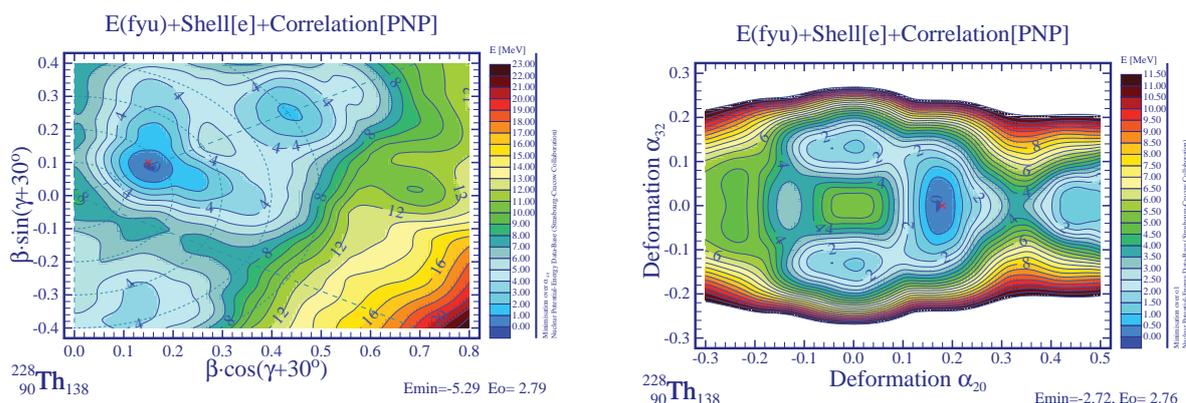
Statyczne deformacje otrzymane z minimalizacji totalnej energii nie są bardzo precyzyjną reprezentacją poprawnego opisu fizycznego kształtów jąder atomowych ponieważ wiadomo, że jądra są obiektami kwantowymi i nawet jeśli idzie o stany podstawowe należy brać pod uwagę ich wibracje zerowe (*zero-point vibrations*). Uwzględnienie tego efektu prowadzi do modyfikacji deformacji i zastąpienie deformacji z minimów statycznych przez najbardziej prawdopodobne wartości deformacji uwzględniające oscylacje kształtu, jakie otrzymuje się zazwyczaj rozwiązując kolektywne równanie Schrödingera (patrz rozdział 3 gdzie użyto takiego podejścia choć w nieco uproszczonym kontekście).

W tej sytuacji, w obliczeniach w tej pracy pozwolono sobie na niewielkie modyfikacje deformacji z minimów energetycznych energii obliczanych metodą Strutiskiego, aby sprawdzić w jakim stopniu takie niewielkie zmiany mogą poprawić zgodność między teorią a doświadczeniem.

Rysunki 2.38 – 2.39 przedstawiają porównanie z wartościami doświadczalnymi związanymi z pasmami rotacyjnymi o parzystości dodatniej, które są oparte na stanie podstawowym i pasmami rotacyjnymi o parzystości ujemnej, które są odtworzone przy pomocy



Rysunek 2.36: Eksperymentalne (niebieskie kwadraty) i teoretyczne (czerwone kółka) energie rotacyjnych stanów wzbudzonych dla jądra ^{228}Th . Teoretyczne pasmo kwadrupolowe zostało policzone przy deformacji $\alpha_{20} = 0.26$ a pasmo oktopolowe z $\alpha_{30} = 0.12$.



Rysunek 2.37: Energie całkowite jądra ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) dla deformacji kwadrupolowej (lewy) i tetrahedralnej (prawy)

deformacji tetrahedralnej, gdyż są przesłanki za tym [XVII], że pasma rotacyjne niskoleżące o parzystości ujemnej mogą pochodzić z jądra zdeformowanego, gdzie duży wkład pochodzi od deformacji tetrahedralnej. Tak więc dla deformacji stanu podstawowego mamy rysunki 2.38, gdzie jest pokazana zależność całkowitego spinu, kinematycznego momentu i dynamicznego momentu bezwładności od częstości obrotu jądra. O ile spin jest odtwarzany z dużą dokładnością to momenty kinetyczny i dynamiczny nie mają już takiej dokładności, gdyż są to pochodne spinu po częstości obrotu a więc są bardziej czułe na odchylenia od wartości eksperymentalnych. Kończym testem dobroci dopasowania jest oczywiście porównanie wprost wartości energii poszczególnych poziomów z danymi eksperymentalnymi a to wygląda bardzo dobrze. Podobna analiza dotyczy pasma opartego na minimum tetrahedralnym, które jest pokazane na Rys. 2.38 (prawy).

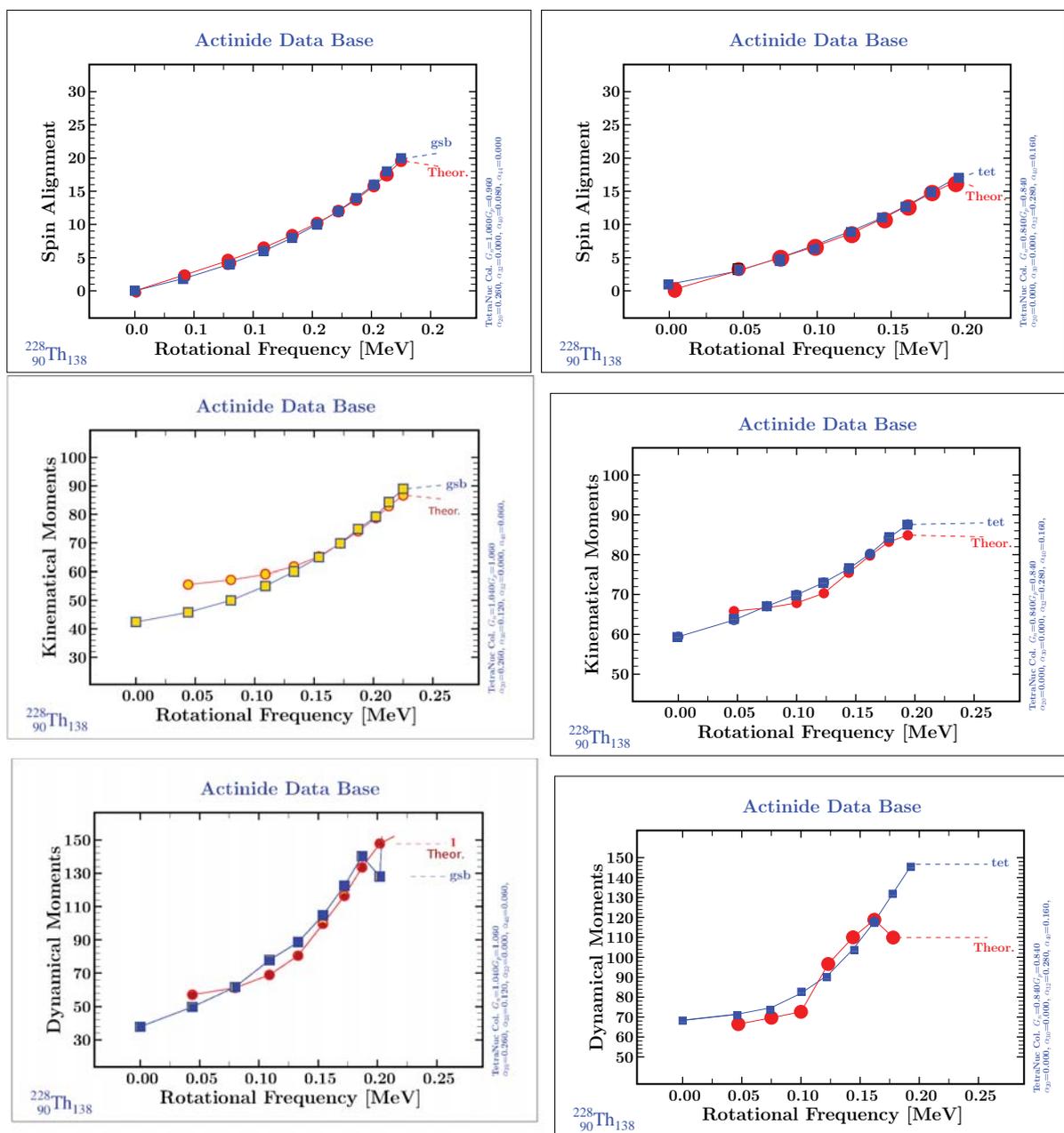
Rysunki 2.38 (prawy) przedstawiają, podobnie jak dla pasma podstawowego- analizę zgodności spinu, momentów kinetycznego i dynamicznego w funkcji częstości obrotu ale

I	$E(L)_{exp}$ [MeV]	$E(L)_{TH}$ [MeV]	$\Delta E(L)_{exp}$ [MeV]	$\Delta E(L)_{TH}$ [MeV]
1	0.328	0.335	0.299	0.325
2	0.058	0.019		
3	0.396	0.397	0.2735	0.3275
4	0.187	0.120		
5	0.519	0.521	0.2355	0.3315
6	0.380	0.259		
7	0.696	0.699	0.1935	0.317
8	0.625	0.505		
9	0.921	0.903	0.1515	0.24
10	0.914	0.821		
11	1.190	1.128	0.1125	0.1405
12	1.241	1.154		
13	1.497	1.442	0.0755	0.1065
14	1.602	1.517		
15	1.838	1.790	0.042	0.0745
16	1.990	1.914		
17	2.209	2.166	0.009	0.042
18	2.410	2.334		
20	2.844	2.771		

Tablica 2.1: Porównanie doświadczalnych [Art97] i teoretycznych dla ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) energii poziomów z pasma rotacyjnego. $\Delta E(L)$ to względne przesunięcie poziomów o parzystości ujemnej i dodatniej, eksperymentalne (*exp*) i teoretyczne (*TH*).

przy założeniu deformacji tetrahedralnej jako geometrii odpowiadającej pasmu o parzystości ujemnej. Należy podkreślić, że jak dotąd nie mamy argumentów potwierdzających naturę pasma interpretowanego tutaj jako tetrahedralne - zaś obliczenia tu przeprowadzane mają charakter hipotezy roboczej odpowiadającej na pytanie: W jakich warunkach deformacji możliwe będzie odtworzenie wyników doświadczalnych przy założeniu deformacji tetrahedralnej.

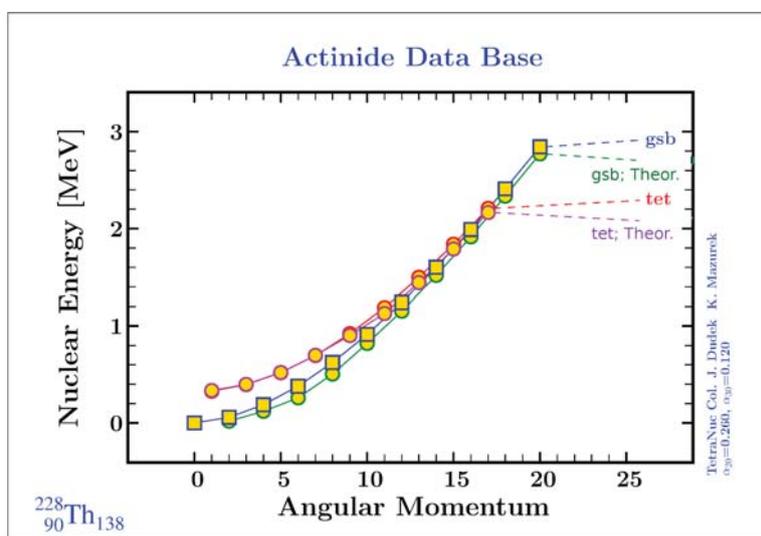
W tym przypadku mamy także dobrą zgodność ewolucji spinu oraz, patrząc na Rys. 2.39, energii poziomów pasma rotacyjnego o parzystości ujemnej ale momenty kinetyczny i dynamiczny są gorzej odtworzone. Pasma tetrahedralne zostało całkiem dobrze odtworzone przy złożeniu deformacji tetrahedralnej: $\alpha_{32} = 0.26$ i oktahedralnej $\alpha_1 = 0.16$ dla $G_{n,p}=0.82$. Pasma oparte na stanie podstawowym dopasowano z $\alpha_{20} = 0.26, \alpha_{30} = 0.12, \alpha_{40} = 0.08$ oraz $G_n=1.04, G_p=1.06$ a wyliczona $\Delta=0.2$ MeV, w ogólności zależy od częstości rotacji. Wygodne jest posiadanie możliwości wykonywania obliczeń metodą HFB w granicy znikających oddziaływań pairing. Tam, gdzie taki test był instruktywny, użyto wartości $\Delta_0=0.2$ MeV, co, jak można łatwo uzasadnić, odpowiada praktycznie zanikowi oddziaływań pairing. Wkład tych parametrów jest niewielki, gdyż główna część jest odtwarzana poprzez minimalizację parametrów deformacji ale są one ważne ponieważ pozwalają oszacować wpływ sił pairing na budowanie się pasma rotacyjnego. Rozbieżności pomiędzy deformacją statyczną, odczytaną z map energii (Rys. 2.37) i użytą do obliczeń wynikają z uwzględnienia energii drgań zerowych.



Rysunek 2.38: Porównanie spin versus częstość obrotu, momentów kinetycznych i dynamicznych dla ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) doświadczalnych i teoretycznych (Theor.), dla deformacji stanu podstawowego (gsb - lewy) i tetrahedralnego (tet - prawy).

Z jednej strony patrząc na Rys. 2.38 widzimy bardzo dobrą zgodność z eksperymentem i fakt, że pasmo rotacyjne o parzystości ujemnej jest dobrze odtworzone przy pomocy deformacji tetrahedralnej z minimum lokalnego tetrahedralnego, ale z drugiej strony prawdopodobnie można byłoby to pasmo odtworzyć przy pomocy innego zestawu deformacji. Jedna uwaga przemawiająca za uznaniem tego nie jako przypadek ale własność fizyczną jest fakt, że w celu dopasowania tego pasma, minimalizowane były odchylenia standardowe pomiędzy widmami eksperymentalnymi i teoretycznymi dla wielu różnych zestawów deformacji a pairing jaki tutaj uzyskaliśmy jest taki sam dla pasma opartego na minimum globalnym (stanie podstawowym) jak i dla pasma tetrahedralnego.

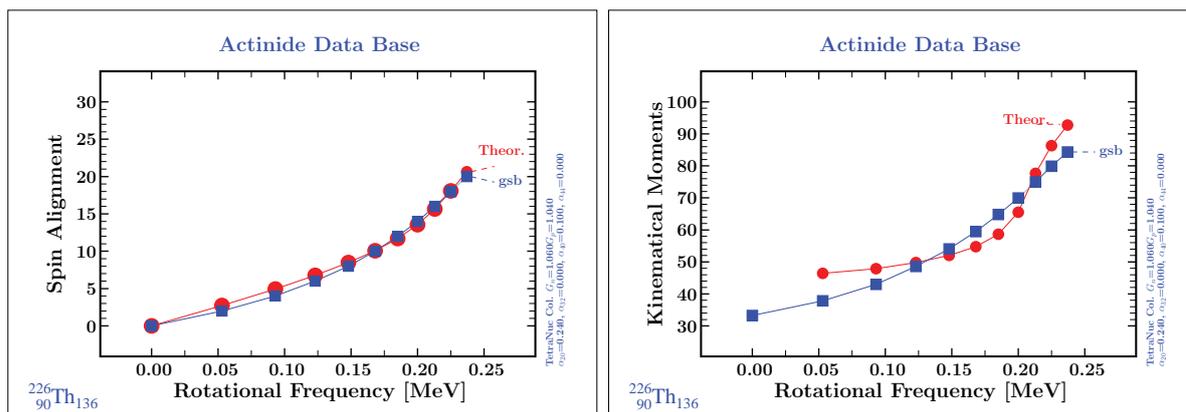
Sukces w odtworzeniu pasma eksperymentalnego dla ^{228}Th pozwolił na szersze badanie regionu aktynowców tak jak na przykład ^{226}Th (Rys. 2.40), gdzie pokazane są moment pędu i kinematyczny moment bezwładności dla pasma rotacyjnego opartego na stanie podstawowym.



Rysunek 2.39: Porównanie energii danego poziomu versus spin całkowity – teoretyczny (Theor.) i doświadczalny dla ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) zakładając, że minimalna delta pairing wynosi 0.20 MeV, dla deformacji stanu podstawowego (gsb) i tetrahedralnego (tet).

Kolektywne pasma rotacyjne o ujemnej parzystości wciąż są wielką zagadką. Najczęściej interpretuje się je jako efekt stabilnych kształtów oktupolowych, czyli dobrze zdeformowane minima z niezerowymi osiowymi deformacjami kwadrupolowymi i oktupolowymi tak jak w przypadku ^{222}Th lub jako oktupolowe wibracje, czyli gdy mamy w położeniu równowagi niezerowe osiowe deformacje kwadrupolowe z osiowymi oscylacjami oktupolowymi wokół tego położenia równowagi. Obie te interpretacje wymagają istnienia statycznej deformacji kwadrupolowej, a co za tym idzie - nieznikających momentów kwadrupolowych a więc istnienia przejść E2 w pasmach rotacyjnych. Wiele jest jednak przypadków jąder, gdzie przejść E2 się nie obserwuje mimo, że pasmo nadal jest rotacyjnym pasmem o parzystości ujemnej [XII]. Przemawiać to może za istnieniem kształtów tetrahedralnych.

Obliczenia wykonane przy pomocy pola średniego, skupione na symetrii tetrahedralnej dla jąder aktynowców pokazują duże przerwy energetyczne - około 3 MeV, dla dość dużej deformacji tetrahedralnej. Nawet jeśli poczwórnice zdegenerowane poziomy energetyczne leżą w połowie tej przerwy energetycznej to i tak dostajemy dwie przerwy energetyczne



Rysunek 2.40: Porównanie spinów całkowitych (lewy) i momentów kinetycznych (prawy) - teoretycznych (Theor.) i doświadczalnych (gsb) dla ($Z_0 = 90, N_0 = 136$) dla deformacji stanu podstawowego.

około 2 MeV dla $Z=90$ i 94 [Dud03b].

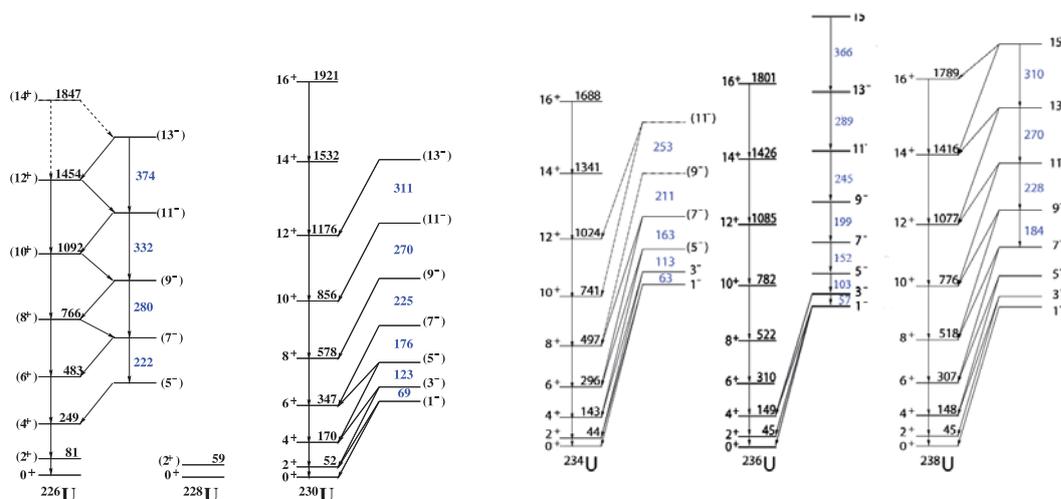
Najmocniejszy argument przeciwko interpretacji pasm o ujemnej parzystości jako tetrahedralnych pochodzi z własności momentów bezwładności pasm opartych na stanie podstawowym i tych o ujemnej parzystości. Jeśli minimum tetrahedralne charakteryzuje się zerową deformacją kwadrupolową, to w konsekwencji moment bezwładności pasma tetrahedralnego powinien być mniejszy niż tego, opartego na stanie podstawowym. Widoczne to było w przypadku pasm tetrahedralnych w ^{156}Gd . Jednak w przypadku $^{230,232,234}\text{U}$ dla niskich spinów eksperymentalne momenty bezwładności pasm o ujemnej parzystości są większe o 14-17% od tych opartych na stanie podstawowym. Podobnie jest w przypadku ^{236}U gdzie różnice sięgają 29%. Takie zachowanie można wytłumaczyć przy pomocy złożenia fononów oktopolowych [XIV]. Z drugiej jednak strony nie ma potwierdzenia w obliczeniach, że moment bezwładności jest zdominowany przez deformację kwadrupolową, mimo, że wyniki odtwarzają rezultaty doświadczenia.

Następne ilustracje zostały otrzymane przez wybieranie deformacji stanu podstawowego poprzez minimalizację energii całkowitej jądra w wielowymiarowej przestrzeni parametrów deformacji.

Zależność spinu w funkcji częstości rotacji jądra została otrzymana przy założeniu, że natężenie sił pairing było dopasowane by, po rozwiązaniu równań BCS, odtwarzać przerwy energetyczne wyekstrahowane z różnic mas. To samo natężenie sił pairing było użyte do liczenia pasm tetrahedralnych jak i tych opartych na stanie podstawowym. Zwiększenie momentów bezwładności tetrahedralnych w obliczeniach jest automatyczne i pochodzi z faktu, że efekty przerw energetycznych w tetrahedralnych minimach są silniejsze w porównaniu do przerw energetycznych dla minimów w stanie podstawowym.

Kolejnym punktem do dyskusji z eksperymentem są zredukowane stosunki przejść $B(E2)/B(E1)$. W Ref. [Kon81] znaleziono, że stosunki przejść $B(E2)/B(E1)$ są o czynnik 50 mniejsze dla pasm o parzystości ujemnej i o nieparzystym spinie niż w pasmach o spinach parzystych.

W [X] i [XI] przedstawiono wyniki eksperymentu zrobionego w celu udowodnienia istnienia przejść E2 w pasmach o parzystości ujemnej i nieparzystym spinie dla jądra ^{156}Gd ale nie udało się zmierzyć tych przejść poniżej spinu $I^\pi = 9^-$ a natężenie przejścia $11^- \rightarrow 9^-$ jest bardzo małe. Oszacowano też stosunki przejść w pasmach o parzystych i nieparzystych spinach i ujemnej parzystości i stwierdzono, że dla pasma z nieparzystymi spinami rząd



Rysunek 2.41: Częściowy układ poziomów dla izotopów uranu od ^{226}U do ^{238}U pokazujący tylko widmo zbudowane na stanie podstawowym i na pierwszym poziomie o negatywnej parzystości. Różnice energii pomiędzy stanami o ujemnej parzystości są oznaczone na niebiesko. Dane pochodzą z [War96]-[Gre98].

wielkości stosunków tych przejść jest ten sam podczas, gdy dla pasma o spinie parzystym te stosunki się znacznie różnią. Poza tym dla pasma o parzystości ujemnej i parzystych spinach, stosunki przejść maleją zamiast rosnąć - jak to jest w przypadku pasm o spinie nieparzystym i w dodatku są więcej niż trzy rzędy wielkości większe.

Wszystkie te obserwacje wskazują, że pasma o parzystości ujemnej i spinach nieparzystych nie są partnerami simplexu (Rozdział I) pasm o spinie parzystym - jak to sugerowały dotychczasowe interpretacje - podczas, gdy możliwy związek z symetrią tetrahedralną jest ciągle aktualnym zagadnieniem. Pasma te nie są więc pasmami o naturze wibracji oktupolowej - ta ostatnia afirmacja również jest powtarzana w literaturze.

Natomiast wyniki eksperymentu wykonanego w ILL Grenoble, opisane w pracy [Jen10] pokazują, że jądra ^{156}Gd przejścia E2 w paśmie rotacyjnym o stanach z ujemną parzystością istnieją i pozwalają na oszacowanie momentu kwadrupolowego $Q = 7.1(35) b$ dla stanu 5^- , co jest wartością porównywalą z momentem kwadrupolowym dla stanu podstawowego tego jądra. Kolejny eksperyment [Bar10a] zrobionym w celu weryfikacji istnienia jąder o symetrii tetrahedralnej koncentrował się na poszukiwaniu pasm niskoenergetycznych o ujemnej parzystości w jądrach ^{160}Y i ^{154}Gd . Zaobserwowano przejścia E2 między kilkoma najniższymi stanami, które powinny były zniknąć, a także określono moment kwadrupolowy dla kilku pierwszych stanów w tych jądrach.

Przemawia to za hipotezą, że symetria tetrahedralna może pojawiać się dla jąder wydłużonych ze względu na kwantowe zmieszanie stanów, co jest dyskutowane w [Goz10].

Podsumowując ten rozdział, można powiedzieć, że obserwacja przerw energetycznych na diagramach poziomów jednocząstkowych przekłada się na gęstości tych poziomów. Dzięki przypisaniu poszczególnym poziomom przynależności do poszczególnych reprezentacji grup punktowych, stało się możliwe poprawne usuwanie przecięć między poziomami, a mapy gęstości dla danych reprezentacji wskazują ciekawe zastosowanie grup punktowych. Energie mikroskopowe odtwarzają z dużym prawdopodobieństwem zachowanie gęstości poziomów jednocząstkowych, przez co stało się możliwe oszacowanie wstępowania tetrahedralnych i

oktahedralnych liczb magicznych. Są to wartości Z i N określających jądra szczególnie podatne na deformacje odpowiadające symetriom wyższego rzędu. Co ciekawsze, te rozważania doprowadziły do znalezienia wysp stabilności, czyli obszarów jąder, które powinny być łatwiejsze do wyprodukowania. Przy dalszych, zarówno teoretycznych jak i eksperymentalnych badaniach jąder w tych obszarach, powinno się brać pod uwagę deformacje tetrahedralne i oktahedralne.

Rozdział 3

Łamanie symetrii ze wzrostem spinu: Przejścia kształtów Jacobi’ego

W tym rozdziale przedyskutowane zostaną wyniki realistycznych obliczeń dotyczących zachowania się jąder silnie wzbudzonych, które mogą być produkowane z bardzo wysokim momentem pędu w reakcjach jonów ciężkich. Wraz ze wzrostem energii wzbudzenia wzrasta temperatura jądrowa, a co za tym idzie efekty powłokowe stopniowo maleją i praktycznie znikają. Ten mechanizm zaniku efektów powłokowych, pojawia się przy typowych temperaturach rzędu $T = (1.5 - 2)$ MeV.

Przy jeszcze wyższych energiach wzbudzenia, obserwuje się typowe mechanizmy stochastyczne dające się opisywać rozkładami znanymi z termodynamiki - skąd powstała idea używania pojęć takich jak temperatura, entropia, energia swobodna etc., do opisu zjawisk jądrowych. W przypadku wysokich wzbudzeń, których energia rozkłada się na wiele cząstek systemu jednocześnie, system wielociałowy przypomina kroplę cieczy, która jest opisana przez trzy mechanizmy, dobrze znane w mechanice klasycznej. Te trzy mechanizmy zawierają współzawodnictwo między napięciem powierzchniowym, pochodzącym od przyciągającego charakteru oddziaływań jądrowych, odpychaniem kulombowskim i siłą odśrodkową, która związana jest z kolektywną rotacją. W tych warunkach, po odpowiednim przeskalowaniu i modyfikacji odpowiednich proporcji między tymi siłami, jądra atomowe przypominają obiekty astronomiczne.

Konkurujące ze sobą kształty obracających się gwiazd były dyskutowane w przeszłości, między innymi przez MacLaurina, Jacobi’ego czy Poincaré’go. Kształty badane przez MacLaurina to kształty spłaszczone (ang. ‘oblate’), Jacobi [Jac84] studiował natomiast możliwości ewolucji kształtu w terminach powierzchni, które są niezmiennicze przy inwersji osi układu współrzędnych. Przejście kształtów zaproponowane przez Jacobi’ego to zmiana deformacji z typu oblate (spłaszczona elipsoida), poprzez kształty trójosiowe, na deformacji wydłużonej (ang. ‘prolate’) kończąc. Poincaré [Poi85] natomiast rozważał kształty, które mogą łamać symetrię odbiciową. Wraz ze wzrostem częstości obrotu, obiekt astronomiczny (lub jądrowy) zmienia kształt z symetrycznego odbiciowo na niesymetryczny, np. przypominający gruszkę.

W celu umożliwienia dyskusji współzawodnictwa tych mechanizmów, należy zdecydować się na sposób opisu powierzchni geometrycznej dyskutowanych obiektów. Obliczenia prezentowane tutaj, zakładają opis powierzchni przy pomocy harmonik sferycznych $Y_{\lambda,\mu}(\theta, \phi)$. Zakładając gładką i regularną powierzchnię można skorzystać ze wzoru 1.1,

który przypomnijmy raz jeszcze:

$$\mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi) = \mathcal{R}_0 c(\alpha_{\lambda\mu}) \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right], \quad (3.1)$$

Rozwinięcie używające współczynników $\{\alpha_{\lambda,\mu}\}$, musi spełniać relację $\alpha_{\lambda,-\mu} = (-1)^\mu \alpha_{\lambda,\mu}^*$ dzięki czemu powierzchnia jądrowa jest rzeczywistą funkcją kątów. Funkcja $c(\{\alpha\})$ (podrozdział 1.1.2) zapewnia zachowanie objętości czy to w przypadku obiektów astronomicznych czy też obiektów w skali subatomowej. Używając powyższego wyrażenia można zdefiniować klasę kształtów Jacobi'ego, która obejmuje tylko parzyste rzędy (λ parzyste) harmonik sferycznych, podczas gdy μ może przyjmować w ogólności wartości niezerowe. Natomiast rodzina kształtów Poincaré'go jest charakteryzowana przez kombinację indeksów parzystych i nieparzystych λ .

Przypuśćmy, że termiczne wzbudzenie jądra jest wystarczająco duże, by efekty powłokowe znikły i można go było opisać przy pomocy gorącej rotującej kropli cieczy. Stabilny, nie rotujący system przyjmuje sferyczny kształt równowagowy. W momencie, gdy układ zaczyna rotować, następuje zaburzenie kształtu równowagowego. W terminach deformacji kwadrupolowej, kształty równowagowe mogą być opisane, z pewnym przybliżeniem, przy pomocy tradycyjnie używanej parametryzacji Bohra (β, γ) zdefiniowanej jako:

$$\begin{aligned} \alpha_{20} &= \beta \cos \gamma \\ \alpha_{22} &= \frac{\beta}{\sqrt{2}} \sin \gamma. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Deformacja 'oblate', typowa dla kształtów Maclaurina, odpowiada niezerowej deformacji β i $\gamma = 60^\circ$ a deformacja 'prolate'- doborowi $\gamma = 0^\circ$.

Minimalizacja energii całkowitej jądra w postaci np., Lublin-Strasbourg Drop (LSD) [Pom03], wymaga uwzględnienia kształtów bardziej egzotycznych, dlatego też liczba parametrów $\{\alpha_{\lambda,\mu}\}$ musi być zwiększona tak, aby końcowy wynik był stabilny ze względu na dodawanie jeszcze wyższych rzędów rozwinięcia w harmoniki sferyczne. Obliczenia prezentowane dalej pokazują, że gdy wzrasta moment pędu, jądro nie tylko zwiększa swoją deformację osiowo-symetryczną 'oblate' ale też energia wokół punktu równowagi zmienia się coraz mniej, czyli potencjał się wypłaszcza. Dla pewnego krytycznego spinu jądra, symetria kształtu oblate zostaje złamana i pojawia się nowa klasa kształtów. Jeśli ta klasa kształtów jest typu Jacobi'ego, nazwiemy ten krytyczny kręt I_J^{crit} , a jeśli jest typu Poincaré'go to I_P^{crit} . Z tych kilku uwag wynika, że powyżej spinu krytycznego można oczekiwać wielu zmian kształtów co jest szczególnie interesujące ze względu na możliwe sygnatury eksperymentalne.

Jednym z zaawansowanych artykułów dotyczących rotującej kropli cieczy naładowanej jest [Coh74], gdzie przy użyciu modelu kroplowego typu Finite Range Liquid Drop (FRLDM), obliczone zostały energie minimalne i w punkcie siodłowym i momenty bezwładności dla rotującego obiektu zdeformowanego. Dyskutowane kształty obejmują także deformacje trójosiowe i ich ewolucję w funkcji spinu. Wprawdzie nie jest powiedziane wprost, ale jest to jedna z pierwszych dyskusji przejść Jacobi'ego dla jądra atomowego w literaturze.

W tym samym duchu przedstawione są wyniki w pracy [Sie86], gdzie oprócz nowej parametryzacji modelu FRLDM, zaproponowano wysokości barier na rozszczepienie, momenty bezwładności, a także dyskutowano zmianę wartości parametru asymetrii osiowej w funkcji *fissility*, $x = Z^2/A$ i mas jąder. Kolejne prace [Bar08] dotyczące przejścia Jacobi'ego związane są z odejściem od parametryzacji kształtów poprzez rozwinięcie funkcji

promienia powierzchni w harmoniki sferyczne na rzecz parametryzacji *Funny Hills* opartej wyłącznie na trzech parametrach a wprowadzonej w przeglądowym artykule [Bra72].

Oprócz modelu kropkowego LSD pokazano w [Bar08] też wyniki otrzymane z przybliżeniem Thomasa Fermiego (Extended Thomas Fermi) z siłami Skyrma oraz z modelem Yukawa Folded [Bar09]. Model Thomasa-Fermiego był użyty wcześniej do dyskusji przejścia Jacobi'ego przez Myersa i Świąteckiego w [Mye01], gdzie dyskutowano też *Gigantyczny Backbending*¹ dla szeregu jąder i powiązanie z dynamiką fuzji.

Obliczenia przedstawione w następujących rozdziałach dotyczą głównie zastosowania modelu kropkowego LSD w metodzie termicznych fluktuacji kształtu w celu opisanie zmian kształtów jądra w trakcie emisji wysokoenergetycznych kwantów γ i przez to próbę interpretacji teoretycznej widm eksperymentalnych.

Należy także podkreślić, że przedstawiona tutaj zostanie także próba oszacowania wpływu wibracji kwadrupolowych na wartości parametrów kwadrupolowych. Wibracje kwadrupolowe dla regionu aktynowców były badane ostatnio w [Kow10] dla stanów niskoenergetycznych, podczas tutaj przebadane zostaną stany wysokospinowe.

3.1 Termiczne fluktuacje kształtu jądra i GDR

Gorące jądro atomowe nie posiada dobrze sprecyzowanego kształtu ale ze względu na energię termiczną, fluktuacje deformacji tego systemu, mogą generować cały zbiór kształtów o różnych prawdopodobieństwach występowania. Ze strony teoretycznej rozważamy jedno jądro posiadające potencjalnie wiele kształtów, co w eksperymencie odpowiada całemu zbiorowi jąder o najróżniejszych deformacjach. Jednym ze sposobów na eksperymentalną weryfikację zmian kształtów jądra jest obserwacja zmian kształtu funkcji nasilenia gigantycznego rezonansu dipolowego (GDR), które dyskutowano w artykule [Gal85], gdzie połączono powierzchnie energii potencjalnej z kształtami funkcji nasilenia GDR w jądrach zdeformowanych ^{108}Sn , ^{152}Dy i ^{196}Pb . Dzięki takiemu połączeniu było możliwe wytlumaczenie fragmentacji funkcji nasilenia GDR dla jąder superzdeformowanych.

W tej monografii, metoda termicznych fluktuacji kształtu bazuje na obliczaniu energii całkowitych jądra złożonego z modelu Lublin-Strasbourg Drop, a została przedstawiona w [Dub05]. Punktem startowym jest obliczanie energii całkowitej (równ. 3.3) dla jądra złożonego uwzględniając jak najwięcej możliwych kształtów a następnie minimalizacja tej energii i rzutowanie na płaszczyznę (β, γ) . Dla jąder rotujących, zakładając limit temperatur między około $T=1-5$ MeV, energia całkowita wynosi:

$$E_{LSD}(\{def\}; I) = E_{LSD}(def) + \frac{I(I+1)}{2\mathcal{J}(def)}, \quad (3.3)$$

gdzie \mathcal{J} to moment bezwładności jądra zdeformowanego. Energia E_{LSD} jest liczona na pięciowymiarowej siatce kwadrupolowych parametrów deformacji $\alpha_{\lambda,\mu}$ i minimalizowana po wyższych multipolach ($\lambda > 2$).

Kolejnym krokiem jest obliczenie energii swobodnej jądra wzbudzonego $F(T)$ (równ. 3.4) czyli uwzględnienia faktu, że jądro posiada pewną temperaturę

$$F(\{def\}, T) = E_{LSD}(\{def\}; I) - T(\{def\}; I) \cdot S(\{def\}; I, T), \quad (3.4)$$

¹Wzrost spinu powoduje tak silny wzrost momentu bezwładności, że szybkość kątowna obrotu maleje zamiast rosnąć.

gdzie entropia S może być albo obliczana w sposób mikroskopowy przy użyciu poziomów jednocząstkowych w teorii pola średniego albo (i to aktualnie będzie naszym wyborem) fenomenologicznego wyrażenia

$$S(\{def\}; I, T) = T \cdot a(def, I). \quad (3.5)$$

W powyższym wyrażeniu, w ramach modelu gazu Fermiego, w pojemniku o ustalonej geometrii i przy ustalonej pełnej energii układu, 'a' odgrywa rolę stałej. W naszych zastosowaniach do fizyki jądrowej, przy ustalonej pełnej energii wzbudzenia jądra, energia termiczna w ogólności zmienia się, gdyż deformujące się jądro potrzebuje części energii dla skompensowania efektu (np. wzrastającej) deformacji – wielkość ta będzie dodatkowo uzależniona od deformacji jądra.

Prawdopodobieństwo, że jądro wzbudzone przyjmie dany kształt jest opisane wzorem:

$$p(\{def\}; I, T) = exp \left\{ -\frac{F(T)}{kT} \right\}. \quad (3.6)$$

Sumując wszystkie możliwe kształty jądra z wagami danymi przez te prawdopodobieństwa (wzór 3.6) otrzymanymi dla danej temperatury układu, obliczane są efektywne wartości obserwabli takich jak: efektywne wydłużenie jądra, efektywna linia yrast, efektywny kształt funkcji nasilenia gigantycznego rezonansu dipolowego (GDR) i jej szerokość, a także wiele innych.

Emisja wysokoenergetycznych kwantów γ z jądra złożonego w postaci gigantycznego rezonansu dipolowego była początkowo obserwowana dla jąder zimnych a następnie wykonano eksperymenty z jądrami gorącymi np.: [Maj94]. Z mikroskopowego punktu widzenia GDR jest wywołany przez skorelowane wzbudzenia cząstka-dziura, podczas gdy w jądram gorących należy raczej mówić o wibracjach protonów lub ich części względem neutronów, co z zewnątrz przypomina ruch materii w kropli cieczy. Ponieważ największy wkład w generację takich kształtów ma deformacja kwadrupolowa, to oczywiste stało się sprzężenie tego parametru z funkcją nasilenia GDR, jak to pokazano w artykułach [Gal85, Maj94].

Gigantyczny rezonans dipolowy (GDR) jest zjawiskiem, które może być wykorzystane jako sonda pozwalając na badanie nie tylko ewolucji kształtów jąder gorących, ale też czasów rozpadu jądra złożonego oraz gęstości poziomów jądrowych, czyli daje informacje o kształcie jądra jak i jego własnościach dynamicznych. Istnieje szereg modeli, które mogą opisywać funkcje nasilenia GDR emitowanych z jąder gorących, szybkorotujących takie, jak metoda Nilssona-Strutinskiego [Aru04], która jest wariacją metody makroskopowo-mikroskopowej z potencjałem Nilssona i energią powłokową à la Strutinsky, fluktuacje termiczne są wprowadzone za pomocą teorii Landau'a. Ta metoda działa dla jąder o niskich spinach i wysokich temperaturach (około 1.5-2 MeV), gdzie efekty związane oddziaływaniem pairing znikają. Przy wysokich temperaturach i wysokich spinach ciekawe wyniki otrzymane zostały z modelem Phonon Damping Model (PDM) [Din13], gdzie używane są empiryczne prawdopodobieństwa rozkładu spinu i temperatury.

Funkcja nasilenia Gigantycznego Rezonansu Dipolowego (GDR) może być traktowana jako suma pięciu składowych - krzywych Lorentza, ze względu na deformacje i oddziaływanie Coriolisa [Dub05]. Wibracje można opisać poprzez złożenie drgań wzdłuż trzech osi głównych oraz, ze względu na siłę Coriolisa - na dwie dodatkowe składowe pochodzące z rozszczepienia się częstości drgań względem osi prostopadłych do osi obrotu jądra:

$$f_k(E_\gamma, \{def\}) = \frac{\sigma_k \Gamma_k E_\gamma^2}{(E_\gamma^2 - E_{GDR,k}^2)^2 + E_\gamma^2 \Gamma_k^2}, \quad (3.7)$$

gdzie: σ_k - nasilenie k -tego członu GDR, Γ_k - szerokość k -tego członu GDR, E_γ - energia promieniowania γ , $E_{GDR,k} = \hbar\omega_k$ - centroida k składowej GDR.

Na kształt funkcji nasilenia GDR ma bezpośredni wpływ zachowanie się jądra emitującego kwanty γ . Nukleony w jądrze rotującym posiadają energię wewnętrzną, która powoduje ich oscylację. Częstość tych drgań zależy więc od kształtu jądra a także od częstości obrotu układu. Równanie opisujące gorące jądro złożone można przedstawić jako:

$$\hat{H}_{osc} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta) + \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) - \omega(yJ_z - zJ_y) \quad (3.8)$$

gdzie $\omega_i, i = 1, 2, 3$ to częstości nierotującego jądra

$\Omega_i, i = 1, 2, 3$ to częstości rotującego jądra

ω to częstość rotacji więc $\Omega_i \pm \omega$ to złożenie częstości rotacji i częstości wibracji układu. Ustalmy jeszcze, że indeks "1" oznacza współrzędną x -sową, "2"- y -kową a "3" - z -tową w układzie kartezjańskim. Obrót jądra można zapisać jako:

$$y = \alpha \cos(\Omega t) \quad (3.9)$$

$$z = \beta \sin(\Omega t) \quad (3.10)$$

Poszczególne pochodne można przedstawić jako:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -\omega_2^2 y + 2\omega \frac{dz}{dt} + \omega^2 y \quad (3.11)$$

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -\omega_3^2 y + 2\omega \frac{dz}{dt} + \omega^2 y \quad (3.12)$$

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -\Omega^2 \alpha \cos(\Omega t) \quad (3.13)$$

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -\Omega^2 \beta \sin(\Omega t) \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 y}{dt^2} &= -\Omega^2 \alpha \cos(\Omega t) = -\Omega^2 y = -\omega_2^2 y + 2\omega \frac{dz}{dt} + \omega^2 y \\ &= (-\omega_2^2 + \omega^2)y + 2\omega \Omega z \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -\Omega^2 z = (-\omega_3^2 + \omega^2)y + 2\omega \Omega z. \quad (3.16)$$

Ten układ równań może być zapisany jako:

$$\begin{bmatrix} -\Omega^2 + \omega_2^2 - \omega^2 & 2\omega\Omega \\ 2\omega\Omega & -\Omega^2 + \omega_3^2 - \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.17)$$

a jego wyznacznik to:

$$\begin{aligned} (-\Omega^2 + \omega_2^2 - \omega^2)(-\Omega^2 + \omega_3^2 - \omega^2) - (2\omega\Omega)^2 &= 0 \quad (3.18) \\ (-\Omega^2 + \omega_2^2 - \omega^2)(-\Omega^2 + \omega_3^2 - \omega^2) &= (2\omega\Omega)^2 \\ \Omega^4 - \Omega^2(\omega_3^2 + \omega_2^2 - \omega^2 - \omega^2 + 4\omega^2) + \omega_2^2\omega_3^2 - \omega_2^2\omega^2 - \omega^2\omega_3^2 + \omega^4 &= 0. \end{aligned}$$

Dostajemy równanie kwadratowe z Ω jako zmienną:

$$\Omega^4 - \Omega^2(\omega_3^2 + \omega_2^2 + 2\omega^2) + \omega_2^2\omega_3^2 - \omega_2^2\omega^2 - \omega^2\omega_3^2 + \omega^4 = 0. \quad (3.19)$$

Rozwiązując to równanie kwadratowe otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \Delta' &= (\omega_3^2 + \omega_2^2 + 2\omega^2)^2 - 4(\omega_2^2\omega_3^2 - \omega_2^2\omega^2 - \omega^2\omega_3^2 + \omega^4) \\ &= (\omega_3^2 + \omega_2^2)^2 + 4\omega^2(\omega_3^2 + \omega_2^2) + 4\omega^4 - 4\omega_2^2\omega_3^2 + 4\omega_2^2\omega^2 + 4\omega^2\omega_3^2 - 4\omega^4 \\ &= (\omega_3^2 + \omega_2^2)^2 + 4\omega^2\omega_3^2 + 4\omega^2\omega_2^2 - 4\omega_2^2\omega_3^2 + 4\omega_2^2\omega^2 + 4\omega^2\omega_3^2 \\ &= (\omega_3^2 - \omega_2^2)^2 + 8\omega^2\omega_3^2 + 8\omega^2\omega_2^2 = 4\left[\frac{1}{4}(\omega_3^2 - \omega_2^2)^2 + 2\omega^2(\omega_3^2 + \omega_2^2)\right], \end{aligned} \quad (3.20)$$

a w następnych przeliczeniach będziemy używać zmiennej Δ zdefiniowanej jako:

$$\Delta = \frac{1}{2}\sqrt{\Delta'} = \sqrt{\frac{1}{4}(\omega_3^2 - \omega_2^2)^2 + 2\omega^2(\omega_3^2 + \omega_2^2)} \quad (3.21)$$

co pozwoli na zapisanie częstości drgań rotującego jądra jako:

$$\Omega_2 = \frac{1}{2}(\omega_3^2 + \omega_2^2) + \omega^2 + \Delta; \quad (3.22)$$

$$\Omega_3 = \frac{1}{2}(\omega_3^2 + \omega_2^2) + \omega^2 - \Delta. \quad (3.23)$$

Całkowita częstość drgań jądra wynosi:

$$\Omega_1 = \omega_1 \quad (3.24)$$

$$\Omega_2 = \sqrt{\frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega^2 + \Delta} \quad (3.25)$$

$$\Omega_3 = \sqrt{\frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega^2 - \Delta} \quad (3.26)$$

Częstości drgań protonów ($\omega_{1p}, \omega_{2p}, \omega_{3p}$) i neutronów ($\omega_{1n}, \omega_{2n}, \omega_{3n}$) mogą być różne więc wprowadźmy warunek, że wszystkie nukleony znajdują się poniżej poziomu Fermiego w studni potencjału oscylatora harmonicznego:

$$\omega_{1p} = \hbar c \frac{\sqrt{2(\lambda_p)/m_p}}{\sqrt{\langle R_y^2 \rangle}}; \quad \omega_{2p} = \hbar c \frac{\sqrt{2(\lambda_p)/m_p}}{\sqrt{\langle R_x^2 \rangle}}; \quad \omega_{3p} = \hbar c \frac{\sqrt{2(\lambda_p)/m_p}}{\sqrt{\langle R_z^2 \rangle}} \quad (3.27)$$

$$\omega_{1n} = \hbar c \frac{\sqrt{2(\lambda_n)/m_p}}{\sqrt{\langle R_y^2 \rangle}}; \quad \omega_{2n} = \hbar c \frac{\sqrt{2(\lambda_n)/m_p}}{\sqrt{\langle R_x^2 \rangle}}; \quad \omega_{3n} = \hbar c \frac{\sqrt{2(\lambda_n)/m_p}}{\sqrt{\langle R_z^2 \rangle}} \quad (3.28)$$

gdzie $\lambda_{p(n)}$ - to poziom Fermiego dla protonów (neutronów), $m_p = 938.272$ [MeV/c²] jest masą protonu a $\hbar \cdot c = 197.3267$ [MeV fm].

Tak więc średnią częstość drgań nierotującego układu w poszczególnych kierunkach można zapisać w postaci:

$$\omega_1 = \frac{(\omega_{1p} + \omega_{1n})}{2}; \quad \omega_2 = \frac{(\omega_{2p} + \omega_{2n})}{2}; \quad \omega_3 = \frac{(\omega_{3p} + \omega_{3n})}{2}. \quad (3.29)$$

W pracy [Ner82] dyskutowano rozszczepienie Coriolisa (*Coriolis splitting*) składowych drgań wzdłuż poszczególnych osi prostopadłych do osi rotacji na dwie składowe, co związane jest z rotacją jądra. Zaproponowano następujące oznaczenia:

$$\begin{aligned}\alpha &= \sqrt{\frac{\Omega_2^2 - \omega_3^2 + \omega^2}{\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)}}; & \beta &= \sqrt{\frac{\Omega_2^2 - \omega_2^2 + \omega^2}{\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)}} \\ \gamma &= \sqrt{\frac{\Omega_3^2 - \omega_2^2 + \omega^2}{\Omega_3(\Omega_3^2 - \Omega_2^2)}}; & \delta &= \sqrt{\frac{\Omega_3^2 - \omega_3^2 + \omega^2}{\Omega_3(\Omega_3^2 - \Omega_2^2)}},\end{aligned}\quad (3.30)$$

które pozwalają na policzenie amplitud drgań wzdłuż poszczególnych osi:

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \frac{1}{\Omega_1}; & \sigma_2 &= \frac{(\alpha + \beta)^2}{2}; & \sigma_3 &= \frac{(\gamma - \delta)^2}{2} \\ \sigma_4 &= \frac{(\alpha - \beta)^2}{2}; & \sigma_5 &= \frac{(\gamma + \delta)^2}{2}\end{aligned}\quad (3.31)$$

$$\begin{aligned}\sigma_2 &= \frac{(\alpha + \beta)^2}{2} = \frac{\left(\sqrt{\frac{\Omega_2^2 - \omega_3^2 + \omega^2}{\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)}} + \sqrt{\frac{\Omega_2^2 - \omega_2^2 + \omega^2}{\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)}}\right)^2}{2} \\ &= \frac{(\sqrt{\Omega_2^2 - \omega_3^2 + \omega^2} + \sqrt{\Omega_2^2 - \omega_2^2 + \omega^2})^2}{2\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)} \\ &= \frac{(\Omega_2^2 - \omega_3^2 + \omega^2 + 2\sqrt{\Omega_2^2 - \omega_3^2 + \omega^2}\sqrt{\Omega_2^2 - \omega_2^2 + \omega^2} + \Omega_2^2 - \omega_2^2 + \omega^2)}{2\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)} \\ &= \frac{(2\Omega_2^2 - \omega_3^2 - \omega_2^2 + 2\omega^2 + 2\sqrt{(\Omega_2^2 - \omega_3^2 + \omega^2)(\Omega_2^2 - \omega_2^2 + \omega^2)})}{2\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)}\end{aligned}\quad (3.32)$$

Można przeliczyć związek:

$$\begin{aligned}\Omega_2^2 - \Omega_3^2 &= \left(\sqrt{\frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega^2 + \Delta}\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega^2 - \Delta}\right)^2 \\ &= \frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega^2 + \Delta - \frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2) - \omega^2 + \Delta = 2\Delta.\end{aligned}\quad (3.33)$$

Wracając do Równania 3.32 dostajemy:

$$\begin{aligned}\sigma_2 &= \frac{(\alpha + \beta)^2}{2} \\ &= \frac{2\Omega_2^2 - \omega_3^2 - \omega_2^2 + 2\omega^2 + 2\sqrt{(\Omega_2^2 - \omega_3^2 + \omega^2)(\Omega_2^2 - \omega_2^2 + \omega^2)}}{2\sqrt{\Omega_2(\Omega_2^2 - \Omega_3^2)}} \\ &= \frac{2\Omega_2^2 - \omega_3^2 - \omega_2^2 + 2\omega^2 + 4\omega\Omega_2}{4\Omega_2\Delta} = \frac{2(\Omega_2^2 - \frac{1}{2}(\omega_3^2 + \omega_2^2) + \omega^2 + 2\omega\Omega_2)}{4\Omega_2\Delta} \\ &= \frac{(\Omega_2 + \omega)^2 - \frac{1}{2}(\omega_3^2 + \omega_2^2)}{2\Omega_2\Delta}\end{aligned}\quad (3.34)$$

Postępując podobnie z pozostałymi składowymi, otrzymamy układ równań na amplitudy

pięciu składowych drgań jądra rotującego:

$$\begin{aligned}
\sigma_1 &= \frac{1}{\Omega_1} \\
\sigma_2 &= \frac{(\Omega_2 + \omega)^2 - \frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2)}{2\Omega_2\Delta} \\
\sigma_3 &= \frac{-(\Omega_3 + \omega)^2 - \frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2)}{2\Omega_3\Delta} \\
\sigma_4 &= \frac{(\Omega_2 - \omega)^2 - \frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2)}{2\Omega_2\Delta} \\
\sigma_5 &= \frac{-(\Omega_3 - \omega)^2 - \frac{1}{2}(\omega_2^2 + \omega_3^2)}{2\Omega_3\Delta}
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Częstości im odpowiadające wyznaczają centroidy składowych funkcji natężenia GDR:

$$\begin{aligned}
E_{GDR,1} &= \Omega_1; & E_{GDR,2} &= \Omega_2 - \omega; & E_{GDR,3} &= \Omega_3 - \omega \\
E_{GDR,4} &= \Omega_2 + \omega; & E_{GDR,5} &= \Omega_3 + \omega
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Szerokość k -tej składowej funkcji nasilenia GDR w jądrze zdeformowanym, można wyliczyć przy pomocy [Gaa92]:

$$\Gamma_k = \left(\frac{E_{GDR,k}}{E_{GDR}} \right)^{1.9} \cdot \Gamma_0, \tag{3.37}$$

gdzie Γ_0 to szerokość GDR dla stanu podstawowego jądra sferycznego. Centroida funkcji nasilenia GDR dla jądra sferycznego może być oszacowana przez: $E_{GDR} = \hbar\omega_0$, i sparametryzowana dla jąder lekkich [Gaa92]:

$$E_{GDR}^{(1)} = 18A^{-1/3} + 25A^{-1/6} \tag{3.38}$$

dla jąder ciężkich:

$$E_{GDR}^{(2)} = 79A^{-1/3}. \tag{3.39}$$

Metoda termicznych fluktuacji kształtu jąder służy do obliczania efektywnego nasilenia GDR, szerokości połówkowej takiego nasilenia czy też najbardziej prawdopodobnych deformacji jąder w zależności od spinu jądra i jego temperatury. Efektywne nasilenie GDR jest sumą funkcji nasilenia GDR obliczonych dla każdej deformacji jądra z wagami danymi przez prawdopodobieństwo kształtu tego jądra (3.6):

$$\sigma(E_\gamma, T, I) = \sum_{\{def\}} p(\{def\}; I; T) \sum_{k=1}^5 f_k(E_\gamma, \{def\}). \tag{3.40}$$

Porównanie z wynikami eksperymentalnymi pozwala na dyskusję zmian efektywnych kształtów jądra w zależności od energii wzbudzenia. Ponieważ jest to metoda fenomenologiczna, to oprócz składników dobrze zdefiniowanych takich jak model energii potencjalnej, gdzie parametry pozwalają na odtworzenie mas jąder, czy też warunki na energię wibracji zerowych, które był dopasowywane do danych doświadczalnych, są parametry mniej sprecyzowane, takie jak gęstość poziomów jądrowych czy też temperatura.

W dalszej części zostanie przedyskutowany między innymi wpływ wyboru parametryzacji gęstości poziomów jądrowych na kształt funkcji nasilenia GDR i jej szerokości. Ograniczenia tej metody wiążą się z granicami stosowalności na przykład energii makroskopowej jako energii całkowitej jądra. Przy temperaturach poniżej około 0.5 MeV bardzo ważne jest uwzględnienie efektów mikroskopowych poprzez dodanie energii powłokowej. Natomiast energia pairing musi być wzięta pod uwagę przy niskich częstościach rotacji systemu. Z drugiej strony, temperatury powyżej 4-4.5 MeV okazują się być na tyle wysokie, że system przestaje przypominać kroplę płynu i należy uwzględnić efekty ‘rozrzedzonej materii’ zbliżone do tych jakie występują w modelu gazu Fermiego.

Uwaga

Należy jeszcze zwrócić uwagę, że w dalszej części pracy dyskutowana będzie temperatura jądra złożonego, co jest wygodne do rozważań teoretycznych, ale nie odpowiada rzeczywistości eksperymentalnej, gdzie bardziej mierzalna czy też łatwiejsza do oszacowania jest energia wzbudzenia systemu. Badania nad użyciem zamiast temperatury - energii wzbudzenia jądra w metodzie termicznych fluktuacji kształtu, są dobrze zaawansowane [Mat07] ale wyniki nadal są wstępne.

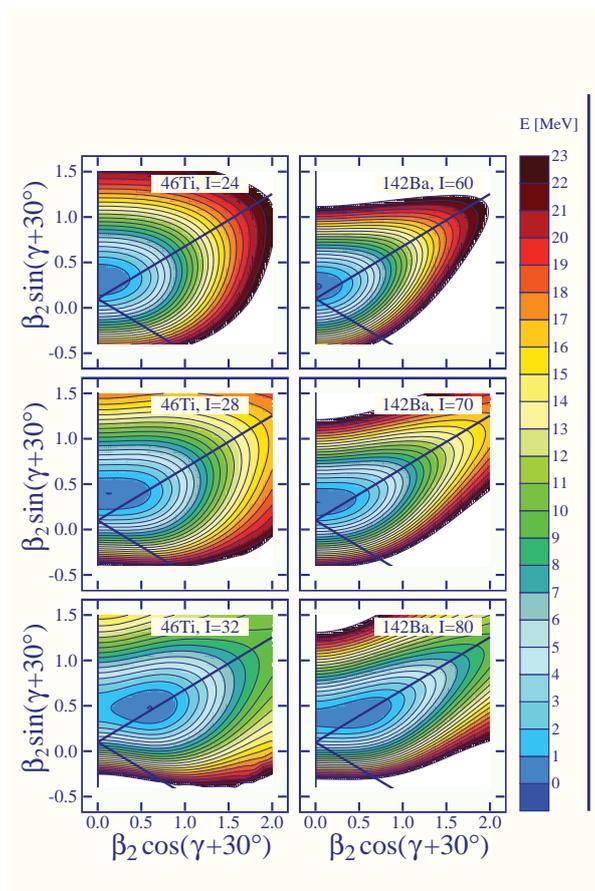
3.2 Uwzględnienie i opis deformacji nieosiowych

Kwadrupolowy parametr deformacji nieosiowej α_{22} wprowadza efekty symetrii zbliżone do tych, które opisują parametry tzw. ‘deformacji trójosiowych’ wyższych rzędów: α_{42} , α_{62} etc. Ważnym testem dobroci minimalizacji energii jest sprawdzenie na ile i jak wpływa na wyniki, zaniechanie tych parametrów w naszych obliczeniach.

Ilustracje rozpoczniemy od przedstawienia typowego zachowania powierzchni energii jąder w funkcji parametrów deformacji kwadrupolowej (β , γ) (wzór 3.2), Rys. 3.1, dla ^{46}Ti (lewa kolumna) i ^{142}Ba (prawa kolumna) dla spinów w okolicy przejścia Jacobi’ego. Jest to obszar deformacji, w którym wpływ deformacji nieosiowych wyższego rzędu w terminach harmonik sferycznych może dawać największe efekty.

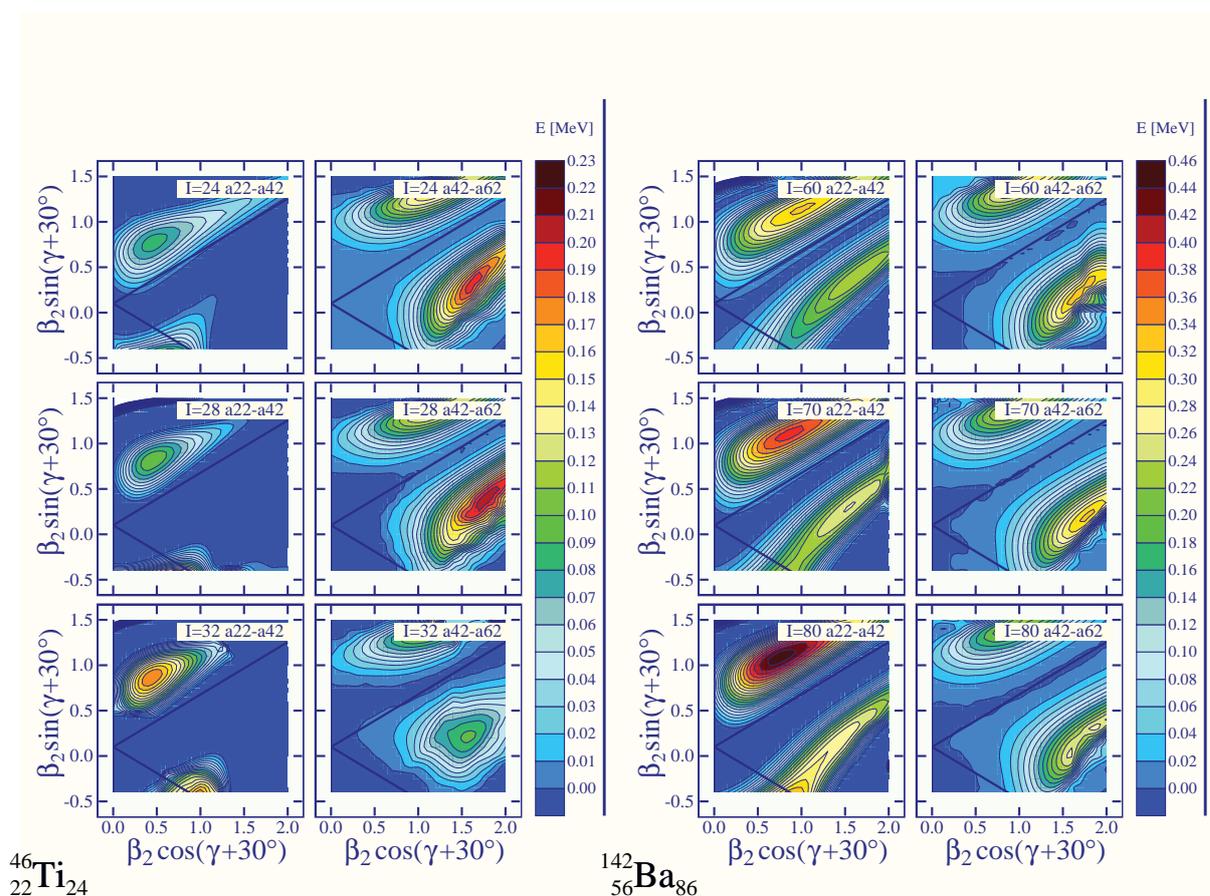
Rysunek 3.2 (lewa kolumna) przedstawia różnice energii zminimalizowanej bez dodatkowych parametrów deformacji nieosiowej, czyli tylko po α_{22} (nazwana $E(\alpha_{22})$), oraz dla energii gdzie wykonano minimalizację też po α_{42} czyli $E(\alpha_{22}, \alpha_{42})$. Porównane jest to z wpływem dodatkowego parametru deformacji α_{62} na energię zminimalizowaną po α_{42} ($E(\alpha_{22}, \alpha_{42}, \alpha_{62})$). Podczas gdy Rys. 3.2 (lewy) został wykonany dla ^{46}Ti przy spinach skorelowanych z tymi na diagramach z Rys. 3.1, to Rys. 3.2 (prawy) pokazuje wpływ wyższych nieosiowości w przypadku jądra cięższego: ^{142}Ba . Należy zauważyć, że minimalizacja po dodatkowych deformacjach nieosiowych obniża energię o 200 keV w przypadku ^{46}Ti i maksymalnie 300 keV w przypadku ^{142}Ba .

Kluczowy wniosek z tego testu wynika z porównania przyczynków do energii całkowitej przedstawionych na Rys. 3.2 z energiami na Rys. 3.1. Dla niskich spinów w ^{46}Ti (na początku przejścia Jacobi’ego) nieosiowości wyższego rzędu pokazują się w obszarze deformacji, gdzie energia całkowita wynosi około 10 MeV a później wraz ze wzrostem spinu - energia się obniża i minimum przesuwa, ale poprawki są nadal na wysokości energii 5-6 MeV. Dla ^{142}Ba ten efekt jest jeszcze bardziej widoczny, bo powierzchnie energii są bardziej strome i tam poprawki pochodzące od nieosiowych parametrów zmieniają energię 10-15 MeV o 300 keV w ekstremalnym przypadku. Można sobie zatem pozwolić na zaniechanie tych efektów, jeśli nawet w przypadku dyskusji o tak delikatnych procesach jak wibracje kwadrupolowe, decyduje kilka MeV ponad minimum globalnym energii dla



Rysunek 3.1: Powierzchnie całkowitej energii potencjalnej zminimalizowane po parametrach deformacji osiowych $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq 12$, dla spinów wokół wartości spinu krytycznego dla przejścia Jacobi'ego w ^{46}Ti (lewa kolumna) i ^{142}Ba (prawa kolumna). Tutaj używamy współrzędnych (β, γ) . Linie proste wyznaczają rodziny kształtów oblate ($\gamma = 60^\circ, -60^\circ$) i prolate ($\gamma = 0^\circ, -120^\circ$).

danego spinu.

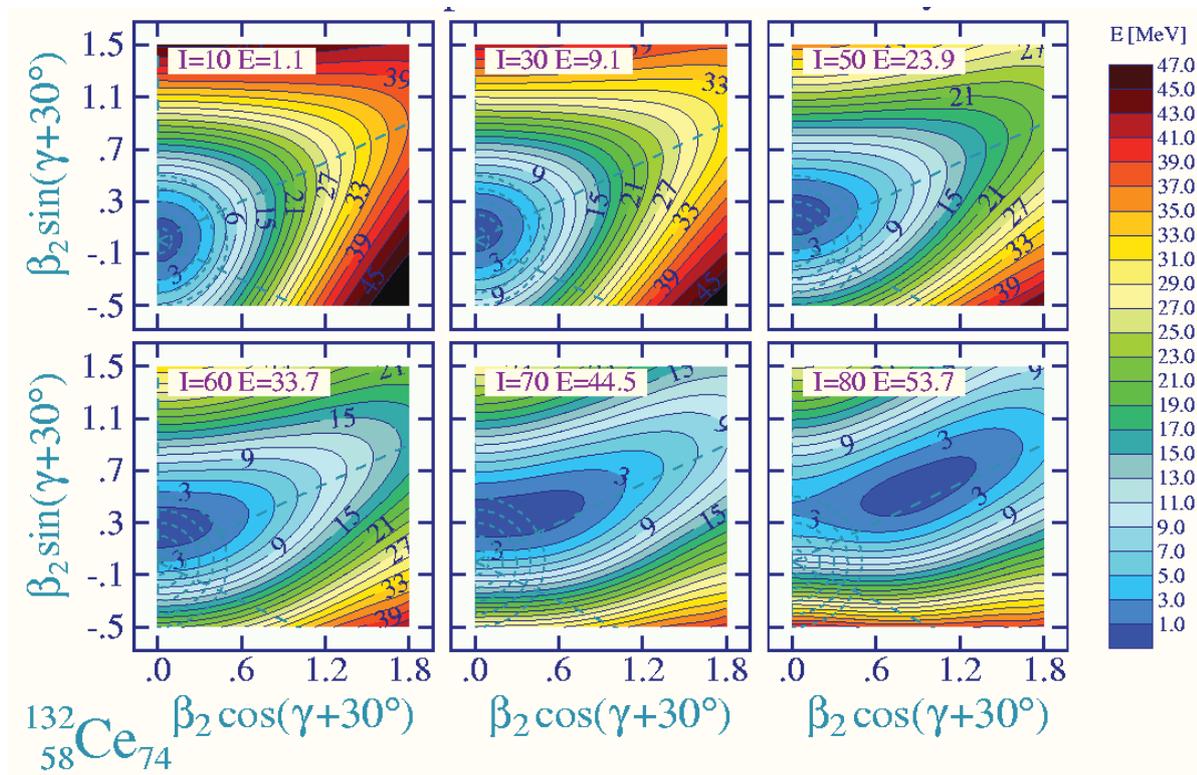


Rysunek 3.2: Powierzchnie różnic całkowitej energii potencjalnej minimalizowanych po osiowych parametrach deformacji $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq 12$ oraz po parametrze deformacji α_{42} : $E(\alpha_{22}) - E(\alpha_{22}, \alpha_{42})$ (lewa kolumna). Prawa kolumna to różnica energii minimalizowanych po α_{42} i energii otrzymanych z minimalizacji po $(\alpha_{42}, \alpha_{62})$ - $E(\alpha_{22}, \alpha_{42}) - E(\alpha_{22}, \alpha_{42}, \alpha_{62})$, dla spinów wokół wartości spinu krytycznego dla przejścia Jacobi'ego w ^{46}Ti (lewy) i ^{142}Ba (prawy).

3.3 Zastosowanie metody Termicznych Fluktuacji Kształtu

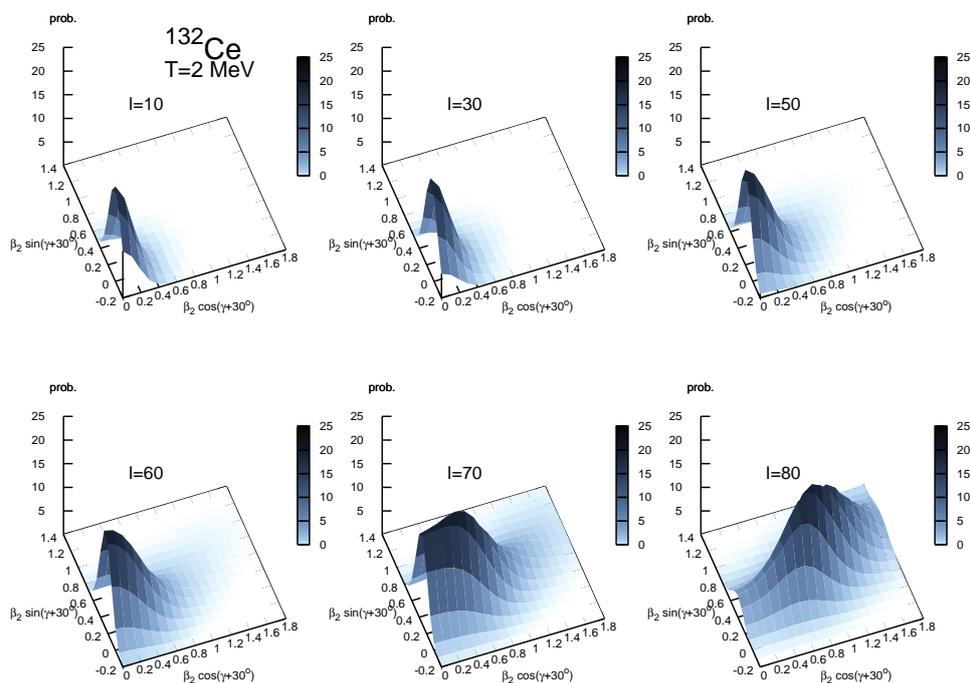
Metoda termicznych fluktuacji kształtu opisana pokrótce w rozdziale 3.1, służy do teoretycznego badania efektywnych kształtów funkcji nasilenia GDR. Szerokość funkcji natężenia GDR jest jedną z kilku wielkości fizycznych, które mogą rzucić światło na ewidencję eksperymentalną ewolucji kształtu jądra o dużej energii wzbudzenia. Przykładem zastosowania metody termicznych fluktuacji kształtu mogą być obliczenia dla jądra ^{132}Ce , które zostały opublikowane w [V].

Na rysunku 3.3 przedstawione są mapy energii makroskopowej LSD [Pom03] $E_{LSD}(def); I)$ minimalizowane po wyższych stopniach deformacji ($\alpha_{40}, \alpha_{60}, \alpha_{80}$) i rzutowane na powierzchnię β, γ w obszarze spinów $I = 10 - 80\hbar$. Jak można zauważyć minimum

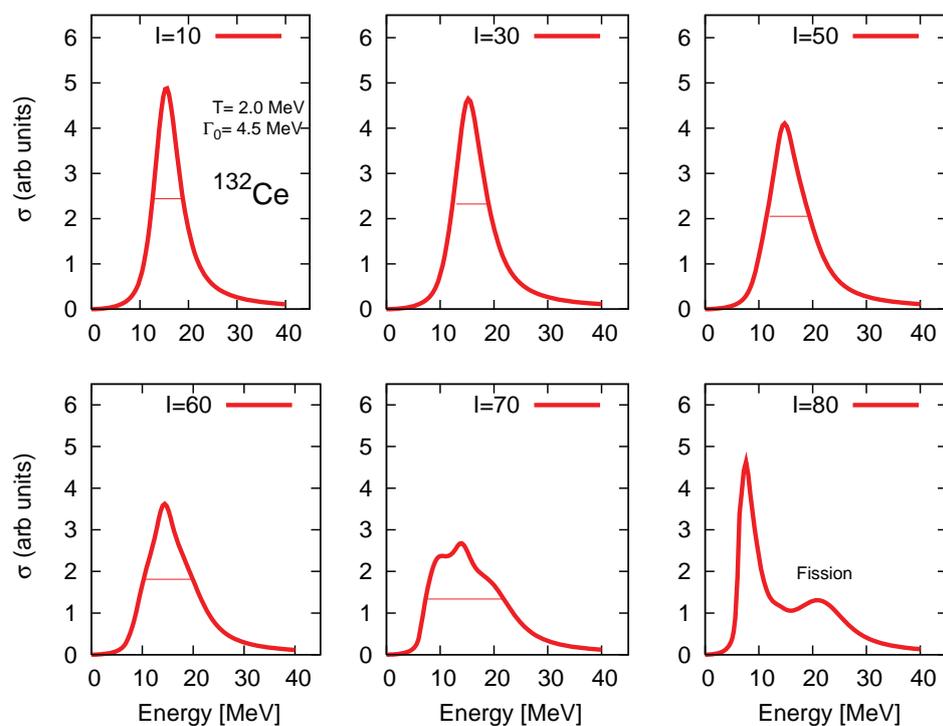


Rysunek 3.3: Energia całkowita znormalizowana do wartości energii jądra sferycznego, $E_{tot} - E_{LSD}(0)$ ma płaszczyźnie β, γ dla ^{132}Ce .

energetyczne (kolor niebieski) migruje po powierzchni deformacji od sferycznych kształtów ($x = 0; y = 0$) poprzez kształty 'oblate' a następnie - kształty trójosiowe $\gamma = (0^\circ; 60^\circ)$ do kształtów typu prolate ($\gamma = 0^\circ$). To właśnie ta migracja minimum energetycznego, która może być przełożona dzięki równaniu 3.6 na zmianę najbardziej prawdopodobnego kształtu jądra wzbudzonego (rysunek 3.4) nazywana jest zgodnie z literaturą, przejściem Jacobi'ego.

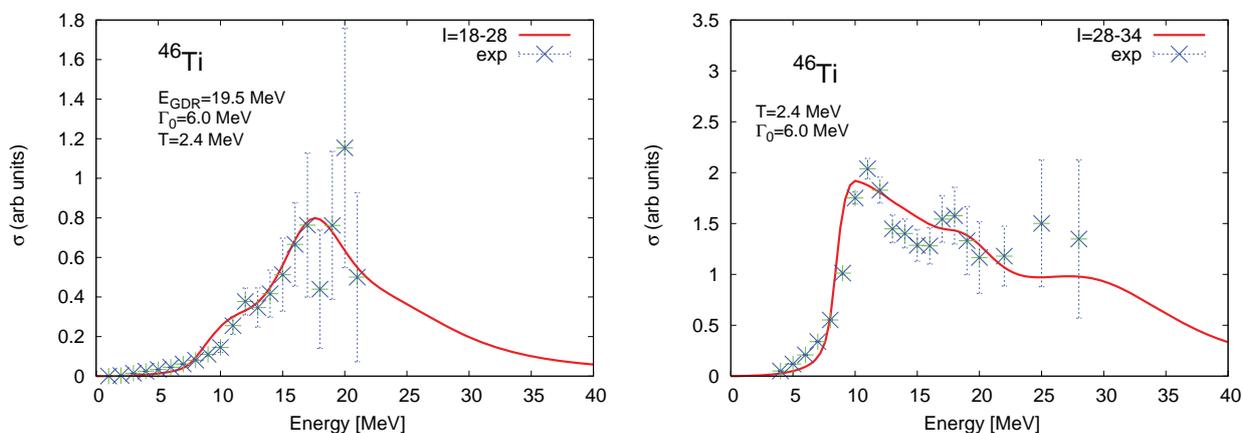


Rysunek 3.4: Prawdopodobieństwo kształtu jądra otrzymane z Równ. 3.6 w funkcji parametrów deformacji dla ^{132}Ce i spinów $I = 10 - 80\hbar$ i temperaturze $T=2$ MeV.



Rysunek 3.5: Efektywne funkcja nasilenia GDR dla ^{132}Ce i spinów $I = 10 - 80\hbar$.

Prawdopodobieństwo kształtu jądra na rysunku 3.4 zostało obliczone przy założeniu, że temperatura układu wynosi $T = 2$ MeV. Rysunek 3.5 przedstawia funkcję nasilenia GDR obliczoną ze wzoru 3.40 dla spinów $L=10, 30, 50, 60, 70$ i $80 \hbar$ przy założeniu szerokości $\Gamma_0 = 4.5$ MeV. Funkcje dla poszczególnych spinów zostały otrzymane poprzez zsumowanie funkcji nasilenia GDR dla poszczególnych deformacji (β, γ) z wagami pochodzącymi z prawdopodobieństw liczonych ze wzoru Boltzmana i przedstawionych na rys. 3.4. Wraz ze wzrostem spinu zmienia się funkcja nasilenia GDR. Funkcja nasilenia jest złożona z trzech lub pięciu funkcji Lorentza odpowiadającym oscylacjom wzdłuż trzech osi głównych lub pięciu składowym jeśli pod wpływem efektu Coriolisa, któremu podlega rotujące jądro, dwie składowe rozdegenerują się [III]. Można zauważyć przy jakich spinach, oscylacje są równoważne w każdym kierunku (np.: $L=10, 30 \hbar$) i mamy trzy funkcje Lorentza o takich samych składowych. Natomiast tam, gdzie te składowe zaczynają się różnić i następuje poszerzenie funkcji nasilenia GDR. Jeśli mamy trzy różne długości osi jądra (kształt trójosiowy) to oznacza, że centroidy trzech funkcji Lorentza mają różne energie ($L=70 \hbar$). W eksperymencie nie jest praktycznie możliwe wybranie jąder o ściśle określonym spinie. Można wyznaczyć jedynie pewny rozkład prawdopodobieństw spinów, którego możemy użyć jako wag przy sumowaniu funkcji nasilenia pochodzących od poszczególnych spinów. W artykule [Maj04] pokazano porównanie z danymi doświadczalnymi dla ^{46}Ti a w [Kmi07] wykonano szczegółowe badania zależności kształtu funkcji nasilenia GDR od przedziału spinów, które bierze się pod uwagę. Przykładem mogą być dwa obszary spinów obserwowanych w dwóch eksperymentach: $^{27}\text{Al} + ^{19}\text{F}$ z energią wiązki 144 MeV [Bre07] oraz $^{18}\text{O} + ^{28}\text{Si}$ z energią wiązki 105 MeV [Maj04], gdzie tworzono jądro ^{46}Ti o energii wzbudzenia 85 MeV ale sposób analizy pozwolił na wybranie dwóch obszarów spinów. Jak widać z ry-

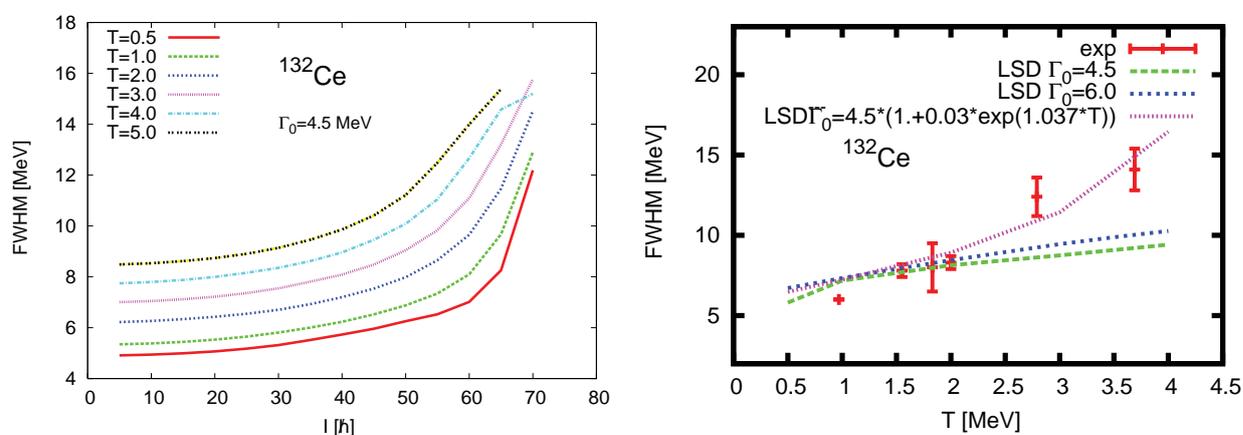


Rysunek 3.6: Efektywna funkcja nasilenia GDR dla ^{46}Ti przy spinach $I = 20 - 30\hbar$ (lewy) i $I = 28 - 34\hbar$ (prawy). Wartości eksperymentalne są wzięte z prac odpowiednio: [Bre07] i [Kmi07].

sunku 3.6, wyniki teoretyczne i eksperymentalne dla podobnych obszarów spinów, zgadzają się dość dobrze. Ten test pokazał, że metoda termicznych fluktuacji kształtów jąder, oparta o wyliczenie powierzchni energii potencjalnych, jest czuła na warunki eksperymentalne. W przypadku danych eksperymentalnych dla jądra złożonego ^{132}Ce [Wie06] można było porównać szerokość funkcji nasilenia GDR dla różnych temperatur $T = 0.5 - 5.0$ MeV. Szerokość połówkowa funkcji nasilenia GDR $\Gamma_{1/2}$ jest to szerokość rozkładu funkcji nasilenia w połowie jej wysokości. Rysunek 3.7 (lewy) przedstawia szerokość funkcji nasilenia GDR $\Gamma_{1/2}$ w funkcji momentu pędu jądra dla tych temperatur a rysunek 3.7 (prawy) pokazuje

porównanie z doświadczeniem, przy założeniu, że uśredniamy po pewnym zakresie krętów. Metoda pracuje całkiem dobrze aż do temperatur $T = 2. - 2.5$ MeV. Dla wyższych temperatur należy uwzględnić fakt, że prawdopodobnie czas życia jądra złożonego zmienia się wraz ze wzrostem temperatury, co można przybliżyć poprzez wprowadzenie do wzoru na szerokość funkcji nasilenia GDR dodatkowego czynnika, zależnego od temperatury jądra.

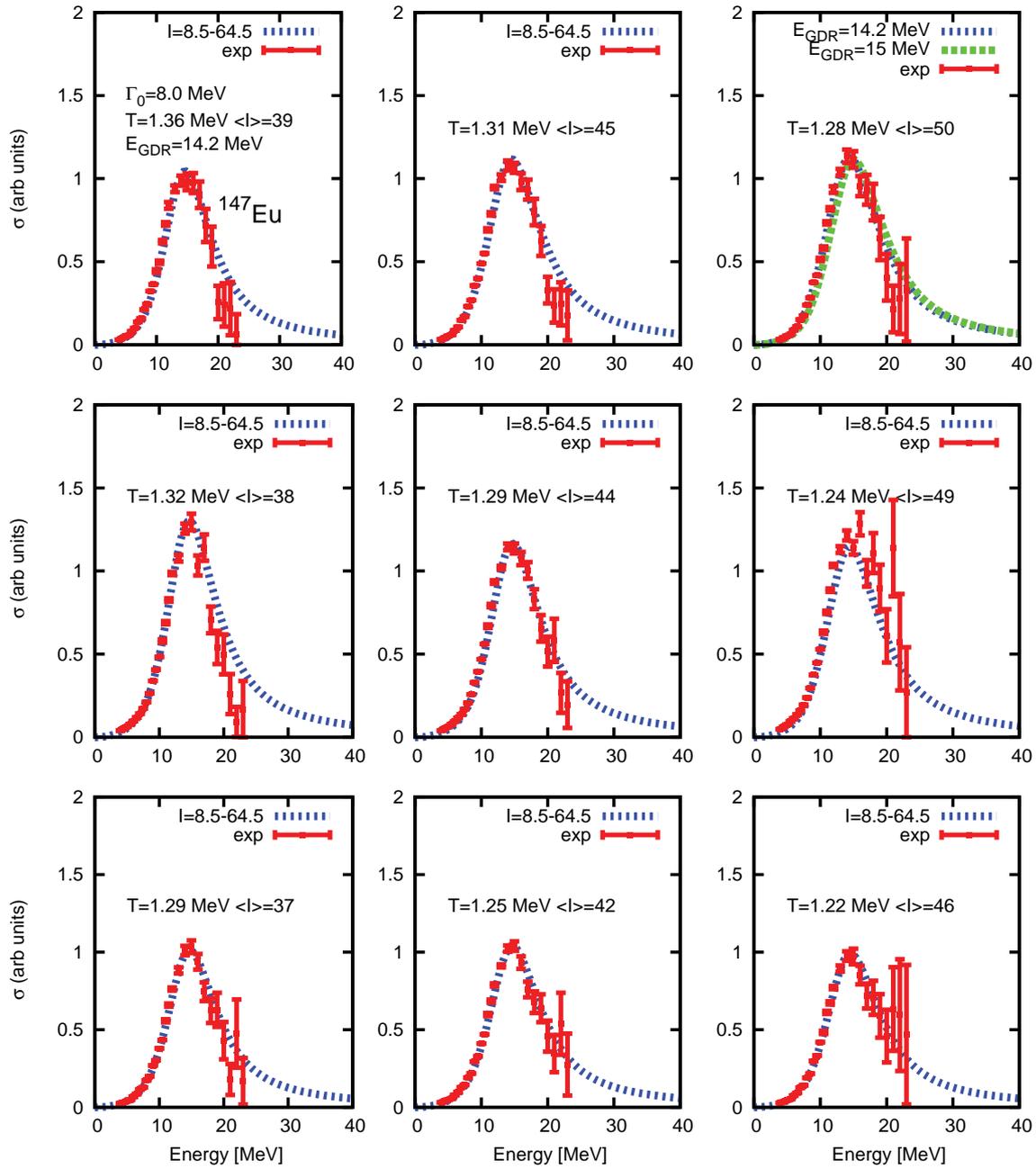
Model LSD posiada parametry dopasowane do mas eksperymentalnych czyli dla jąder zimnych, co może być źródłem rozbieżności. Dla porównania widm teoretycznych i eksperymentalnych można spojrzeć na przypadek ^{147}Eu [Kmi00], gdzie są dane eksperymentalne dla trzech różnych energii wzbudzenia i trzech różnych zakresów krętu (rys. 3.8) a obliczenia teoretyczne pochodzą z [Mat07]. Jak widać metoda termicznych fluktuacji kształtu dobrze odtwarza dane eksperymentalne i jest czuła nie tylko na zakresy spinów ale też na temperaturę jądra złożonego.



Rysunek 3.7: Szerokość połówkowa funkcji nasilenia GDR, $\Gamma_{1/2}$, dla temperatur $T = 0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0$ w funkcji krętu (lewy) oraz szerokości ekperymentalne GDR [Wie06] i przewidywania teoretyczne w funkcji temperatury (prawy) dla ^{132}Ce

Uwaga

W celu łatwego i w miarę szybkiego dostępu do wyników teoretycznych szacujących funkcje nasilenia GDR, ich szerokości połówkowej, wartości maksymalnych i średnich parametrów deformacji, linii yrast itp. dla całego zakresu jąder ($Z=12-112$ i $N=12-174$) została przygotowana strona internetowa (patrz referencja [XX]) połączona z bazą obliczonych map energii LSD. Pozwala ona na otrzymanie plików w formacie *ASCII* i rysunków dla dowolnej temperatury, dużego zakresu spinów i kilku opcji parametryzacji gęstości poziomów jądrowych.



Rysunek 3.8: Nasilenie GDR w funkcji E_γ dla ^{147}Eu ; eksperymentalne (punkty, [Kmi00]) i teoretyczne (rysunek wykonany na potrzeby pracy [Mat07]).

3.4 Gęstość energetycznych poziomów jądrowych

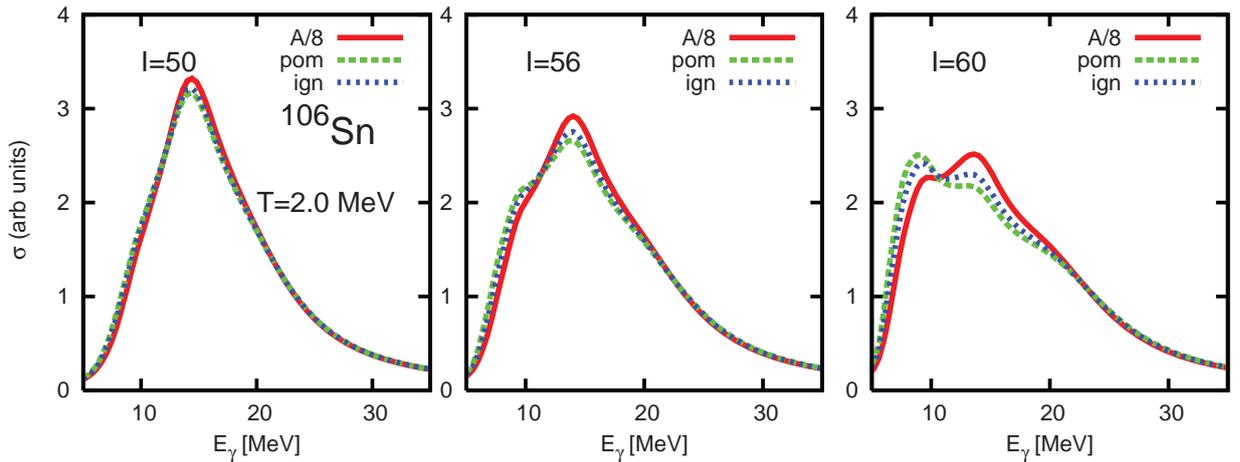
Jednym z podstawowych parametrów używanych w metodzie Termicznych Fluktuacji Kształtów a także w wielu innych stosowanych do opisu procesów jądrowych jest gęstość energetycznych poziomów jądrowych, występująca we wzorze na entropię (równanie 3.5) a co za tym idzie na energię swobodną (wz. 3.4):

$$\begin{aligned} F(\{\text{def}\}, T) &= E_{LSD}(\{\text{def}\}; I) - T(\{\text{def}\}; I) \cdot S(\{\text{def}\}; I, T) \\ &= E_{LSD}(\{\text{def}\}; I) - T^2(\{\text{def}\}; I) a(\text{def}). \end{aligned} \quad (3.41)$$

W artykule [VI], krótko przedyskutowano najczęściej używane parametryzacje gęstości poziomów jądrowych: stałą $a = A/8$ oraz zależne od deformacji jądra $a(\text{def})$ pochodzące z prac [Ign75, Pom07]. Zestaw parametrów do liczenia gęstość poziomów jądrowych przedstawiony w [Pom07] został otrzymany z dopasowania energii swobodnej dla 6 jąder zdeformowanych i 134 jąder sferycznych, uzyskaną z metody Thomasa-Fermiego. Parametry wzoru na gęstość poziomów jądrowych wzięte z [Ign75], został dopasowane by odtworzyć wartości przekrojów czynnych na rozszczepienie w reakcjach prowadzących do ^{180}W - ^{213}At przy energiach wzbudzenia 20-50 MeV.

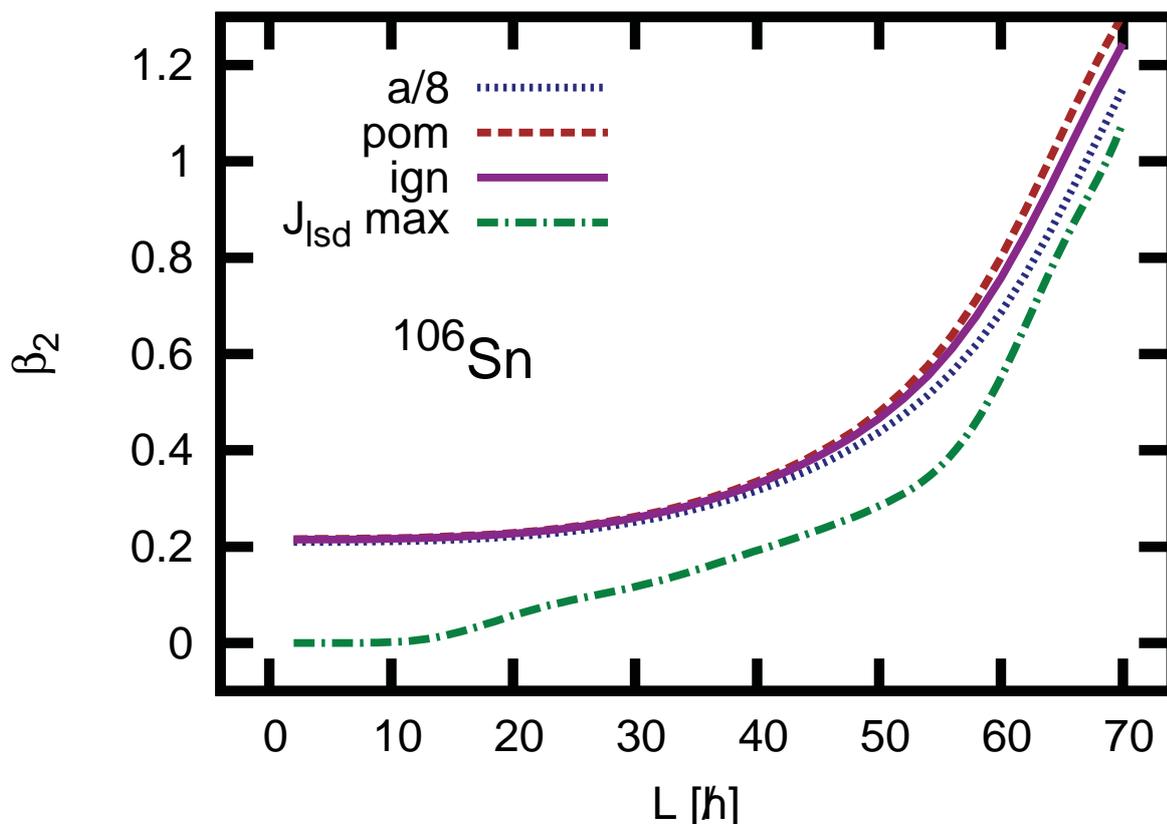
$$a = a_{vol}A + a_{sur}A^{2/3}B_{sur}(\{\alpha\}) + a_{cur}A^{1/3}B_{cur}(\{\alpha\}) - a_{Coul}\frac{Z^2}{A^{1/3}}B_{Coul}(\{\alpha\}). \quad (3.42)$$

W artykule [Ign75] autorzy uwzględniają tylko dwa pierwsze człony powyżej: $a_{vol} = 0.0073 \text{ MeV}^{-1}$ i $a_{sur} = 0.0095 \text{ MeV}^{-1}$, podczas gdy w [Pom07] uwzględniono wszystkie. Odpowiadają one poszczególnym członom energii LSD (wzór 1.156), zaś zgodnie z wyrażeniem powyżej, odpowiednie parametry dane są jako $a_{vol} = 0.09 \text{ MeV}^{-1}$, $a_{sur} = 0.04 \text{ MeV}^{-1}$, $a_{cur} = 0.28 \text{ MeV}^{-1}$ i $a_{Coul} = 0.00146 \text{ MeV}^{-1}$.



Rysunek 3.9: Funkcje nasilenia GDR dla ^{106}Sn i spinów $50\hbar$, $56\hbar$ i $60\hbar$ liczone z różnymi wyrażeniami na parametr gęstości poziomów jądrowych a : 1) ($A/8$), 2) Ignatyuk [Ign75] (ign) i 3) Pomorski [Pom07] (pom).

Przy spinach do $I=50 \hbar$ dla ^{106}Sn (Rys. 3.9) nie widać różnicy w funkcjach nasilenia GDR liczonych z powyższymi wariantami gęstości; przy dalszym zwiększaniu spinu pojawia się trójosiowość a z nią niskoenergetyczne składowe, które pochodzą od różnej długości

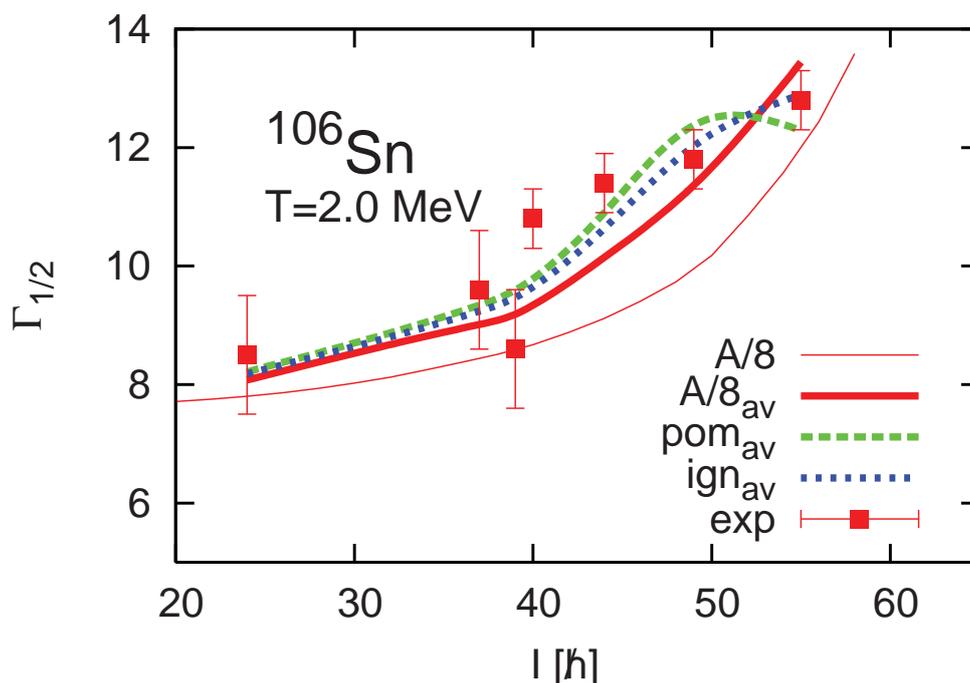


Rysunek 3.10: Średnia szerokość połówkowa GDR dla ^{106}Sn w funkcji spinu jądra, przy stałych wartościach parametru gęstości ($A/8$), oraz z parametryzacjami Ignatyuk (ign) i Pomorski (pom). Dla porównania pokazane są wyniki nie uśrednione z $a = A/8$ (szczegóły w [VI]).

półosi jądra. Oznacza to, że wartość spinów, dla których mamy początek i koniec przejścia Jacobi'ego może się nieco różnić w zależności od wyboru parametrów gęstości.

Rysunek 3.10 pokazuje, że przyczyną takiego stanu rzeczy jest zmiana średniego wydłużenia jądra, gdyż średni kształt jądrowy, przedstawiony tutaj tylko przy pomocy parametru β , a mający w podtekście inne parametry deformacji, jest dla danego spinu różny w zależności od wyboru parametru gęstości. Natomiast zmiana średniej wartości parametru deformacji β , jest spowodowana modyfikacją entropii zależnej od parametrów gęstości poziomów (wzór 3.5), co później wpływa na rozkład prawdopodobieństwa na płaszczyźnie deformacji (x,y). Zmiany są jednak zbyt małe by można je było zaobserwować na rysunkach typu Rys. 3.4.

Jak już zostało wspomniane wcześniej, w doświadczeniu mamy pewien rozkład spinów, który definiuje spin średni. Na rysunku 3.11 przedstawiono szerokości połówkowe funkcji nasilenia GDR, $\Gamma_{1/2}$, dla ^{106}Sn w funkcji spinu i stałego parametru gęstości (linia cienka) a także dla $\Gamma_{1/2}$ liczonego dla uśrednionych spinów $[-10\hbar, I+10\hbar]$ (linie grube). Trudno jest zawyrokować, która parametryzacja gęstości poziomów jest najlepsza, ale parametry uwzględniające kształty jąder dają lepsze odwzorowanie wartości eksperymentalnych, co podkreśla potrzebę właściwego liczenia powierzchni energii i wyboru parametryzacji kształtu jądra.



Rysunek 3.11: Ewolucja średniego wydłużenia jądra w temperaturze $T=2$ MeV dla ^{106}Sn w funkcji spinu jądra, przy stałych wartościach parametru gęstości ($A/8$), oraz z parametryzacjami Ignatyuk (ign) i Pomorski (pom).

Aby zilustrować czułość wyboru parametryzacji gęstości poziomów jądrowych w zależności od temperatury jądra, na rysunku 3.12 pokazano ewolucję szerokości połówkowej GDR dla jądra ^{132}Ce , otrzymanej ze stałym parametrem gęstości (ciągła, czerwona linia), z parametryzacjami zależnymi od kształtu jądra: Ignatyuk (ign-różowa, kropkowana) i Pomorski (pom-niebieska, przerywana). Ponieważ zależność od temperatury jest bardzo podobna w każdym z tych przypadków, kolejnym punktem było uwzględnienie warunków eksperymentalnych. Niestety rozkład spinów nie był mierzony ale przy założeniu, że dla niskich temperatur wysokie spiny są mniej prawdopodobne niż niskie a przy wysokich temperaturach ($T > 2.5$ MeV) raczej populowane będą wysokie spiny, można było odtworzyć wyniki eksperymentalne ($A/8_{cut}$ - zielona, przerywana krzywa).

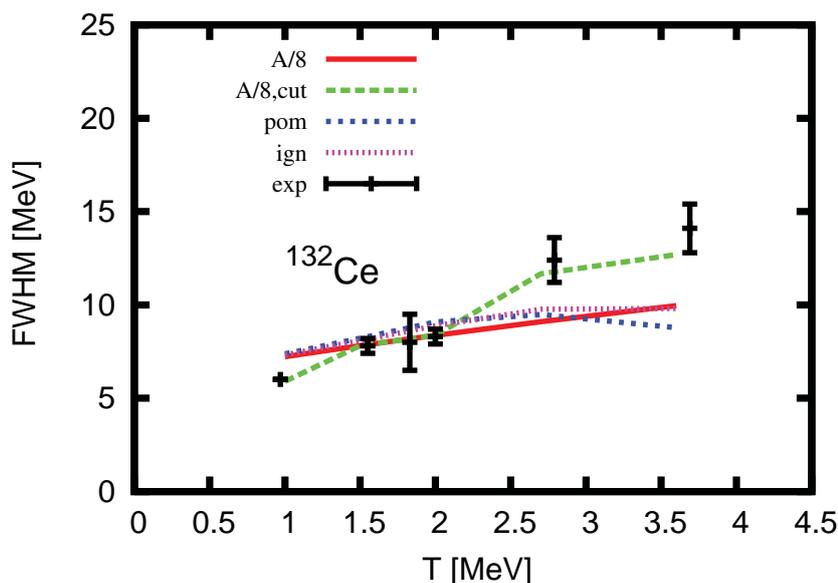
Podsumowując, parametryzacje gęstości poziomów jądrowych zmieniają kształty funkcji nasilenia GDR dla poszczególnych spinów i te różnice są na tyle duże, że przy znajomości rozkładów spinów eksperymentalnych można byłoby je badać doświadczalnie. Zależność od temperatury układu jest mniej widoczna.

Uwaga

Kolejna uwaga dotyczy sposobu minimalizacji energii w metodzie termicznych fluktuacji kształtu. Wyniki pokazane tutaj są otrzymane przy założeniu, że energia makroskopowa decyduje o kształcie jądra więc energia liczona jest w pięciowymiarowej przestrzeni parametrów deformacji a następnie rzutowana na płaszczyznę dwuwymiarową.

Przy założeniu że gęstość poziomów jądrowych jest niezależna od deformacji jądra, nie ma znaczenia czy minimalizowana jest energia potencjalna czy też energia swobodna, która zależy od entropii a przez to od gęstości poziomów jądrowych.

Jednak zakładając, że będzie użyta gęstość poziomów jądrowych zależna od kształtu



Rysunek 3.12: Średnia szerokość połowkowa GDR dla ^{132}Ce w funkcji temperatury, przy stałych wartościach parametru gęstości ($A/8$), oraz z parametryzacjami Ignatyuk (ign) i Pomorski (pom). Dla porównania pokazane są wyniki nie uśrednione z $a = A/8$ ($A/8,\text{cut}$).

jądra, wstępne testy potwierdzają, że przy badaniu jąder szybko rotujących w temperaturze 2 MeV - wpływ sposobu minimalizacji (minimalizacja energii potencjalnej czy energii swobodnej) to około 3 MeV różnicy, pochodzącej od członu aT^2 w energii swobodnej, a przy wyższych temperaturach ten przyczynek może wzrosnąć do około 10 MeV. Przekłada się to także na kształt funkcji nasilenia GDR oraz na jej szerokość i powinno być zbadane szczegółowo w przyszłości.

3.5 Anizotropia promieniowania GDR

Układy eksperymentalne mogą być tak zaprojektowane, żeby pokrywały różne kąty pod którymi promieniowanie dochodzi do detektorów, co pozwala na dyskusję rozkładów kątowych emitowanych kwantów γ czy też cząstek albo produktów rozszczepienia czy residuów wyparowania. W artykule [Maj92] i w referowanych tam pracach stwierdzono, że rozkład kątowy wysokoenergetycznych kwantów γ pozwala na otrzymanie informacji o strukturze gorących jąder z widm doświadczalnych. Szczególnie jest to przydatne przy badaniu efektywnych kształtów rotujących jąder. Składowe funkcji nasilenia GDR odpowiadające vibracji wzdłuż osi głównych (lub rozszczepionych przez siły Coriolisa) mają odmienne rozkłady kątowe w układzie laboratoryjnym, w zależności od tego czy vibracje są równoległe czy prostopadłe do kierunku wektora całkowitego momentu pędu. Zatem można stwierdzić, że współczynniki rozkładu kąтового są czułe nie tylko na wielkość deformacji ale też na formę i orientację rozkładu gęstości. Rozkład kątowy kwantów γ , a w szczególności wielkość anizotropii, zależy w dużej mierze od fluktuacji kształtu jądra.

Współczynnik anizotropowy A_2 pochodzi z dopasowania metodą najmniejszych kwadratów, liczby zliczeń kwantów γ pod różnymi kątami do wzoru: $N(\theta) = A_0(1 + A_2P_2(\cos\theta))$, gdzie P_2 to wielomian Legendra drugiego rzędu a θ to kąt między kierunkiem danego

kwantu γ i osi wiązki. Ten współczynnik można wyrazić więc z jednej strony przez stosunki i różnice liczby zliczeń N^D kwantów γ zmierzonych pod danym kątem:

$$A_2 = \frac{N^D(0) - N^D(90)}{N^D(90) + 0.5N^D(0)}, \quad (3.43)$$

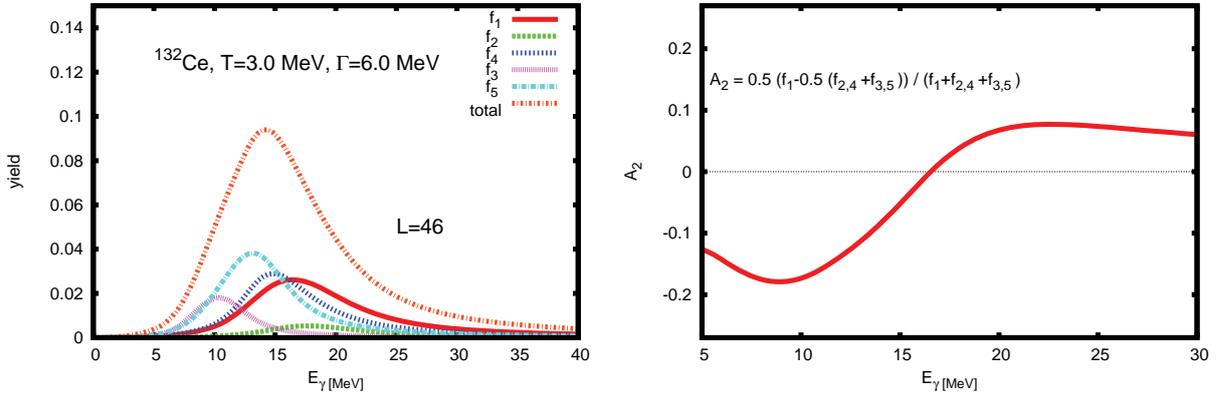
a z drugiej strony – jako odpowiedni stosunek natężeń składowych funkcji nasilenia GDR (f_1, f_2, f_3) opisanych wzorem 3.7 w postaci:

$$A_2 = \frac{1}{2} \frac{f_1(E_\gamma) - 0.5(f_2(E_\gamma) + f_3(E_\gamma))}{f_1(E_\gamma) + f_2(E_\gamma) + f_3(E_\gamma)}. \quad (3.44)$$

Przy pomocy tego wzoru dla trzech składowych GDR, w artykule [Cam94] odtworzone zostały eksperymentalne rozkłady kątowe dla izotopów Er przy kilku spinach średnich. Zaproponowaliśmy więc aby podobny wzór zastosować w przypadku, gdy mamy pięć składowych funkcji nasilenia GDR

$$A_2 = \frac{1}{2} \frac{f_1(E_\gamma) - 0.5(f_{2;4}(E_\gamma) + f_{3;5}(E_\gamma))}{f_1(E_\gamma) + f_{2;4}(E_\gamma) + f_{3;5}(E_\gamma)}, \quad (3.45)$$

gdzie $f_1(E_\gamma)$ to drgania wzdłuż osi rotacji a pozostałe czynniki odpowiadają drganiom wzdłuż osi prostopadłych do osi rotacji ale rozszczepionych przez siły Coriolisa.



Rysunek 3.13: Składowe funkcji nasilenia GDR (lewy) i współczynnik anizotropii całkowany po całej płaszczyźnie deformacji dla spinu $46 \hbar$ dla ^{132}Ce i $\Gamma=4.5$ MeV.

Rysunek 3.13 przedstawia zastosowanie tej metody w praktyce. Na lewym rysunku przedstawione są składowe funkcji nasilenia i ich złożenie, a na prawym pokazano jak zmienia się współczynnik anizotropii. Te wyniki pomogły w dyskusji wyników eksperymentalnych w pracy [Dia12], gdzie oszacowano średni współczynnik anizotropowy dla GDR, a także współczynnik tłumienia (quenchnig factor). Pozwoliło to na rozseparowanie części zdarzeń pochodzących z GDR od tzw. procesu Prompt Dynamical Dipole (PDD). PDD jest to określenie dotyczące emisji kwantów γ z jądra pomiędzy momentem fuzji a przed ustabilizowaniem się drgań protonów względem neutronów.

Zakres energii emitowanych kwantów jest podobny dla GDR i PDD [Dia12] więc przy analizie potrzebne jest oszacowanie funkcji nasilenia GDR. Tak więc metoda termicznych fluktuacji kształtu jąder oparta na obliczonych teoretycznie powierzchniach energii potencjalnych z modelu kropkowego uwzględniającego olbrzymią różnorodność form, pozwala na

badanie zmian kształtów w funkcji spinu i temperatury a zatem na próbę odtworzenia realiów doświadczeń.

Studiowanie gigantycznych rezonansów dipolowych może odbywać się na wielu płaszczyznach i dotyczyć albo porównania wprost z danymi pochodzącymi z analizy takimi jak: funkcje nasilenia GDR, szerokości połówkowe czy współczynniki anizotropowe [Maj94], albo jako dodatkowy przyczynek, który nakłada się na widma emisji PDD.

3.6 Wibracje kwadrupolowe

Przy dyskusji zmian kształtu jądra w funkcji spinu takich jak przejścia Jacobi'ego czy Poincaré'go, ważna jest nie tylko deformacja statyczna systemu, ale też jego deformacje dynamiczne, gdyż nawet w stanie podstawowym istnieje ruch jądra w postaci tzw. drgań zerowych. Jest to efekt, który powoduje zmianę kształtu średniego. Podejście kwantowe pozwala na oszacowanie wielkości energii drgań zerowych, co może być w przyszłości zastosowane do metody termicznych fluktuacji kształtu w miejsce fenomenologicznego wzoru 3.38.

Opis ruchu jądra jako całości przy pomocy hamiltonianu kolektywnego był zaproponowany przez Bohra i Motelsona [Boh75] i opierał się na analogii do oscylatora harmonicznego. Porównanie zamieszczone w tabeli (Tabela 3.1) pozwoliło na interpretację stałych normalizacyjnych występujących w równaniu Schrodingera (3.46).

$$[\hat{T} + V(\alpha)]\Psi_n(\alpha) = E_n \Psi_n(\alpha), \quad (3.46)$$

gdzie T to operator kolektywnej energii kinetycznej, zależący od tensora masowego a operator energii potencjalnej, $V(\alpha)$ w prezentowanych obliczeniach jest to cięcie powierzchni energii potencjalnej w minimum tej energii dla danego spinu, w funkcji deformacji α .

Celem tych obliczeń jest rozwiązanie równania Schrödingera, co pozwoli na znalezienie funkcji falowych potrzebnych do wyznaczenia najbardziej prawdopodobnej wartości deformacji $\alpha_{\lambda\mu}$, średniej deformacji $\bar{\alpha}_{\lambda\mu}$ i związanych z nią wartości dyspersji $\sigma_{\lambda\mu}$:

$$\langle \alpha_{\lambda\mu}^2 \rangle = \int d\alpha \Psi_n^*(\alpha) \alpha_{\lambda\mu}^2 \Psi_n(\alpha) \rightarrow \bar{\alpha}_{\lambda\mu} = \sqrt{\langle \alpha_{\lambda\mu}^2 \rangle}, \quad (3.47)$$

$$\sigma_{20} \equiv \sqrt{\langle \alpha_{20}^2 \rangle - \langle \alpha_{20} \rangle^2} \quad (3.48)$$

$$\sigma_{22} \equiv \sqrt{\langle \alpha_{22}^2 \rangle - \langle \alpha_{22} \rangle^2}. \quad (3.49)$$

Relacje 3.47 opisują wartości oczekiwane kwadratu deformacji oraz odpowiadających im r.m.s. odchyłeń dla wibracji kwadrupolowych, czy też wibracji oktupolowych gdy $\alpha = \alpha_{30}$.

Wibracje β i γ

Hamiltonian w modelu rotacyjno-wibracyjnym dla zmiennych kwadrupolowych: α_{20} , α_{22} może być zapisany w terminach kątów Eulera i zmiennych wewnętrznych: dla energii kinetycznej::

$$T_{vib} = \sum_k \frac{M_k'^2}{2J_k(a_\nu)} - \frac{1}{2} B \left(\frac{d\alpha_{20}^2}{dt} + 2 \frac{d\alpha_{22}^2}{dt} \right). \quad (3.50)$$

Tablica 3.1: Podobieństwa między klasycznym i kolektywnym oscylatorem harmonicznym.

Klasyczny Oscylator Harmoniczny	Kolektywny Oscylator Harmoniczny
x $u(x)$	β $\phi(\beta)$
$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}u(x) - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2u(x) = 0$	$\frac{d^2}{d\beta^2}\phi(\beta) + \frac{2BE}{\hbar^2}\phi(\beta) - \frac{CB}{\hbar^2}\beta^2\phi(\beta) = 0$
$\alpha = \frac{m\hbar\omega}{\hbar^2}$ $\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$	$\alpha' = \sqrt{\frac{CB}{\hbar^2}} = \frac{1}{\sigma^2}$ $\lambda' = \frac{2BE}{\hbar^2}$
$\kappa = \sqrt{\alpha}x$ $d\kappa = \sqrt{\alpha}dx$	$\xi = \sqrt{\alpha'}\beta = \sqrt{\frac{1}{\sigma^2}}\beta = \frac{1}{\sigma}\beta$ $d\xi = \sqrt{\alpha'}d\beta = \sqrt{\frac{1}{\sigma^2}}d\beta = \frac{1}{\sigma}d\beta$
$N_n = \sqrt{\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2^n n!}} = \alpha^{1/4} \cdot FACT$	$N'_n = \sqrt{\sqrt{\frac{\alpha'}{\pi}} \frac{1}{2^n n!}} = \sigma^{-1/2} \cdot FACT$
$u(x) = N_n \exp(-\kappa^2/2) H_n(\kappa)$ $u(x) = \alpha^{1/4} \cdot FACT \cdot \exp(-\kappa^2/2) H_n(\kappa)$	$\phi(\beta) = N'_n \exp(-\xi^2/2) H_n(\xi)$ $\phi(\beta) = \sigma^{-1/2} \cdot FACT \cdot \exp(-\xi^2/2) H_n(\xi)$

gdzie moment bezwładności $J_k(a_\nu)$ jest dany przez równanie bryły sztywnej. Zakładamy tutaj, że kształty równowagowe muszą być osiowosymetryczne a wibracje powodują istnienie kształtów nieosiowo symetrycznych. Energia potencjalna:

$$V(\alpha'_{20}, \alpha'_{22}) = \frac{1}{2} C_{20} \alpha'^2_{20} + C_{22} \alpha'^2_{22} \quad (3.51)$$

i energia rotacyjna to:

$$T_{rot}(\alpha'_{20}, \alpha'_{22}) = \frac{I(I+1)}{2\mathcal{J}}. \quad (3.52)$$

Jeśli traktować problem wibracji w rotującym systemie ściśle, należy wykorzystać wyrowadzenia z [Eis87] dla oscylatora pięciowymiarowego kwadrupolowego:

$$\hat{T} = \underbrace{\sum_k \frac{M_k'^2}{2J_k(\alpha_{20}, \alpha_{22})}}_{\hat{T}_{rot}} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2B} \left[\frac{d^2}{d\alpha_{20}^2} + \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\alpha_{22}^2} \right]}_{\hat{T}_{vib}}, \quad (3.53)$$

gdzie element objętości to:

$$d\tau(\alpha_{20}, \alpha_{22}) = D(\alpha_{20}, \alpha_{22})d\alpha_{20}d\alpha_{22}. \quad (3.54)$$

W pierwszym przybliżeniu można zaniedbać rotację przechodząc z układu laboratoryjnego do wewnętrznego, co pozwala na ominięcie kątów Eulera.

Profil potencjału musi być dopasowany dwuwymiarową formułą paraboliczną

$$V(\alpha'_{20}, \alpha'_{22}) = \frac{1}{2}C_{20}\alpha'^2_{20} + C_{22}\alpha'^2_{22}. \quad (3.55)$$

Głównym celem jest otrzymanie dyspersji wartości deformacji kwadrupolowych: osiowej i nieosiowej $\alpha'_{20}, \alpha'_{22}$ albo w β, γ .

Zacznijmy od parametru β . Należy rozwiązać równanie:

$$\hat{H}(I) = \hat{T}_{vib}(\alpha_{20}, \alpha_{22}) + \hat{T}_{rot}(I) + V(\alpha_{20}, \alpha_{22}) \quad (3.56)$$

$$\hat{H}(I)\Psi_{I\nu}(\alpha_{20}, \alpha_{22}) = E_{I\nu}\Psi_{I\nu}(\alpha_{20}, \alpha_{22}). \quad (3.57)$$

Baza jest zdefiniowana jako:

$$\phi_n(\alpha_{\lambda\mu}) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}2^n n!}} \frac{1}{\sqrt{A}} e^{-\alpha_{\lambda\mu}^2/2\sigma^2} H_n\left(\frac{\alpha_{\lambda\mu}}{\sigma}\right). \quad (3.58)$$

W celu rozwiązania równania Schrödinger'a mamy:

$$\Psi_{I\nu}(\alpha_{\lambda\mu}) = \sum_n c_{\nu n} \phi_n(\alpha_{\lambda\mu}), \quad (3.59)$$

$$\hat{H}\Psi_m(x) = E_m\Psi_m(x) \quad (3.60)$$

$$\sum_n \hat{H}c_{mn}\phi_n(x) = E_m \sum_n c_{mn}\phi_n(x), \quad (3.61)$$

gdzie mnożąc przez $\phi_{n'}(x)^*$ i całkując otrzymujemy:

$$\sum_n c_{mn} \int \phi_{n'}(x)^* \hat{H}\phi_n(x) dx = E_m \sum_n c_{mn} \int \phi_{n'}(x)^* \phi_n(x) dx \quad (3.62)$$

$$\sum_n c_{mn} \int \phi_{n'}(x)^* \hat{H}\phi_n(x) dx = E_m \sum_n c_{mn} \delta_{nn'} \quad (3.63)$$

$$H_{nn'} = \int \phi_{n'}(x)^* \hat{H}\phi_n(x) dx \quad (3.64)$$

$$c_{mn'} = \sum_n c_{mn} \delta_{nn'} \quad (3.65)$$

$$\sum_n c_{mn} H_{nn'} = E_m \sum_n c_{mn} \delta_{nn'} \quad (3.66)$$

$$\sum_n c_{mn} (H_{nn'} - E_m \delta_{nn'}) = 0, \quad (3.67)$$

Ostatnie równanie pokazuje jak można zdiagonalizować równanie Schrödinger'a.

Średnia deformacja to:

$$\langle \alpha_{20}^{\circ} \rangle = \langle \Psi_{I\nu} | \alpha_{20} | \Psi_{I\nu} \rangle, \quad (3.68)$$

a średnia wartość kwadratowa to:

$$\langle \alpha_{20}^2 \rangle = \langle \Psi_{I\nu} | \alpha_{20}^2 | \Psi_{I\nu} \rangle. \quad (3.69)$$

Dyspersję można otrzymać przez:

$$\langle (\alpha_{20} - \alpha_{20}^{\circ})^2 \rangle = \langle \alpha_{20}^2 \rangle - \langle \alpha_{20}^{\circ} \rangle^2. \quad (3.70)$$

Amplituda prawdopodobieństwa, że jądro w stanie Ψ będzie miało deformację α :

$$\langle \alpha | \Psi \rangle = \Psi(\alpha), \quad (3.71)$$

a gęstość prawdopodobieństwa wynosi: $|\langle \alpha | \Psi \rangle|^2$ gdzie:

$$\langle \alpha | \Psi \rangle = \int d\alpha' \rho(\alpha') \eta_{\alpha}^*(\alpha') \Psi(\alpha') = \rho(\alpha) \Psi(\alpha), \quad (3.72)$$

ponieważ: $\langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle = \delta(\alpha_1 - \alpha_2)$ ale normalizacja $|\alpha\rangle$ jest nieznana. Amplituda prawdopodobieństwa: $\langle \alpha | \Psi \rangle = \rho(\alpha) \Psi(\alpha)$ i gęstość: $|\langle \alpha | \Psi \rangle|^2 = \rho^2(\alpha) |\Psi(\alpha)|^2$. Sprawdzając normalizację mamy:

$$\langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle = \int d\alpha' \rho(\alpha') \eta_{\alpha_1}^*(\alpha') \eta_{\alpha_2}(\alpha') = \delta(\alpha_1 - \alpha_2), \quad (3.73)$$

więc:

$$\eta_{\alpha} = \frac{\delta(\alpha_1 - \alpha_2)}{\sqrt{\rho(\alpha)}} \quad (3.74)$$

$$\langle \alpha | \Psi \rangle = \sqrt{\rho(\alpha)} \Psi(\alpha) \quad (3.75)$$

$$|\langle \alpha | \Psi \rangle|^2 = \rho(\alpha) |\Psi(\alpha)|^2. \quad (3.76)$$

Przypominając równanie 3.2:

$$\alpha_{20} = \beta \cos \gamma \quad (3.77)$$

$$\alpha_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma \quad (3.78)$$

Można dostać $\langle \beta^2 \rangle$ licząc wartość średnią α_{20} i α_{22} oddzielnie i używając notacji:

$$\langle \beta^2 \rangle = \langle \alpha_{20}^2 \rangle + 2 \langle \alpha_{22}^2 \rangle \quad (3.79)$$

ponieważ:

$$\begin{aligned} \langle \beta^2 \rangle &= \langle \Psi | (\alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2) | \Psi \rangle \\ &= \langle \psi_{20} \psi_{22} | (\alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2) | \psi_{20} \psi_{22} \rangle \\ &= \langle \psi_{20} | \alpha_{20}^2 | \psi_{20} \rangle + 2 \langle \psi_{22} | \alpha_{22}^2 | \psi_{22} \rangle \\ &= \langle \alpha_{20}^2 \rangle + 2 \langle \alpha_{22}^2 \rangle \end{aligned} \quad (3.80)$$

i $\beta_{dyn} = \sqrt{\langle \beta^2 \rangle}$.

Dla parametru γ - sytuacja jest bardziej skomplikowana i można liczyć:

$$\langle \tan \gamma \rangle = \sqrt{2} \frac{\alpha_{22}}{\alpha_{20}} \quad (3.81)$$

lub dostać go z jednego z równań:

$$\langle \cos \gamma \rangle = \left\langle \frac{\alpha_{20}}{\sqrt{\alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2}} \right\rangle \quad (3.82)$$

$$\langle \sin \gamma \rangle = \left\langle \frac{\sqrt{2}\alpha_{22}}{\sqrt{\alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2}} \right\rangle. \quad (3.83)$$

Wibracje na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{22})$ wymagają rozwiązania problemu dwuwymiarowego i są ważne przy dyskusji przejść Jacobi'ego, podczas gdy wibracje oktopolowe można przybliżyć w naszym kontekście w pierwszym etapie przez podejście jednowymiarowe; ten aspekt będzie niezbędny przy rozszerzeniu dyskusji przejść Poincaré'go (następny rozdział).

W artykule [XIX] pokazano sposób w jaki jest liczona dyspersja dla deformacji kwadrupolowych $(\sigma_{20}, \sigma_{22})$.

$$\sigma_{20} \equiv \sqrt{\langle \alpha_{20}^2 \rangle - \langle \alpha_{20} \rangle^2} \quad (3.84)$$

$$\sigma_{22} \equiv \sqrt{\langle \alpha_{22}^2 \rangle - \langle \alpha_{22} \rangle^2}. \quad (3.85)$$

Wykorzystano tutaj dwa przybliżenia związane z tensorem masowym i z funkcją potencjału. Według klasycznego opisu energia kinetyczna zależy od parametrów masowych oraz od pochodnych funkcji α i można ją zapisać jako:

$$T_{class.} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu} \sum_{\lambda', \mu'} B_{\alpha_{\lambda\mu}; \alpha_{\lambda'\mu'}}(\alpha) \dot{\alpha}_{\lambda\mu} \dot{\alpha}_{\lambda'\mu'}, \quad (3.86)$$

gdzie $B_{\alpha_{\lambda\mu}; \alpha_{\lambda'\mu'}}(\alpha)$ jest tensorem masowym, który w naszym podejściu, w pierwszym przybliżeniu będzie zastąpiony prostym wyrażeniem otrzymanym empirycznie w ramach podejścia przepływu bezwirowego (*irrotational flow*) [Sob69]

$$B_{irr} = (2/15)MAR_0^2, \quad (3.87)$$

zakładając, że jądro ma kształt kuli.

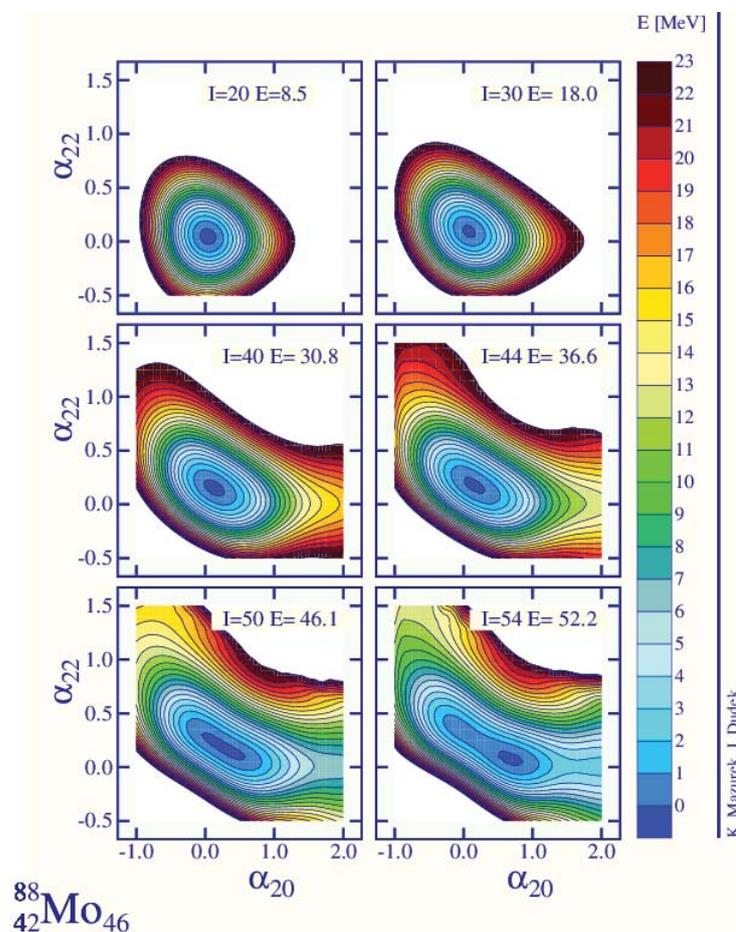
W tabeli 3.2 zamieszczono przykładowe wartości parametru masowego policzone poprzez uwzględnienie energii liczonych z modelu LSD-C ("C" - uwzględnia energię kongruencji). Poprzez dopasowanie funkcji kwadratowej do jednowymiarowych rzutów energii w funkcji danego parametru deformacji, na którego oś taki rzut jest rozważany, można otrzymać parametry sztywności $C_{\alpha_{20}}, C_{\alpha_{22}}$:

$$\begin{aligned} V_2(\alpha_{20}, \alpha_{22}) &\approx V_2(\alpha_{20}^{min}, \alpha_{22}^{min}) \\ &+ \frac{1}{2}C_{\alpha_{20}}(\alpha_{20} - \alpha_{20}^{min})^2 \\ &+ \frac{1}{2}C_{\alpha_{22}}(\alpha_{22} - \alpha_{22}^{min})^2, \end{aligned} \quad (3.88)$$

a co za tym idzie i energię stanu o wibracjach zerowych

$$\begin{aligned} E_{vib; \alpha_{20}} &= \sqrt{C_{\alpha_{20}}/B_{irr}}; \\ E_{vib; \alpha_{22}} &= \sqrt{C_{\alpha_{22}}/B_{irr}}. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Równanie 3.2 pozwala na wyrażenie deformacji multipolowych w terminach parametrów β, γ . Wybór jąder do dyskusji wibracji kwadrupolowych opierał się na opublikowanych



Rysunek 3.14: Powierzchnie całkowitej energii potencjalnej minimalizowane po osiowych parametrach deformacji $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq 12$, dla spinów wokół wartości spinu krytycznego dla przejścia Jacobi’ego w ${}^{88}\text{Mo}$. Tutaj używamy współrzędnych α_{20} i α_{22} zaadoptowanych do dyskusji kolektywnych ruchów jądra.

wynikach eksperymentów oraz na propozycjach przyszłych doświadczeń. Jądra ${}^{46}\text{Ti}$ i ${}^{147}\text{Eu}$ zostały już przedstawione w rozdziale 3.3, dane dotyczące ${}^{88}\text{Mo}$ są w trakcie publikacji [Cie13] a ${}^{120}\text{Cd}$ oraz izotopy ${}^{128,142}\text{Ba}$ stanowią przedmiot badań zaproponowanych do przeprowadzenia na układach eksperymentalnych SPIRAL2 (Caen, Francja) [Maj10] oraz SPES (Legnaro, Włochy). Część rysunków i Tabela 3.2 tutaj zamieszczone są częściowo wzięte z pracy [XIX].

W równaniu 3.88 występuje człon $V_2(\alpha_{20}^{min}, \alpha_{22}^{min})$, który jest otrzymany poprzez obliczenie energii potencjalnych, takich jak na Rys. 3.14, na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{22})$ i minimalizowanych po innych parametrach deformacji o parzystych i nieparzystych multipolowościach aż do $\lambda \leq 12$. Zrezygnowano tutaj ze zwyczajowego przedstawienia energii na płaszczyźnie (β, γ) , jak to było pokazane np. dla przejścia Jacobi’ego, ze względu na fakt, że równanie Schrödingera jest rozseparowane na składowe zależne od α_{20} i α_{22} . Współczynniki sztywności $C_x \equiv C_{\alpha_{20}}$ są otrzymane poprzez przybliżenie odpowiednich energii LSD przy użyciu wielomianów drugiego rzędu. Podobnie obliczone zostały współczynniki sztywności

Tablica 3.2: Parametry masowe z modelu przepływu bezwirowego B_{irr} obliczone z $B_{irr} = 2/15MAR_0^2$ and $R_0 = r_0A^{1/3}$, $r_0 = 1.2$ fm oraz Energie wibracji dla spinu $L = 0$ policzone przy pomocy modelu LSD-C.

Nucleus	B_{irr}	$E_{vib,x}$	$E_{vib,y}$
^{46}Ti	2.54	3.34	5.20
^{88}Mo	8.06	1.87	3.55
^{120}Cd	13.5	1.53	2.90
^{128}Ba	15.0	1.39	2.68
^{142}Ba	17.9	1.30	2.52
^{147}Eu	18.9	1.19	2.35

$C_y \equiv C_{\alpha_{22}}$. Wyniki zostały przedstawione w funkcji spinu na Rysunku 3.15.

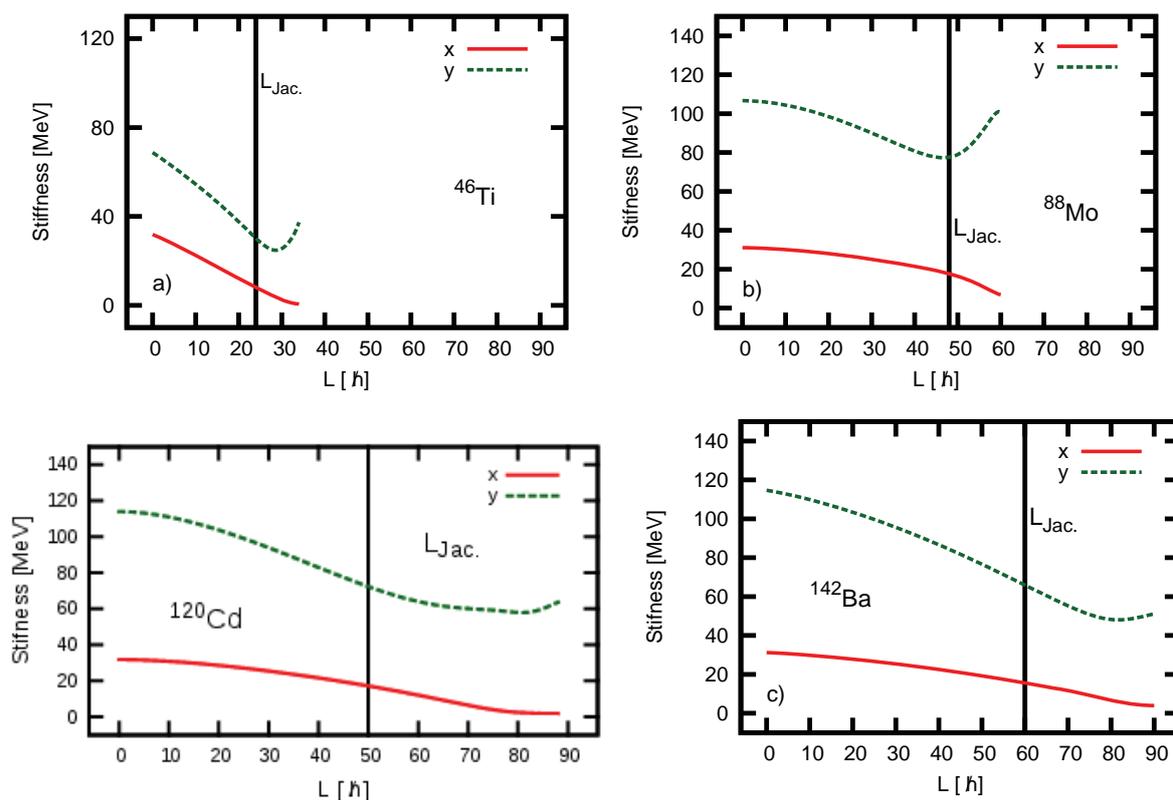
Równanie 3.89 daje możliwość oszacowania energii wibracji $E_{vib;x,y}$ przedstawionej w tabeli 3.2 dla spinu $L = 0$ \hbar oraz dla niezerowych spinów na Rys. 3.16. Oczywiście trend funkcji $E_{vib;x,y}$ jest taki sam jak przebieg wartości współczynników sztywności bo różnią się tylko parametrem masowym B_{irr} , który w tym przybliżeniu jest niezależny od deformacji jądra.

Poprzez rozwiązanie równanie Schrödingera otrzymane będą funkcje falowe i energie własne odpowiadające niskoleżącym stanom wibracyjnym. Przy pomocy równań 3.85 można było wyrazić dyspersję wartości dynamicznej osiowej (Rys. 3.17) i nieosiowej (Rys. 3.18) deformacji kwadrupolowej.

Należy zauważyć, że odchylenia od wartości średniej są w przybliżeniu stałe dla spinów przed przejściem Jacobi'ego i zaczynają rosnąć wraz ze wzrostem wartości średniej deformacji w momencie gdy przejście się zaczyna, co oznacza wypłaszczenie się potencjału na mapach energii (Rys. 3.14) a zatem zmniejszenie współczynników sztywności.

Na rysunkach 3.17 i 3.18 pokazano różnice między pozycją centroid statycznych (koła) i dynamicznych (kwadraty) dla ^{88}Mo . Ta różnica pokazuje wkład fluktuacji kształtu do efektywnej deformacji jądra. Rysunki przedstawiają jednocześnie rozrzut dystrybucji prawdopodobieństwa (niepewności kształtu) przy pomocy pionowych kresek. Statystycznie rzecz ujmując, rozrzut $\pm\sigma$ zawiera tylko 68,3 % informacji a dopiero odchylenie liczone jako $\pm 3\sigma$ obejmuje 99,7 % przypadków, dlatego przedstawione zostały oba podejścia. Obserwowane jest znaczne poszerzenie w terminach fluktuacji trójosiowych, wyrażonych przez deformację $\bar{\alpha}_{22}$ i związane z nią dyspersję σ_{22} , w stosunku do deformacji kwadrupolowej osiowej σ_{20} , cf. Rys. 3.18.

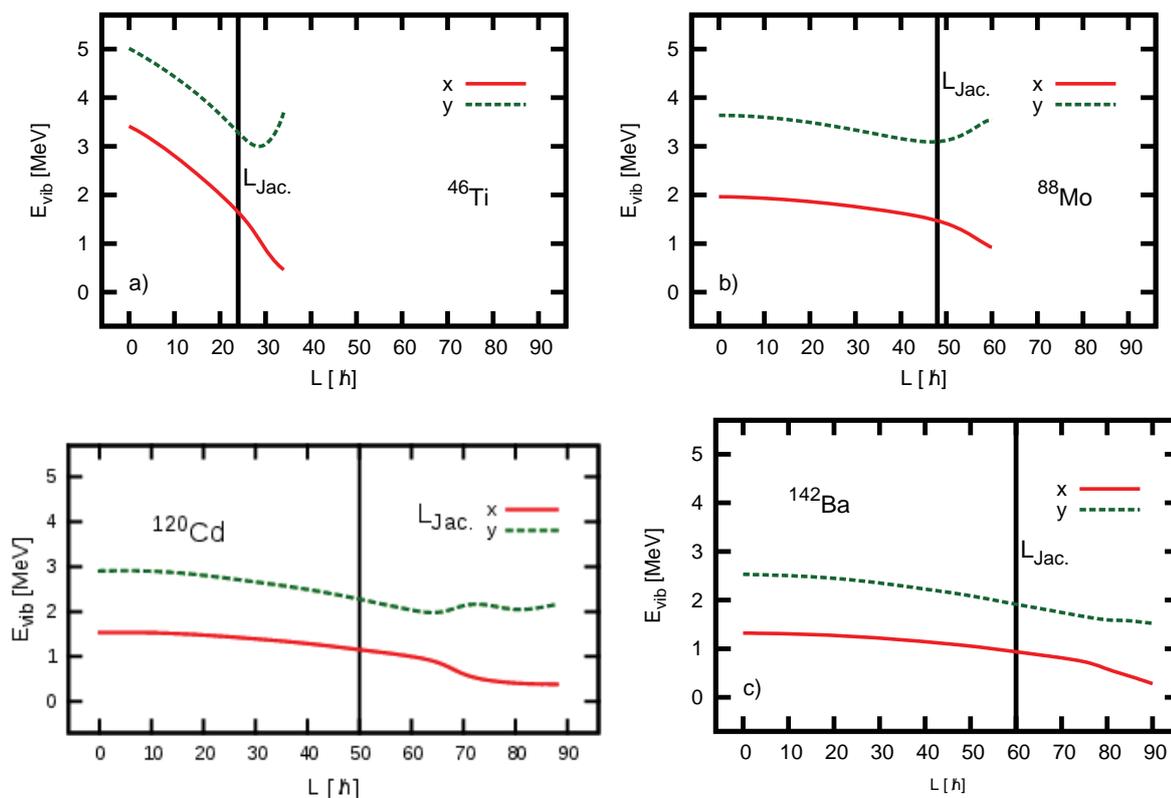
Reasumując należy powiedzieć, że obliczenia wykonywane za pomocą metody termicznych fluktuacji kształtów dość dobrze odtwarzają kształty funkcji nasilenia gigantycznych rezonansów dipolowych, wyekstrahowane z danych doświadczalnych, przez co są używane do projektowania nowych doświadczeń. Zastosowanie gęstości poziomów jądrowych zależnych od deformacji jądra nie dało dotąd dużych różnic ale może odegrać dużą rolę przy zastosowaniu innej metody minimalizacji (minimalizacja energii swobodnej a nie potencjalnej). Warto podkreślić, że przejście Jacobie'go zostało udowodnione poprzez zinterpre-



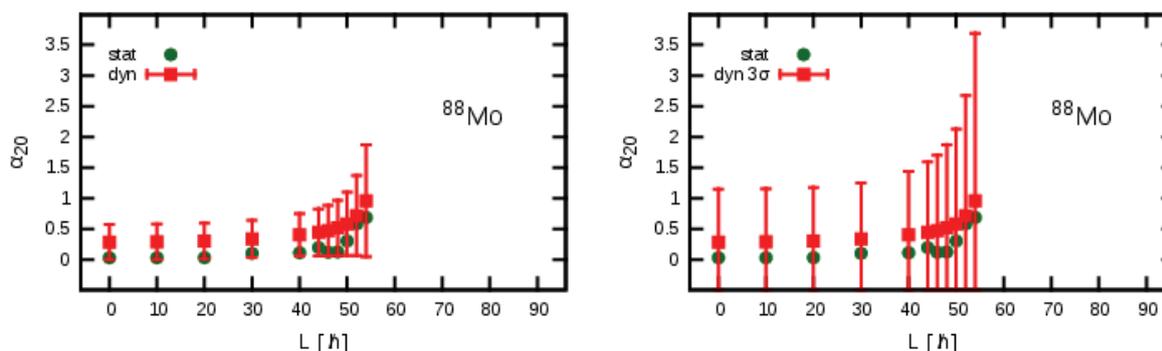
Rysunek 3.15: Współczynniki sztywności powierzchni energii, $C_x \equiv C_{\alpha_{20}}$ i $C_y \equiv C_{\alpha_{22}}$ otrzymane poprzez zrzutowanie powierzchni energii całkowitej takiej jak na Rys. 3.14 i równanie (3.88).

towanie doświadczalnych funkcji nasilenia GDR i zmiany ich kształtu wraz ze wzrostem spinu układu, właśnie przy pomocy tej metody dla ^{45}Sc , ^{46}Ti [Kmi07], ^{88}Mo [Cie13] i wielu innych.

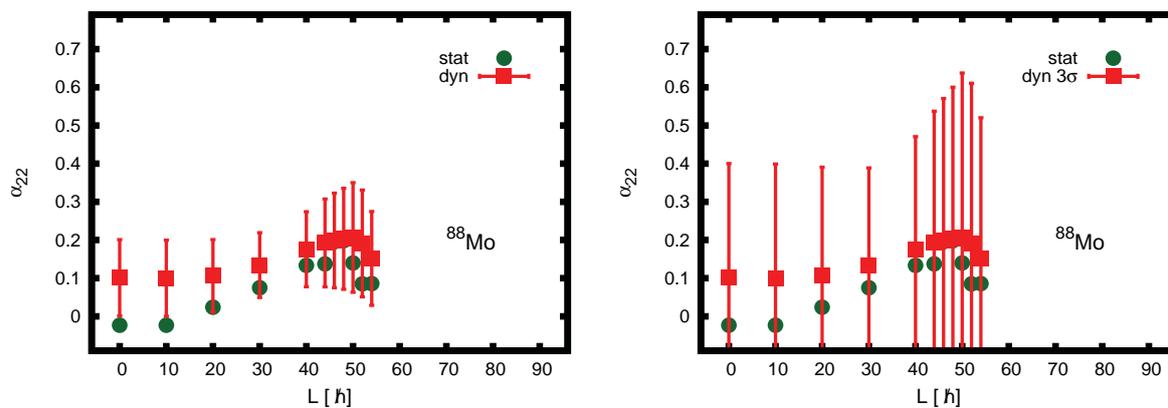
Badanie wibracji kwadru polowych przy pomocy rozwiązywania równania Schrödingera z hamiltonianem kolektywnym, daje możliwość oszacowania dynamicznych deformacji (β , γ) i porównanie ich z deformacjami efektywnymi otrzymanymi z fluktuacji termicznych jądra.



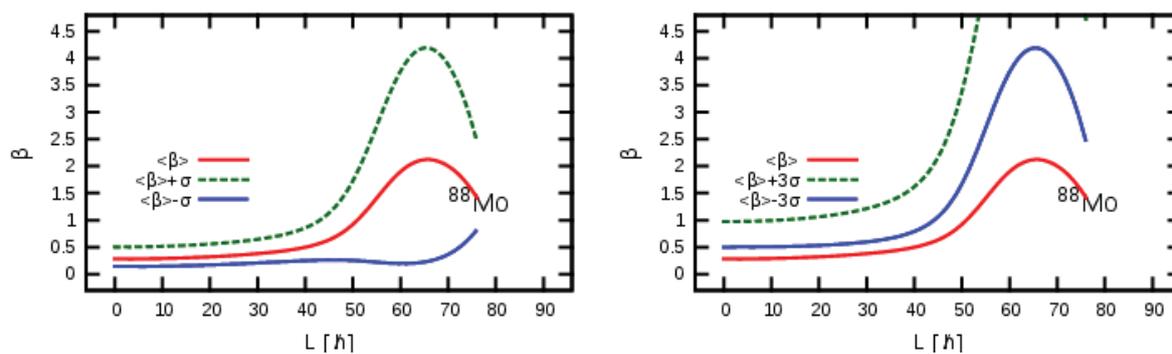
Rysunek 3.16: Oszacowane pomocnicze wartości energii wibracji otrzymane z przybliżenia harmonicznego przy pomocy równania $E_{vib;x,y} = \sqrt{C_{x,y}/B_{irr}}$, cf. równ. (3.88)-(3.89).



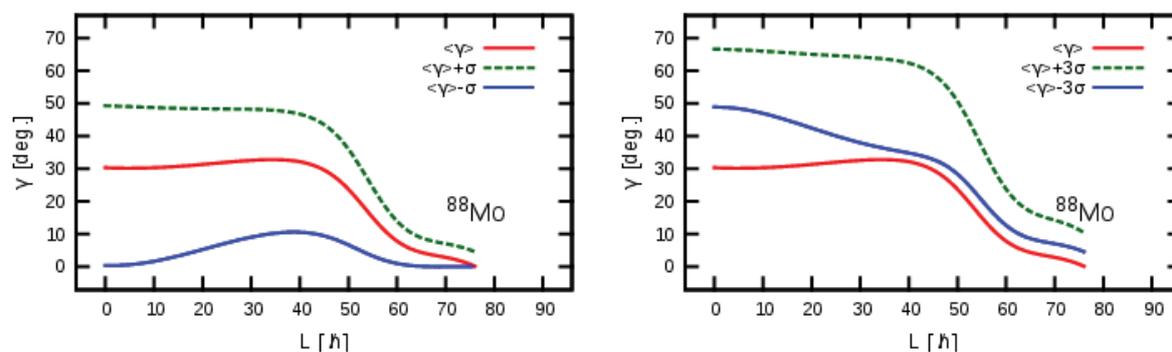
Rysunek 3.17: Statyczne wartości osiowego parametru deformacji kwadrupolowej α_{20} (koła) brane w minimum energii całkowitej i średnie dynamiczne deformacje kwadrupolowe $\sqrt{\langle \alpha_{20}^2 \rangle}$, (kwadraty). Pionowe kreski pokazują odchylenie $\pm \sigma$ (lewy) i $\pm 3\sigma$ (prawy) wokół centroidy.



Rysunek 3.18: Ilustracja podobna do Rys. 3.17 ale dla nieosiowego parametru deformacji α_{22} .



Rysunek 3.19: Czerwona ciągła linia pokazuje średnią wartość parametru wydłużenia jądra $\langle\beta\rangle$, zielona, przerywana to odchylenie $\langle\beta\rangle + \sigma$ (lewy) i $\langle\beta\rangle + 3\sigma$ (prawy) a cienka, niebieska to odchylenie $\langle\beta\rangle - \sigma$ (lewy) i $\langle\beta\rangle - 3\sigma$ (prawy)



Rysunek 3.20: Ilustracja podobna do Rys. 3.19 ale dla nieosiowego parametru deformacji γ .

Rozdział 4

Przejścia kształtów Poincaré'go

Przejścia Jacobie'go nie są jedynymi przejściami jakie oczekujemy znaleźć badając jądra szybkorotujące. W tym rozdziale zostaną opisane inne przejścia kształtów indukowane w jądrach atomowych pod wpływem ekstremalnie wysokich momentów pędu – przejścia Poincaré'go. Podobnie jak i w poprzednim rozdziale, będziemy się zajmować układami jądrowymi o wysokiej temperaturze, przez co możemy zaniedbać efekty powłokowe. Warto też podkreślić, że o ile sposób badania przejść Jacobie'go jest w miarę dobrze określony to temat przejść Poincaré'go pojawił się stosunkowo niedawno więc sposób postępowania zarówno ze strony teoretycznej jak i eksperymentalnej wciąż ewoluuje.

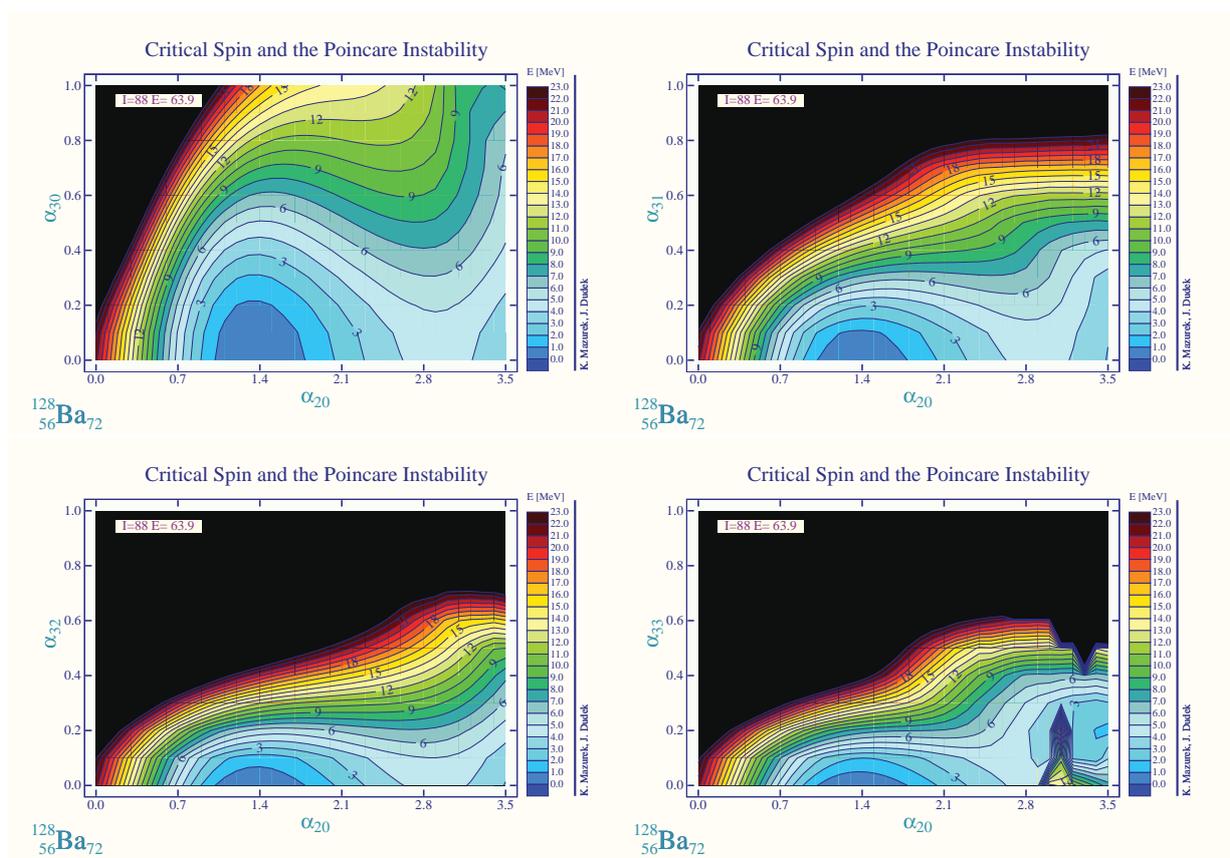
4.1 Deformacje nieosiowe wyższych rzędów

Przypomnijmy, że przejścia Poincaré'go odpowiadają zmianie kształtu obiektów posiadających na początku symetrię względem inwersji trzech osi układu odniesienia do kształtów, które po przejściu taką symetrię tracą, czyli zmiana kształtów z wydłużonych (prolate) na oktupolowe (“gruszkowate”). Badanie przejść Poincaré'go [Poi85] powinno w szczególności uwzględniać problem nieosiowości jądra, poprzez sprawdzenie wpływu nieosiowych parametrów deformacji oktupolowej takich jak: α_{31} , α_{32} , α_{33} oraz parametrów nieosiowych wyższych rzędów na przykład heksadekapolowych.

Rysunki 4.1 pokazują wpływ poszczególnych nieosiowości oktupolowych na energię ^{128}Ba przy spinie $88 \hbar$, zminimalizowane po α_{40} .

Należy zauważyć, że osiowa niestabilność oktupolowa jest słabo wspierana przez nieosiowe parametry deformacji oktupolowej, co oznacza, że dodawanie parametrów nieosiowych nie wpływa znacząco na obniżanie energii. Jeśli minimum energii jest zlokalizowane dla $\alpha_{30} = 0$ (Rys. 4.1) to wzrost energii o 1 MeV wymaga zmiany deformacji oktupolowej aż do $\alpha_{30} = 0.2$, podczas gdy w pozostałych kierunkach $\alpha_{3\mu}$ ten wzrost jest znacznie szybszy, szczególnie dla $\mu = 2$ i $\mu = 3$. Oznacza to, że nieznaczna zmiana nieosiowych parametrów deformacji oktupolowej gwałtownie zmienia wartość energii całkowitej jądra rotującego a minimum pozostaje w tym samym miejscu na mapie energii.

Następny rysunek, Rys. 4.2, przedstawia porównanie energii zminimalizowanej po α_{40} (prawy) i po $\alpha_{40}, \alpha_{41}, \alpha_{42}, \alpha_{43}, \alpha_{44}$ (lewy) dla deformacji oktupolowej osiowej (górze) i deformacji tetrahedralnej (dół). Dodanie minimalizacji po nieosiowych deformacjach heksadekapolowych nie zmienia powierzchni energii, obniża wprawdzie energię w minimum z 63.935 do 63.924 MeV oraz wpływa na zmianę wysokości bariery na rozszczepienie z 4.373 do 4.402 MeV, ale jak widać w ilustrowanych przypadkach, różnice są minimalne.

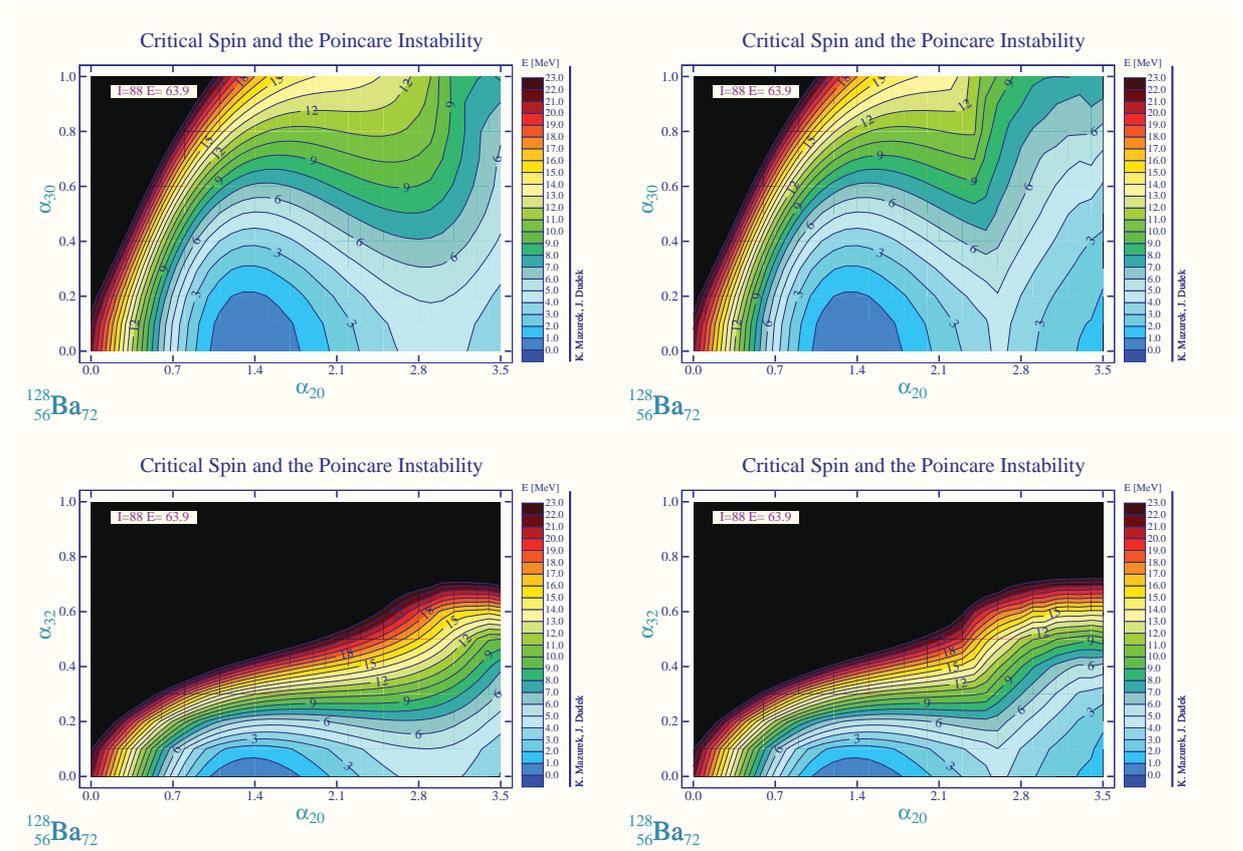


Rysunek 4.1: Powierzchnie energii LSD-C dla ^{128}Ba na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{30})$ (lewy, górny), $(\alpha_{20}, \alpha_{31})$ (prawy, górny), $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ (lewy, dolny) and $(\alpha_{20}, \alpha_{33})$ (prawy, dolny) zminimalizowane po α_{40}

4.2 Energia kongruencji zależna od deformacji jądra

Metoda makroskopowo-mikroskopowa pozwala na dobre oszacowanie wysokości barier na rozszczepienie, szczególnie w rejonie jąder ciężkich i superciężkich. W tym rozdziale przedyskutowana zostanie modyfikacja energii makroskopowej liczonej z wzoru 1.156 poprzez uwzględnienie członu kongruencji zależnego od kształtu jądra. Parametry tego modelu, zawierającego człon krzywizny były dopasowane przy założeniu, że energia mikroskopowa pochodzi z tablic Möllera [Mol95] oraz energia kongruencji jest zależna od izospinu jądra: $W_0 = -C_0 \exp(-W|I|/C_0)$, gdzie izospin $I = (N - Z)/A$ a stałe wynoszą: $C_0 = 10$ MeV i $W = 42$ MeV tak jak to było zaproponowane w [Mye66]. Nowsze prace takie jak: [Mye69] i [Mye96] pokazywały, że takie podejście jest bardzo uproszczone i zaproponowano by wprowadzić czynnik geometryczny, co pozwoliło na lepszy opis procesu rozszczepienia a szczególnie transformacji z jądra matki (gdzie mamy jedną energię kongruencji) na jądra córki, gdzie energia kongruencji tuż przed rozerwaniem, powinna być podwojona. Zaproponowano czynnik geometryczny jako stosunek średniego promienia dwóch przyszłych fragmentów (jąder córek) do promienia szyjki. Tworzenie się przewężenia w wydłużającym się jądrze, potocznie zwanego szyjką, uczyniono odpowiedzialnym za podwajanie się energii kongruencji.

Prace nad energią kongruencji (zwaną też energią Wignera) i członem A^0 , zależnymi od deformacji systemu były już opublikowane w przypadku modelu makroskopowego Finite



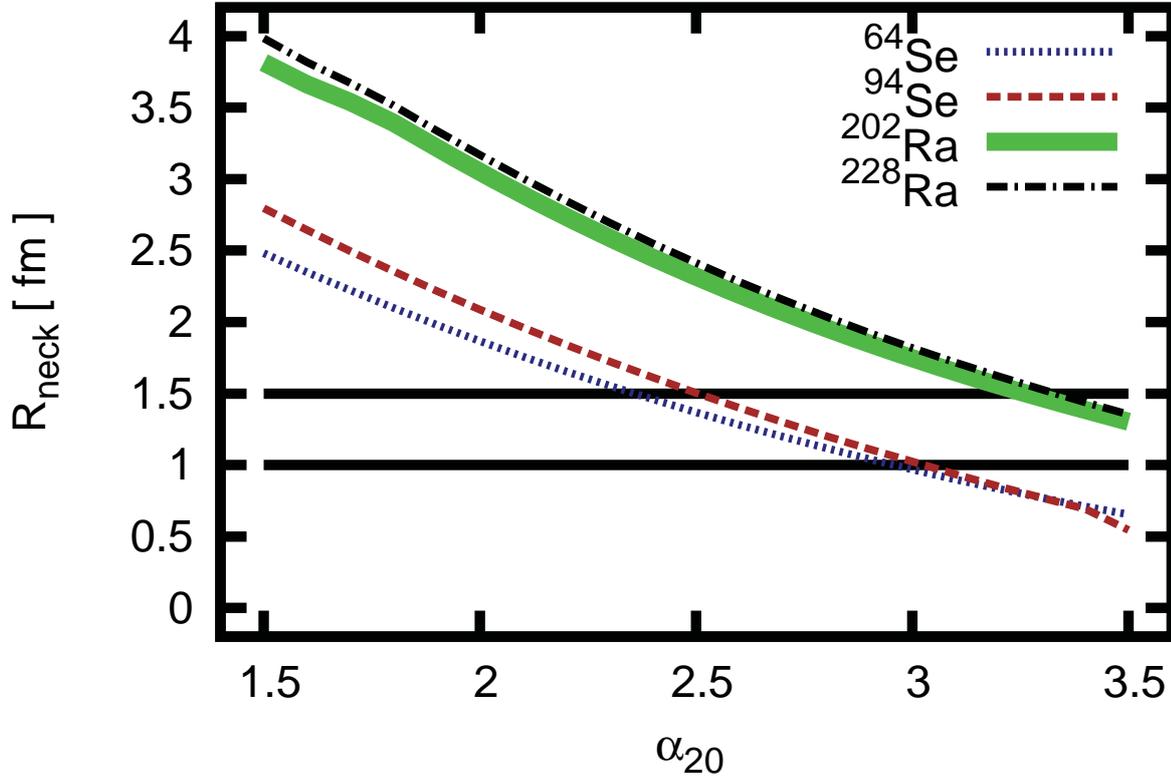
Rysunek 4.2: Powierzchnie energii LSD-C dla ^{128}Ba na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{30})$ (górze), i $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ (dół) zminimalizowane po α_{40} (prawy) i $\alpha_{40}, \alpha_{41}, \alpha_{42}, \alpha_{43}, \alpha_{44}$ (lewy).

Range Liquid Drop Model (FRLDM) [Mol04] a otrzymane wyniki dotyczące porównania eksperymentalnych i teoretycznych wysokości barier na rozszczepienie, są bardzo interesujące. W przypadku modelu LSD, człon A^0 nie występuje i nie ma powodu, żeby go wprowadzać. Natomiast człon kongruencji należy uzależnić od kształtu jądrowego, przy czym nie ma generalnej reguły, jak to należy zrobić. Forma czynnika geometrycznego powinna być uzależniona od rozmiaru szyjki, powinna dawać 1 dla jądra w stanie podstawowym, gdzie nie ma szyjki i wartość 2 w punkcie rozerwania. Kolejnym warunkiem jest reprodukcja wysokości bariery na rozszczepienie, gdyż punkt siodłowy (*saddle point*) znajduje się blisko punktu rozerwania (*scission point*) dla jąder średniomasowych ($60 < A < 160$) ale w przypadku systemów ciężkich ($160 < A < 220$), kształty w punkcie siodłowym mogą być bardzo mało przewężone a rozszczepienie następuje z kształtów o widocznej szyjce.

Szczegółowa dyskusja czynnika geometrycznego energii kongruencji została przedstawiona w [XIX]. Głównym jej założeniem jest obserwacja, że rozmiar szyjki zależy praktycznie wprost proporcjonalnie do kwadrupolowego parametru deformacji α_{20} a dopiero w drugim rzędzie od masy jądra. Rysunek 4.3 przedstawia ewolucję promienia szyjki w funkcji wydłużenia, otrzymaną przy minimalizacji energii całkowitej jądra po całym zestawie parametrów deformacji ($\lambda = 2 - 12$) dla ekstremalnych izotopów Se i Ra, znanych eksperymentalnie.

W obliczeniach przyjęto, że promień jednostkowy $r_0 = 1.2$ fm tak więc dla promienia szyjki mniejszego niż $R_{neck} = 1.5$ fm powinno nastąpić rozerwanie, gdyż jest to znacznie mniej niż średnica jednego nukleonu. Dla lekkich jąder odpowiada to mniejszemu pa-

rametrowi α_{20} a dla cięższych- większemu ale zależność parametru szyjki od deformacji kwadrupolowej jest w przybliżeniu liniowa.



Rysunek 4.3: Promień szyjki w funkcji parametru wydłużenia jądra dla $^{64,94}\text{Se}$ i $^{202,228}\text{Ra}$. Skopiowany z [XIX]

Zauważenie powyższych zależności pozwoliło na zaproponowanie wzoru:

$$E_{Cong.}(N, Z; \alpha) \stackrel{df}{=} W_0(Z, N) \cdot F_{neck}(\alpha_{20}), \quad (4.1)$$

gdzie

$$F_{neck}(\alpha_{20}) = 1 + \frac{1}{2} \{1 + \tanh [(\alpha_{20} - \alpha_{20}^0)/a_{neck}]\}. \quad (4.2)$$

przy czym człon Wignera, [Wig37], oznaczony jako W_0 , jest wciąż sparametryzowany jak w [Mye96], to znaczy:

$$W_0(Z, N) = -C_0 \exp(-W|I|/C_0), \quad (4.3)$$

gdzie $I \equiv (N - Z)/A$ i $C_0 = 10$ MeV oraz $W = 42$ MeV. Zależność efektywnego parametru deformacji kwadrupolowej od masy jądra A jest wprowadzona poprzez prostą liniową zależność, $\alpha_{20}^0 \rightarrow \alpha_{20}^0(A)$ gdzie:

$$\alpha_{20}^0(A) = \alpha_{20}^{min.} + \frac{(\alpha_{20}^{max.} - \alpha_{20}^{min.})}{(A^{max.} - A^{min.})} \cdot (A - A^{min.}), \quad (4.4)$$

Przy dopasowaniu parametrów do wysokości barier okazało się możliwe przyjęcie, że

$$\alpha_{20}^{min.} = 1.5, \quad A^{min.} = 70; \quad (4.5)$$

$$\alpha_{20}^{max.} = 3.5, \quad A^{max.} = 220. \quad (4.6)$$

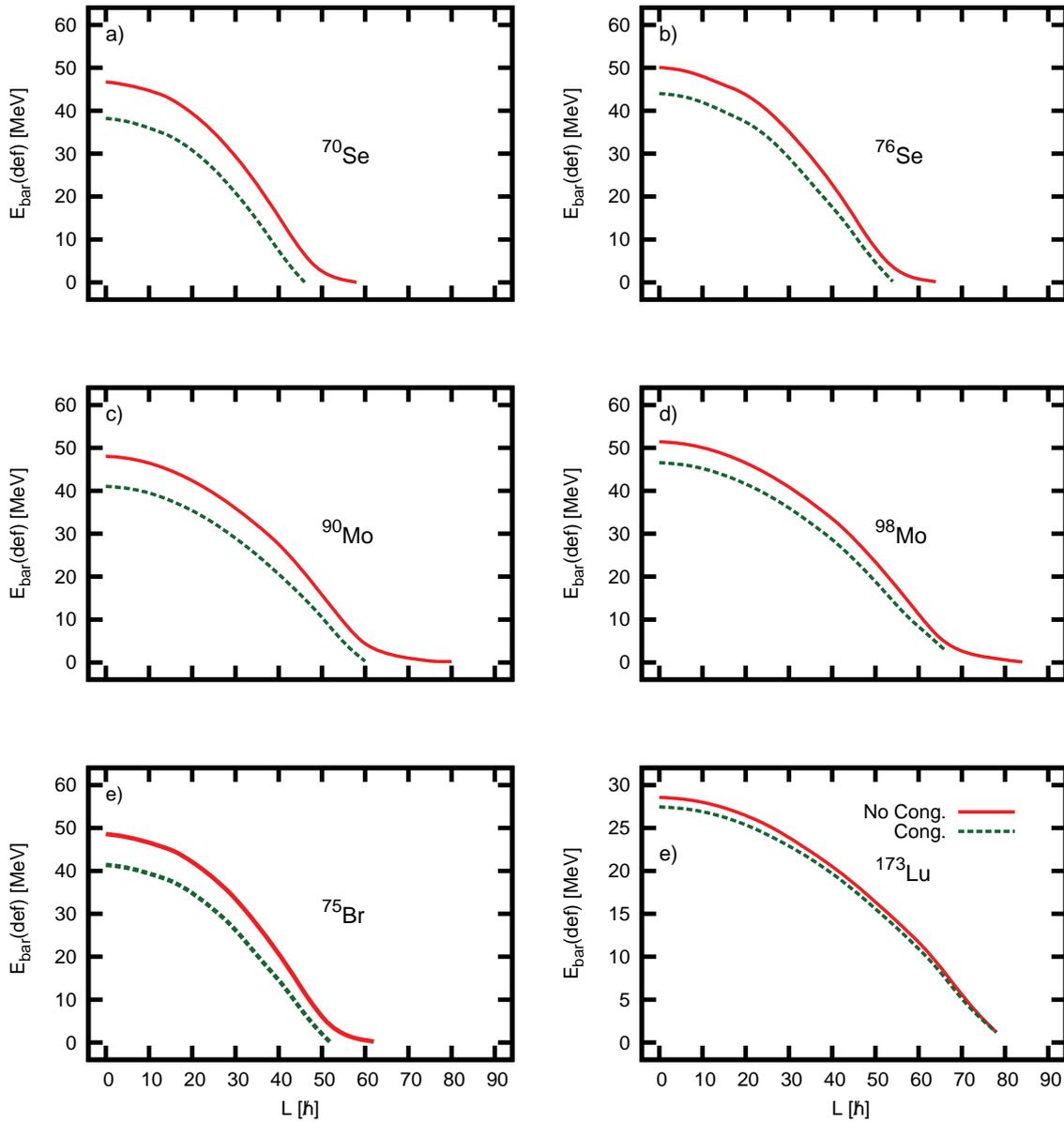
przy czym $^{70,76}\text{Se}$ to są najlżejsze systemy, gdzie oszacowano doświadczalnie bariery na rozszczepienie a ^{220}Ra leży pośrodku obszaru masowego, gdzie te bariery są zmierzone.

W tej pracy ograniczono się do kilku jąder o masach $A < 150$, ale przy sprawdzaniu dobroci wyników, obliczenia wykonano także dla dwóch cięższych jąder, tak jak pokazano to w tabeli 4.1. W [XIX] podkreślono, że energia kongruencji zmienia energię potencjalną jądra,

Tablica 4.1: Porównanie wysokości barier dla szeregu jąder. Kolumny zawierają: wartości eksperymentalne (Exp), referencje do artykułów (Ref), wyniki dla LSD bez energii kongruencji oraz z energią kongruencji zaproponowaną przez Myersa i Świąteckiego (C. M.-S.), [Mye96]. Ostatnie trzy kolumny przedstawiają wyniki otrzymane przy założeniu, że czynnik rozmycia szyjki wynosi: $a_{neck} = 0.5, 1.0$ i 1.5 . (Tabela pochodzi z pracy [XIX]).

Nucleus	Exp Ref	No C.	C. M.-S. $a_{neck} \rightarrow$	α_{20}^0 A-dependent		
				0.5	1.0	1.5
^{70}Se	39.4 [Fan00]	50.618	43.337	38.973	40.393	41.825
^{76}Se	44.5 [Fan00]	54.323	49.624	43.944	45.084	46.068
^{75}Br	41.0 [Del91]	52.603	47.062	42.169	43.410	44.599
^{90}Mo	42.0 [Jin99]	50.890	45.519	40.995	42.308	43.359
^{98}Mo	46.0 [Jin99]	54.571	50.651	46.495	47.443	48.132
^{173}Lu	29.0 [Mor72]	28.707	25.635	27.433	26.797	26.616
^{228}Ra	6.3 [Mor72]	6.204	6.013	6.204	6.186	6.120

szczególnie dla kształtów posiadających szyjkę. Modele makroskopowe są często używane do oszacowania energii jąder gorących i rotujących, gdzie należy oszacować na przykład spin krytyczny, przy którym bariera na rozszczepienie zanika lub jest bardzo mała. Przy obecnych możliwościach eksperymentalnych pozwala to na badanie jąder egzotycznych, zmian kształtów tych jąder, krotności i rodzaju emitowanych cząstek czy też kwantów γ . Energia kongruencji, która obniża barierę o kilka MeV w punkcie siodłowym, wpływa też na spin krytyczny jąder, bo ten efekt, mimo, że zależy od kształtu jądra, powoduje przesunięcie praktycznie równoległe wysokości barier, tak jak to pokazano na Rys. 4.4.



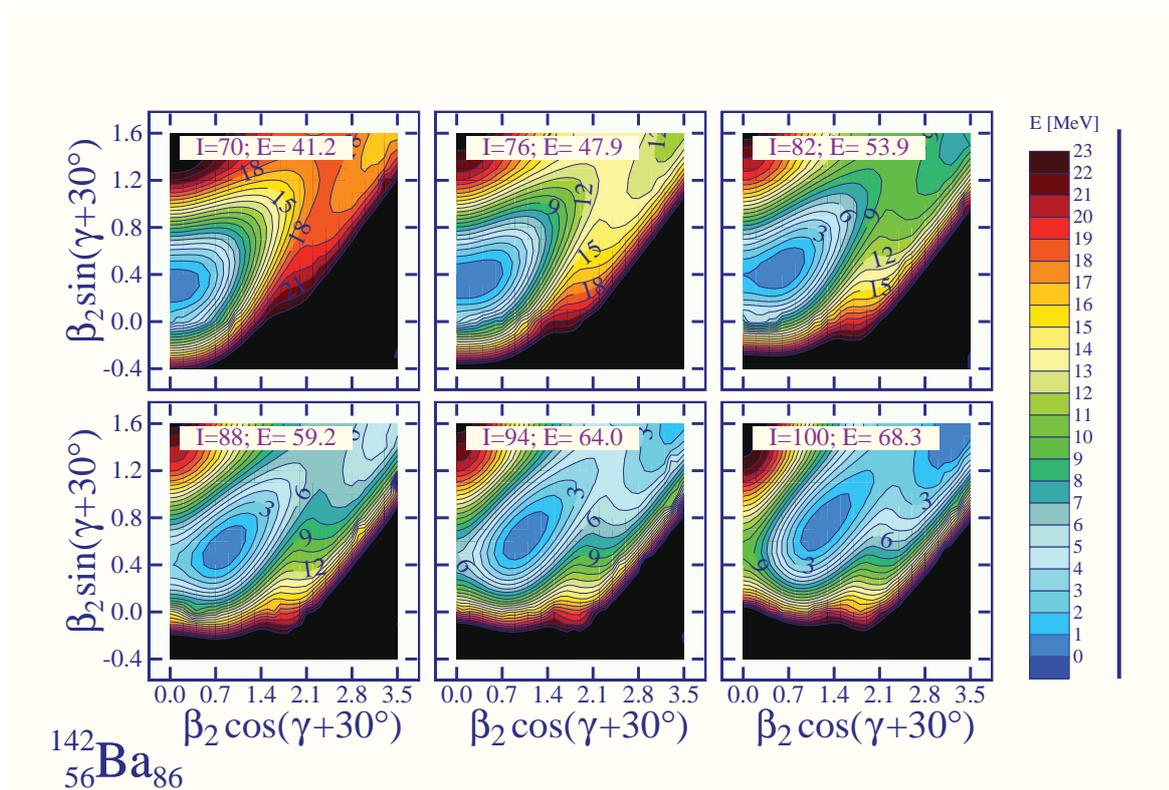
Rysunek 4.4: Wysokości barier na rozszczepienie otrzymane z (linie przerywane) i bez (linie ciągłe) użycia energii kongruencji, przy czym czynnik rozmycia szyjki to $a_{\text{neck}} = 0.5$. Skopiowany z [XIX]

4.3 Ewolucja deformacji ze spinem jądra

Jedną z pogłębionych dyskusji dotyczących ewolucji parametrów deformacji można znaleźć w [Coh63], gdzie dyskutowana jest energia w punkcie siodłowym ale także momenty bezwładności, momenty kwadrupolowe i współczynniki sztywności w funkcji *fissility* jąder. Wprawdzie autorzy dyskutują kroplę nierotującą i osiowo symetryczną ale przedstawiają wartości parametrów deformacji aż do $\lambda = 18$.

Patrząc na mapy energii potencjalnej na płaszczyźnie (β, γ) i ewolucję minimum energetycznego wraz ze wzrostem spinu, możemy stwierdzić, że w momencie gdy jądro osiągnie kształt prolate czyli przejście Jacobi'ego się zakończy - kształt jądra nadal może się wydłużać i może formować się szyjka, który to proces jest wstępem do rozszczepienia jądra. Na mapach energii w funkcji (β, γ) (np.: Rys. 4.5) nie można jednak określić czy będą się formować dwa takie same fragmenty, czyli ewolucja jądra pójdzie w kierunku symetrycznego rozszczepienia, czy też fragmenty będą miały różne masy – nastąpi asymetryczne rozszczepienie. Aby to stwierdzić, należy wykonać mapy energii rzutowane na płaszczyznę $(\alpha_{20}, \alpha_{30})$ (takie jak np.: Rys. 4.6).

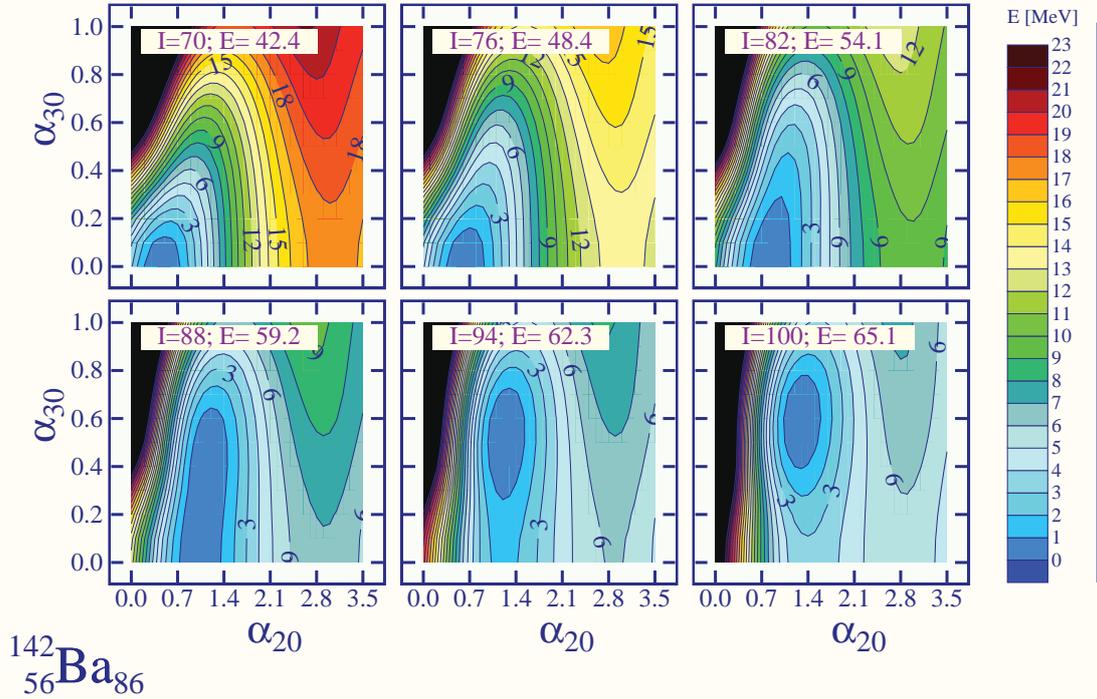
Minimum energetyczne znalezione dla niezerowej deformacji α_{30} oznacza, że jądro będzie preferowało kształty asymetryczne czyli będzie następowało przejście Poincaré'go. Przedstawiono tutaj tylko przykładowe mapy energii dla ^{142}Ba , który jest interesujący ze względu na możliwość produkcji tego jądra przy wysokich spinach osiągających nawet $100 \hbar$ [Maj10]. Rysunek 4.6 pokazuje energie przy różnych spinach na płaszczyźnie $(\alpha_{20}-\alpha_{30})$. Ok-tupolowa deformacja równowagowa α_{30} jest praktycznie zaniechwalna dla spinów $I < 88$, ale szybko wzrasta dla wyższych spinów, co oznacza wzrost asymetrii masowej czyli jest oznaką zmiany kształtu typu Poincaré'go. Rysunek 4.7 pokazuje jak zmieniają się wartości poszczególnych parametrów deformacji wraz ze wzrostem spinu w minimum energii czyli wzdłuż linii yrast. Ewolucja kształtów równowagowych jest pokazana poprzez wartości poszczególnych parametrów deformacji na Rys. 4.7. W szczególności aż do $I = 65 \hbar$, statyczna równowaga (to znaczy wartość numeryczna otrzymana przy zaniechaniu wibracji zerowych, czy termicznych), odpowiada parametrowi trójosiowości $\gamma = 60^\circ$. Ta wartość jest charakterystyczna dla klasycznego osiowosymetrycznie zdeformowanego ciała typu oblate, rotującego wokół osi symetrii. Powyżej $I = 65 \hbar$, jądro przechodzi zmianę kształtów Jacobi'ego czyli zaczyna być trójosiowe, a jego wydłużenie wzrasta dla spinów w zakresie $65 < I < 85 \hbar$. Powyżej $I = 85 \hbar$ wszystkie parametry deformacji nieparzystych rzędów zaczynają odgrywać rolę i jądro podlega odbiciowo-niesymetrycznej zmianie kształtów Poincaré'go tak, jak to jest pokazane na Rys. 4.8.



Rysunek 4.5: Przejście Jacobi'ego: powierzchnie energii LSD na płaszczyźnie (β, γ) dla ^{142}Ba przy spinach: 70, 76, 82, 88, 94 i 100 \hbar ; wyniki minimalizacji po parametrach deformacji (α_{40} , α_{60}). Parametrem nieosiowości jest tutaj γ , a klasycznie zdeformowane jądro typu oblate rotujące wokół swojej osi symetrii odpowiada $\gamma = +60^\circ$ (pionowa, dodatnia oś). Ilustracja wzięta z [XIII].

Eksperymentalnych oznak egzotycznych kształtów asymetrycznych ze względu na odbicie może być wiele. Przede wszystkim rozkłady produktów rozszczepienia takich systemów mogą wykazywać silną asymetrię masową, szybko wzrastającą ze wzrostem spinu. Dodatkowo funkcje nasilenia GDR powinny być bardziej pofragmentowane w porównaniu z funkcjami GDR pochodzącymi z wydłużonych kształtów prolate (zobacz rozdział 4.7). Innym sygnałem może być zachowanie energii przejść E2.

Zmiany kształtu jądra wraz ze wzrostem spinu są stowarzyszone ze zwiększającym się wydłużeniem jądra, co powoduje pewien wzrost momentu bezwładności. Klasycznie, spin rotującego jądra można zapisać jako $I = \mathcal{J}(\alpha) \cdot \omega$, gdzie \mathcal{J} oznacza efektywny moment bezwładności a ω - częstość rotacji. Okazuje się, że przy pewnych wartościach spinu, dalszy jego wzrost odpowiada tak dużej zmianie momentu bezwładności, że $\omega(I) < \omega(I - 2)$ czyli szybkość kątowna obrotu maleje zamiast rosnąć. Ten mechanizm zwany *gigantic back-bending*, jest pokazany na Rys. 4.9 i 4.11. Zależność energii od spinu, $E_I = \hbar^2 I(I + 1)/2\mathcal{J}(\alpha)$, pozwala na oszacowanie energii przejścia $E_\gamma[I \rightarrow (I - 2)]$. 'Back-bending' na rysunkach I -vs.- ω dla ^{142}Ba (Rys. 4.9, lewy) pokazuje koło spinu 70 \hbar podobne zachowanie jak na rysunku dla przejścia Jacobi'ego- ze wzrostem spinu częstość rotacji zaczyna maleć. Gdy zbliżamy się do obszaru przejścia Poincaré'go ($I \approx 90 \hbar$) można zauważyć, że spin wzrasta przy praktycznie nie zmienionej częstości rotacji. To znajduje odbicie w licznej zależności spinowej energii gamma E2 (Rys. 4.9, prawy). Energia wzrasta z 400 keV dla niskich spinów do 2.3 MeV przy $I = 70 \hbar$, gdzie gwałtownie maleje aż do 600 keV od spinu $I = 90 \hbar$ poczynając. Powyżej $I = 90 \hbar$, dla obszaru Poincaré'go, ta energia pozostaje stała.



Rysunek 4.6: Przejście Poincarégo: powierzchnie energii LSD na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{30})$ - liczone dla spinów takich jak Rys. 4.5 ale przy minimalizacji po parzystych i nieparzystych parametrach deformacji ($\alpha_{40}, \alpha_{50}, \alpha_{60}, \alpha_{70}$ and α_{80}). Ilustracja wzięta z [XIII].

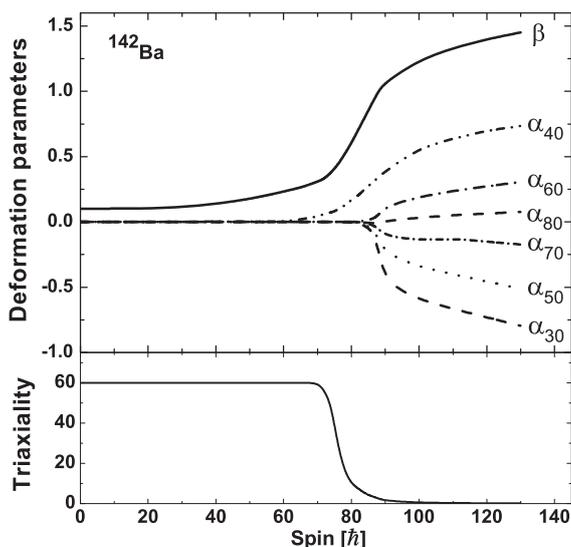
Dla spinów odpowiadających $B_f > 8$ MeV, można oczekiwać, że dominującym kanałem ochłodzenia jądra będzie emisja cząstek naładowanych lub neutronów; dla $3 < B_f < 8$ MeV proces wyparowania konkuruje z rozszczepieniem.

W tym kontekście, podczas gdy ^{152}Ba jest jądrem o ekstremalnie egzotycznej kombinacji liczby protonów i neutronów i będzie bardzo trudnym przypadkiem dla analiz eksperymentalnych, to produkcja ^{142}Ba i innych jąder w pobliżu, będzie wkrótce możliwa. Rysunek 4.10 pokazuje zależność wartości parametrów deformacji nie tylko od spinu ale też od liczby neutronów. Wraz ze wzrostem liczby neutronów, rośnie krytyczny spin, przy którym zanika bariera na rozszczepienie. Jednocześnie zakres spinów, w którym następuje przejście Jacobi'ego, także przesuwają się do wyższych spinów. Można zauważyć, że zestaw parametrów deformacji odpowiadających asymetrii masowej począwszy od $\lambda = 3$ i wyższego rzędu nieparzystych λ składowych, jest skorelowany z zestawem parzystych multipoli o $\lambda = 4$ i wyższych, jak po pokazują Rys. 4.10.

Warto podkreślić, że główny efekt dyskusowanych przejść jest opisany przez najniższe składowe: $\lambda = 3$ i 5 .

Gigantyczny *back-bending* jest zilustrowany na Rys. 4.11 dla izotopów $^{116,128,142,152}\text{Ba}$ poprzez wykreślenie zależności spinowej częstości rotacji (lewy) i równoważnego opisu w terminach kwadrupolowej energii przejść gamma $E_\gamma[I \rightarrow (I - 2)]$ vs. spin (prawy). Znaki "X" oznaczają pozycję spinu, przy którym bariera na rozszczepienie osiąga wartość $B_f = 3$ MeV.

Te rysunki pokazują zasadniczą różnicę między przejściami Jacobi'ego i Poincarégo. O ile przy przejściu Jacobi'ego moment bezwładności zmienia się, gdyż mamy zmianę sto-



Rysunek 4.7: Zależność od krętu różnorodnych deformacji jądrowych policzonych dla ^{142}Ba : parametru deformacji β , i α_{30} - α_{80} (górze), parametru deformacji trójosiowej γ (dół); $\gamma = 0^\circ$ odpowiada kształtom prolate-, a $\gamma = 60^\circ$ to deformacji kwadrupolowa typu oblate. Ilustracja wzięta z [XIII].

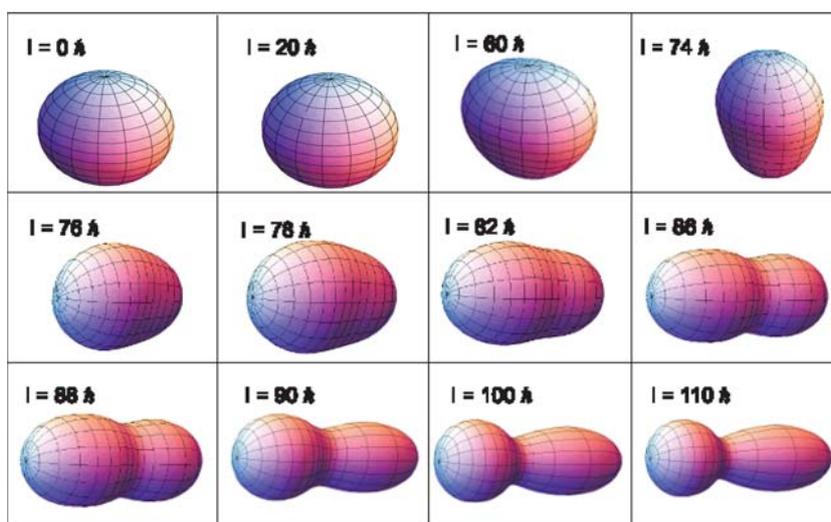
sunków poszczególnych osi co odpowiada przejściu przez kształty trójosiowe, to przy przejściu Poincaré'go nieosiowości nie mają dużego wpływu (co będzie pokazane dalej) i moment bezwładności a zatem i energia przejść E2 będzie praktycznie stała. Kształty są bowiem wydłużone a jedynie zmienia się rozmiar szyjki.

Uwaga: Można przebadac także wpływ parametru α_{10} na pozycję minimum energetycznego przy wzrastającej wartości spinu, gdyż uwzględnienie tego współczynnika pozwala na rozszerzenie bazy kształtów. Może mieć to znaczenie przy kształtach oktopolowych, bardzo wydłużonych co było badane dla aktywnowców [Kow12] przy pomocy obliczeń makroskopowo-mikroskopowych na wielowymiarowych siatkach parametrów deformacji.

4.4 Testy minimalizacji

W przypadku przejścia Jacobi'ego, gdzie kształty jądra zmieniały się ze spłaszczonych (oblate), poprzez trójosiowe do wydłużonych, wystarczyła minimalizacja energii po parametrach α_{40} , α_{60} , α_{80} ale w przypadku przejść Poincaré'go, gdzie oprócz asymetrii w płaszczyźnie odbiciowej ważnym elementem jest formowanie się szyjki, należy na nowo wytestować jaki jest minimalny rząd multipolowości potrzebnych do uzyskania stabilnych wyników.

W artykule [XIX] przedstawiono testy obciążenia bazy parametrów deformacji, po których minimalizowano energię. Testy wykazały, że dla jąder nierotujących ($L = 0 \hbar$), energia w okolicy stanu podstawowego jest praktycznie nieczuła na liczbę parametrów branych do minimalizacji, gdyż najkorzystniejszym energetycznie będzie kształt jak najbliższy sferze. Dopiero duże wydłużenia powodują, że większa baza parametrów deformacji jest istotna. Rysunek 4.12 przedstawia, w formie wyolbrzymionej poprzez odjęcie stałych funkcji liniowych, zmiany energii w okolicy punktu siodłowego, przy założeniu, że energia minimalizowana jest po parametrach α_{22} , α_{30} , α_{40} , α_{50} , α_{60} , α_{70} , α_{80} ($\lambda_{max} = 8$), oraz dodatkowo po α_{90} , α_{100} ($\lambda_{max} = 10$) i tak dalej aż do przypadku, gdzie jest minimalizacja po piętnastu



Rysunek 4.8: Kształty jądra w pozycji równowagi dla różnych momentów pędu dla ^{142}Ba , odpowiadające zestawom wartości parametrów deformacji z Rys. 4.6. Ilustracja wzięta z [XIII].

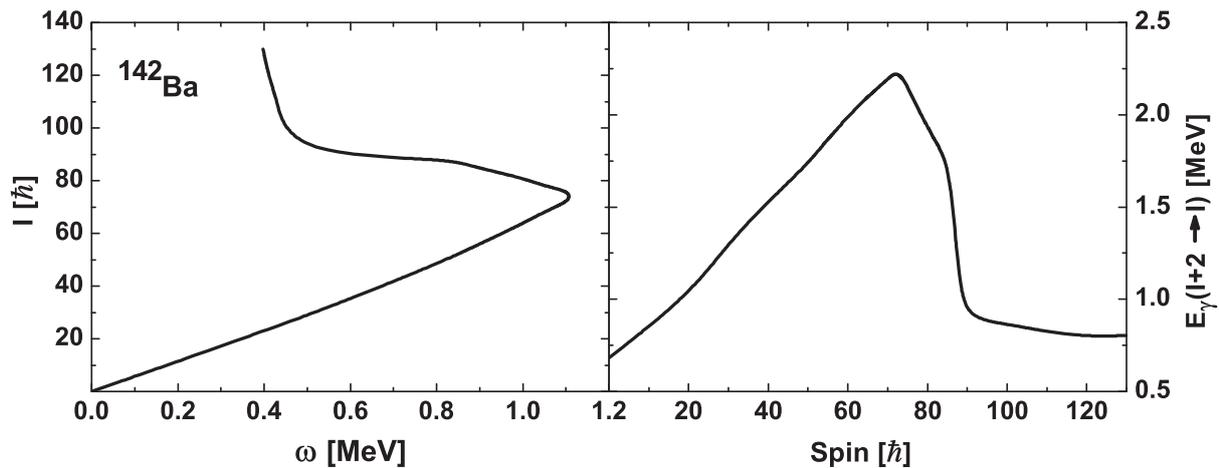
parametrach deformacji ($\lambda_{max} = 16$). Jak można zauważyć, wysycenie, czyli stabilizacja względem obcięcia bazy parametrów deformacji zależy od masy jądra i dla lekkich systemów wystarczy minimalizacja po deformacjach o multipolowościach aż do $\lambda_{max} = 10$, podczas gdy w przypadku ciężkich jąder potrzeba $\lambda_{max} = 12$ i wyżej.

W przypadku systemów rotujących, testy dotyczą wpływu obcięcia bazy parametrów deformacji na energię minimalną dla danego spinu czyli na tak zwaną *linię yrast* (Rys. 4.13) i na energię w punkcie siodłowym. Związana z tym jest stabilność wyników dotyczących wysokości barier na rozszczepienie oraz na energię w punkcie rozerwania.

Testy przedstawione w niniejszej monografii pokazują jaki wpływ na promień szyjki i kształt powierzchni jądrowej ma dodawanie deformacji o wyższych multipolowościach czyli powiększanie przestrzeni parametrów deformacji, po których się minimalizuje. Rysunek 4.14 pokazuje przekroje jądra na płaszczyźnie (β, γ) , otrzymane dla parametrów pochodzących z minimalizacji energii dla ustalonej deformacji kwadrupolowej α_{20} .

Trzeba pamiętać, że opis szyjki w procesie rozszczepienia zupełnie wykracza poza ramy modeli makroskopowych. Jak wiadomo procesowi formowania szyjki towarzyszą złożone procesy jądrowe, takie jak powstawanie lekkich fragmentów w warunkach rozrzedzonej gęstości materii jądrowej. W procesach takich decydującą rolę mogą odgrywać oddziaływania dwu- i trój-ciałowe a przybliżenie wysokiej temperatury może w ogóle tracić sens. Jednakże z punktu widzenia stabilności numerycznej końcowych wyników, może być przydatne przeanalizowanie numerycznej stabilności modelu aby uniezależnić go od ew. destabilizującego wpływu obcięcia bazy na zachowanie szyjki i wkłady energetyczne z tym związane.

Zmiany w kształcie jąder są tak minimalne, że aby je ocenić wyrysowane zostały (Rys. 4.15) różnice promieni szyjki otrzymanych z minimalizacją po wszystkich osiowych parametrach deformacji aż do λ i promieni szyjki przy minimalizacji po dodatkowych dwóch parametrach λ czyli $R_n(\lambda) - R_n(\lambda + 2)$. Różnice w promieniu szyjki są mniejsze niż 0,1% promienia jądra sferycznego R_0 . Ponieważ promień szyjki decyduje o momencie rozerwania jądra ale także o tym, gdzie kończymy barierę, jeśli siodło nie jest widoczne to ten wynik daje nam pewność, że nasze kryterium rozszczepienia jest nieczułe na liczbę parametrów



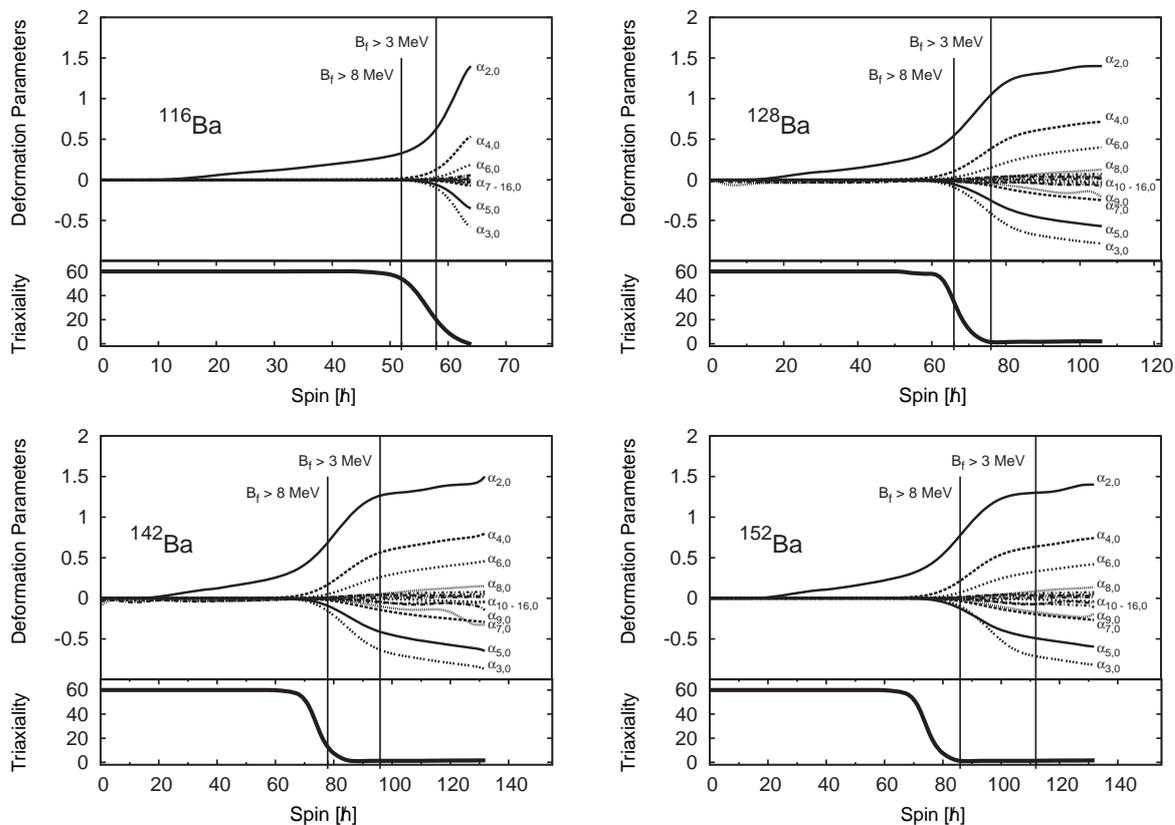
Rysunek 4.9: Lewy: spin jądra w funkcji częstość obrotów liczona z modelem LSD dla ^{142}Ba . Prawy: przewidywania zależności spinowej dla energii gamma E2 (od spinu I+2 do spinu I). Skopiowane z [XIII].

deformacji, po których następuje minimalizacja.

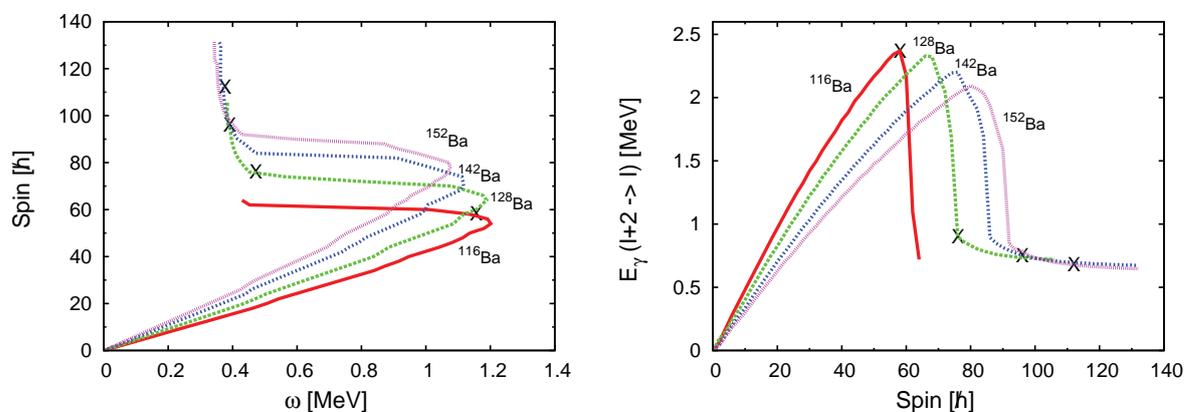
Rysunek 4.16 pokazuje, że nawet nieznaczne zmiany promienia szyjki skutkują zmianami energii całkowitej jądra. Porównując rys. 4.16 i rys. 4.15, można wnioskować, że obszar szyjki ma duży wpływ na wartości zminimalizowanej energii, ponieważ różnice w energii zaczynają się, gdy promień szyjki jest mniejszy niż połowa promienia jądra sferycznego. Ten wniosek wydaje się być potwierdzony na rysunkach 4.17, gdzie dla izotopów selenu, molibdenu i lutetu pokazane są różnice energii otrzymanej z różnymi zestawami multipoli dla jądra nierotującego. Kolejność krzywych, a zatem wielkość różnic energii minimalizowanej po różnych zestawach współczynników deformacji, jest stała w obrębie izotopów ale zmienia się między selenem, molibdenem i lutetem.

Uwaga

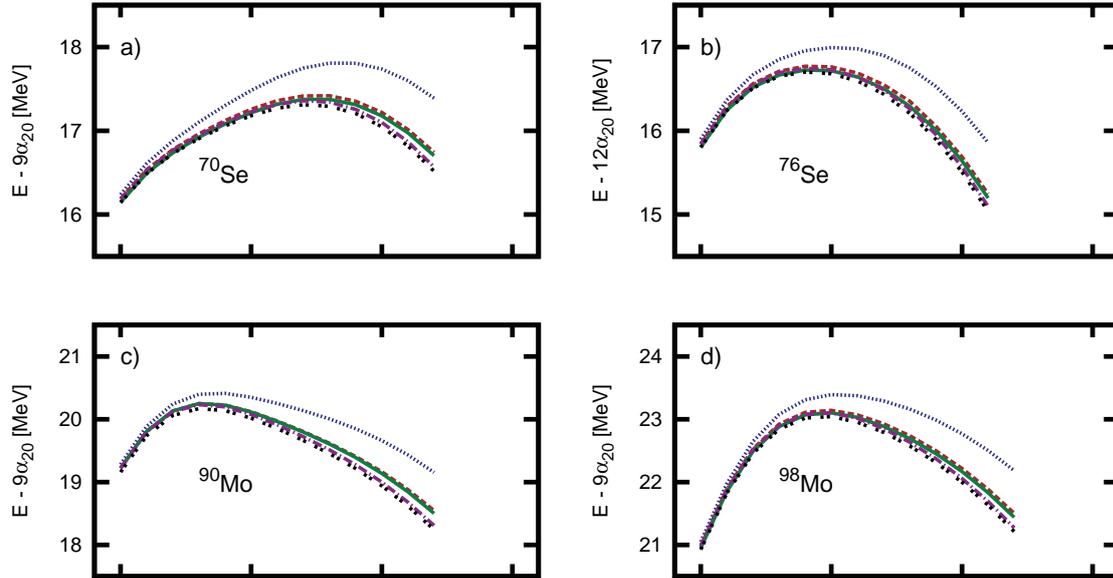
Rysunek 4.13 przedstawia ewolucję energii minimalnej dla danego spinu dla kilku wybranych jąder i służy głównie do pokazania, że energia na linii yrast nie zależy od obciążenia bazy parametrów deformacji powyżej $\lambda_{max} = 8$ dla dużego zakresu mas jąder. Na stronie internetowej (patrz referencja [XX]) można wyrysować mapy energii makroskopowej LSD dla dowolnego zestawu spinów (parzystych) oraz otrzymać linię yrast dla minimów energii potencjalnej oraz efektywnej energii uzyskanej poprzez uśrednienie za pomocą funkcji Boltzmana dla dowolnej temperatury.



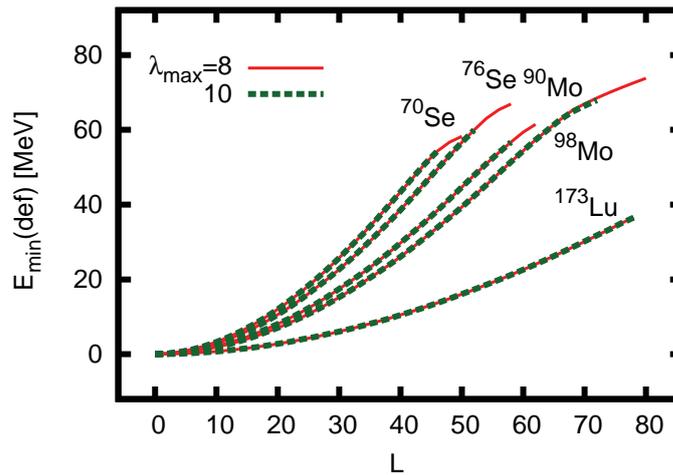
Rysunek 4.10: Podobne do Rys. 4.7 ale dla $^{116,128,142,152}\text{Ba}$. Poziome linie oznaczają spiny, dla których bariera na rozszczepienie jest mniejsza od 8 lub 3 MeV. Skopiowane z [XVI].



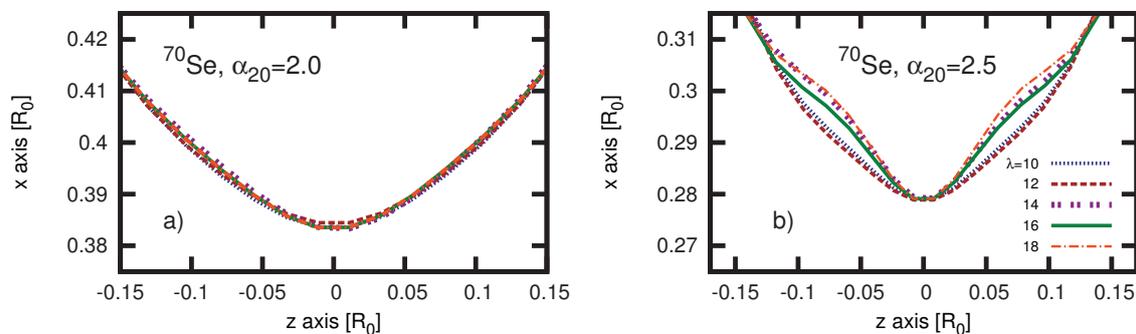
Rysunek 4.11: Podobny do Rys. 4.9 ale dla $^{116,128,142,152}\text{Ba}$. Skopiowane z [XVI].



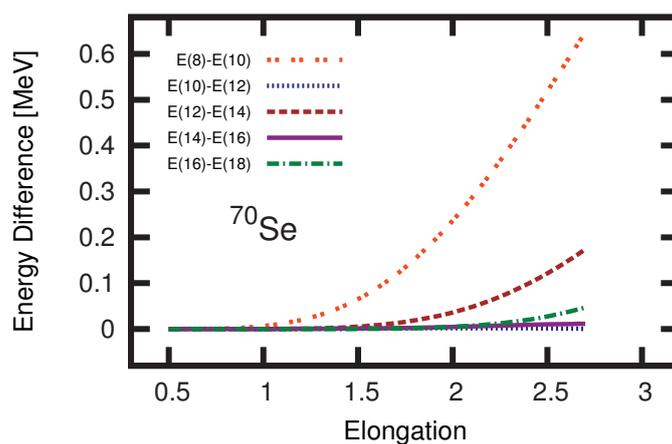
Rysunek 4.12: Zależność energii liczonej z wyrażenia LSD-C z $a_{neck} = 0.5$ dla dużych wydłużeń i spinu $L = 0 \hbar$ w funkcji obciążenia bazy. Energie zostały zminimalizowane po deformacjach $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq \lambda_{max}$ napisanych w polu rysunków. Aby zwiększyć czytelność ilustracji, odjęto funkcję liniową, jak wskazano w opisie na osi pionowej. Krzywe zatrzymują się na deformacji, dla której $R_{neck} < 0.3 \cdot R_0$.



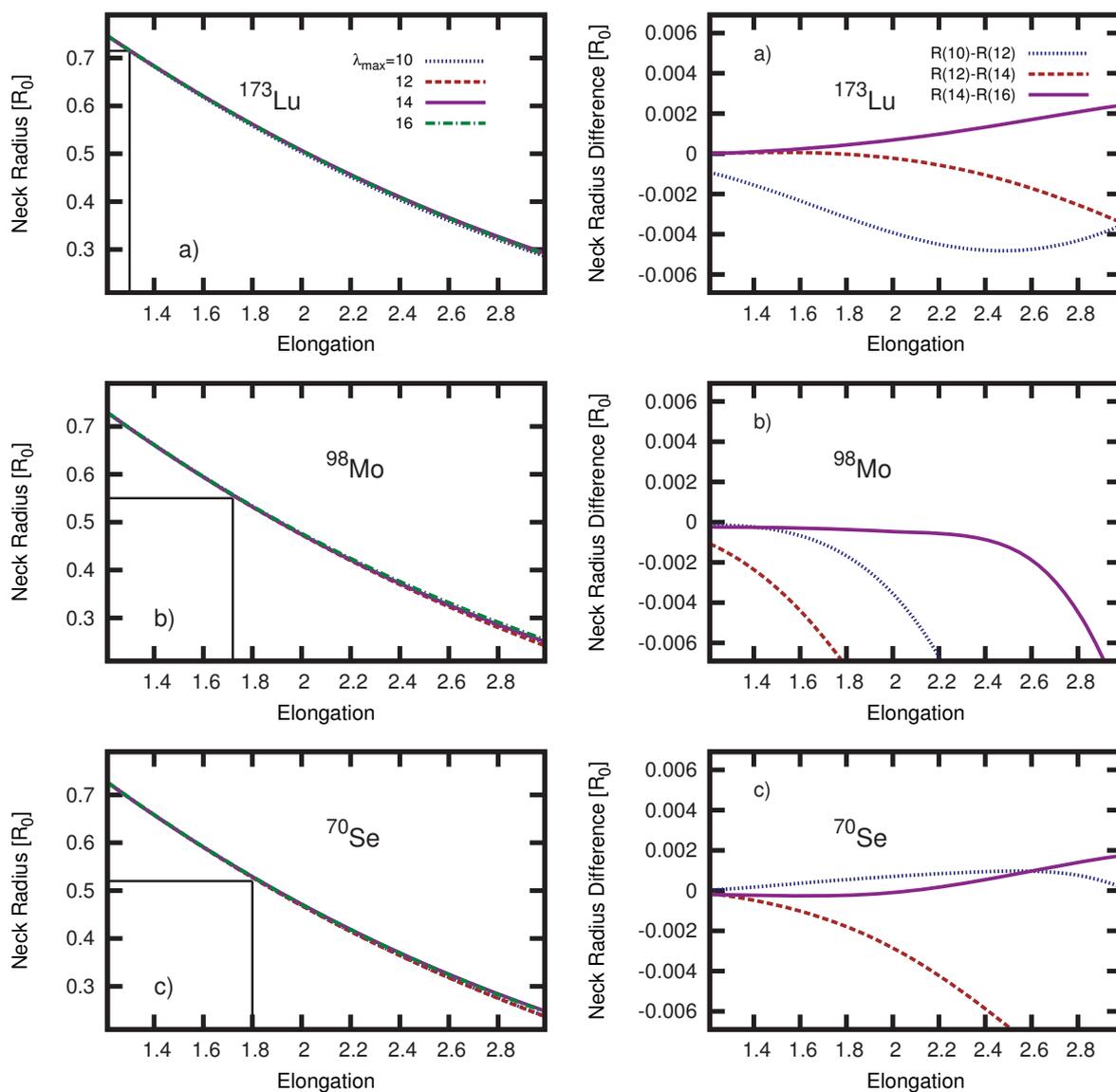
Rysunek 4.13: Zależność minimum energii od obciążenia bazy parametrów deformacji λ_{max} w funkcji wzrastającego spinu. Minimalizowano po parametrach deformacji $\alpha_{\lambda,0}$ dla $\lambda \leq \lambda_{max}$. Energie makroskopowe zawierają energię kongruencji zależną od kształtu z $a_{neck} = 0.5$. Krzywe kończą się albo jeśli warunek rozerwania jest spełniony ($R_{neck} < 0.3 \cdot R_0$) dla niższego spinu niż spin, dla którego bariera znika, albo przy spinie, gdzie bariera zniknęła. Stabilność została uzyskana dla $\lambda_{max} = 8$.



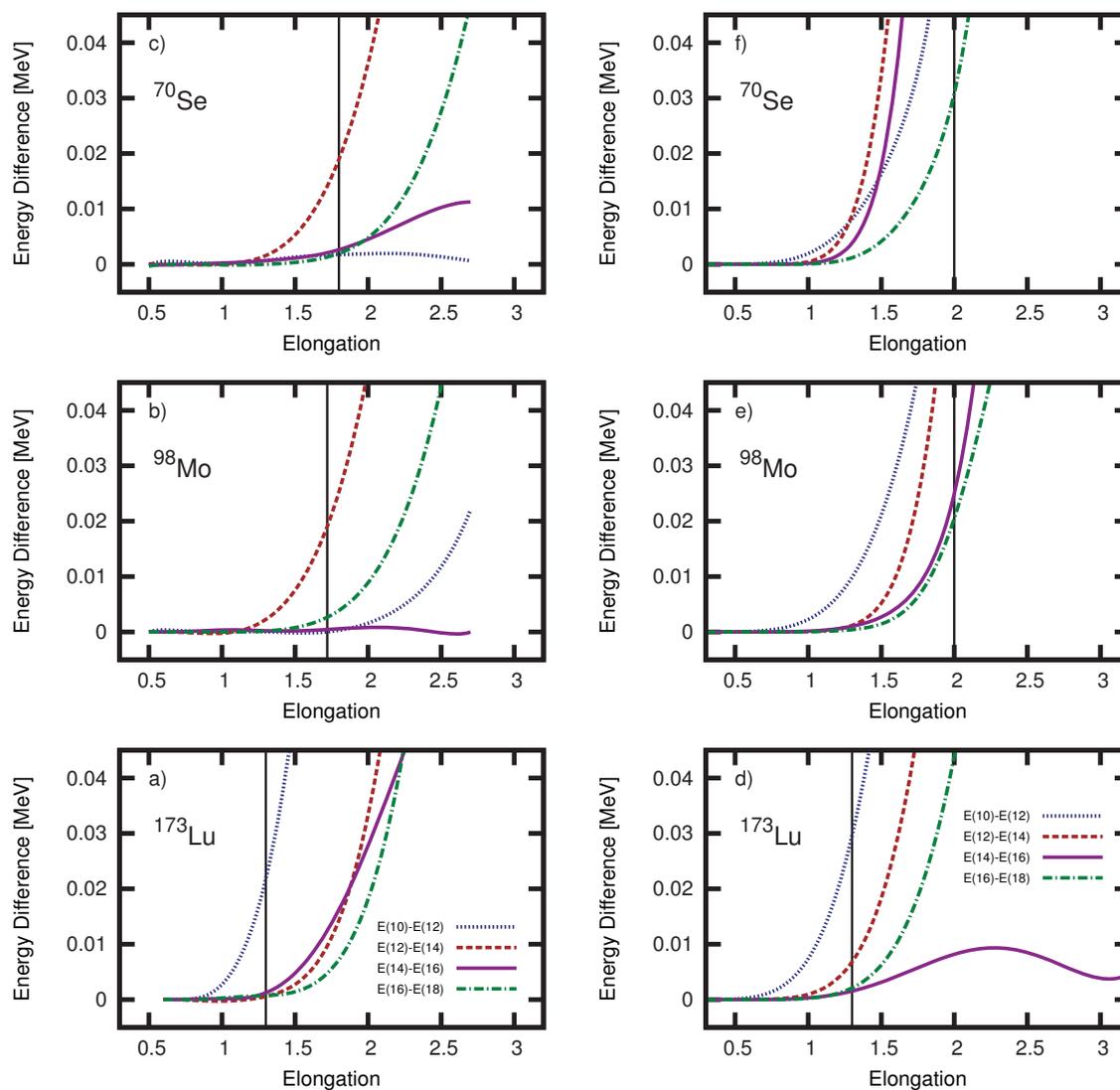
Rysunek 4.14: Test dobroci obcięcia liczby parametrów deformacji poprzez obserwację zmian kształtu jądra w okolicy szyjki dla wydłużenia $\alpha_{20} = 2$. (lewy, góra) i $\alpha_{20} = 2.5$ (prawy, góra) dla ^{70}Se . Pozostały obszar dla wszystkich zestawów parametrów deformacji się pokrywa. Zestawy wartości parametrów deformacji użyte do wyrysowania kształtów są otrzymane po minimalizacji dla ^{70}Se przy $\alpha_{20} = 2.5$ (prawy), oraz przy $\alpha_{20} = 2$. (lewy).



Rysunek 4.15: Różnica energii otrzymanych w zależności od liczby parametrów deformacji użytych do minimalizacji energii. Obniżenie energii przy minimalizacji po wszystkich parametrach deformacji osiowych aż do $\lambda=10$ w stosunku do energii, gdy minimalizowane są tylko deformacje do $\lambda=8$, jest o około rząd wielkości większe w stosunku do dołożenia jeszcze dwóch parametrów deformacji: $\lambda=11$ i 12 .



Rysunek 4.16: (Lewa kolumna) Zmiana rozmiaru szyjki w zależności od liczby parametrów deformacji użytych do minimalizacji energii dla ^{70}Se , ^{98}Mo i ^{173}Lu . Proste oznaczają wartości deformacji, gdzie następuje zmiana wartości energii otrzymanej poprzez minimalizację po różnych zestawach parametrów. (Prawa kolumna) Różnica promieni szyjki otrzymanych przy minimalizacji po zbiorach parametrów deformacji.



Rysunek 4.17: Rysunek podobny do 4.15 ale dla ^{70}Se (górze), dla ^{98}Mo (środek) i dla ^{173}Lu (dół) przy spinie $I=0$ i $50 \hbar$.

4.5 Wibracje oktopolowe

Tak jak w przypadku przejść Jacobi'ego dyskutuje się minima energetyczne na płaszczyźnie osiowych i nieosiowych deformacji kwadrupolowych, tak dla przejść Poincaré'go ważne jest badanie zachowania potencjału na mapach kwadrupolowo-oktopolowych (np.: Rys. 4.6). Dla deformacji oktopolowych można oszacować także wartości dynamiczne oraz dyspersję od wartości średniej.

Założmy, że α_{30} to dowolny parametr deformacji, z którym liczymy wibracje jednowymiarowe. W tym celu rozwiązuje się jednowymiarowe równanie Schrödingera częściowo przedstawione w [Dud07a] ale przypomnijmy, że w najprostszym przybliżeniu klasyczna energia jądra, w zależności od deformacji oktopolej, osiowo-symetrycznej, może być przedstawiona jako:

$$E(\alpha_{30}, \dot{\alpha}_{30}) = \frac{1}{2}B\dot{\alpha}_{30}^2 + \frac{1}{2}C\alpha_{30}^2; \quad (4.7)$$

skąd wynika postać hamiltonianu kwantowego:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2B} \frac{d^2}{d\alpha_{30}^2} + \frac{1}{2}C\alpha_{30}^2, \quad (4.8)$$

gdzie B jest parametrem masowym a C - współczynnikiem sztywności. To równanie jest równaniem Schrödingera dla kwantowego oscylatora harmonicznego więc korzystając z Tabeli 3.1 można napisać wzór na energię rozwiązań w postaci:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \text{ gdzie } \hbar\omega = \sqrt{\frac{C}{B}} \quad (4.9)$$

gdzie $n = 0$ odpowiada rozwiązaniu dla stanu podstawowego (tzw. wibracje punktu zerowego, *zero-point vibration*), $n = 1$ - odpowiada wzbudzeniu jednofononowemu a ω to częstość oscylacji. Unormowane funkcje falowe mają postać:

$$\phi_n(\alpha_{30}) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}} e^{-\alpha_{30}^2/2\sigma^2} H_n\left(\frac{\alpha_{30}}{\sigma}\right) \quad (4.10)$$

gdzie H_n to wielomiany Hermite'a, zaś A - amplituda drgań zerowych (*the zero point amplitude*) jest dana przez

$$A \stackrel{df}{=} [\langle \phi_{n=0} | \alpha^2 | \phi_{n=0} \rangle]^{1/2} = [\hbar^2/(4BC)]^{1/4} \quad (4.11)$$

przy czym

$$\sigma \stackrel{df}{=} \sqrt{2}A = \sqrt{2}[\hbar^2/(4BC)]^{1/4} = \left[\frac{\hbar^2}{BC}\right]^{1/4}. \quad (4.12)$$

Zapisując równanie Schrödingera dla ruchów kolektywnych mamy:

$$\hat{H}\phi_n(\alpha_{30}) = E(\alpha_{30})\phi_n(\alpha_{30}) \quad (4.13)$$

oraz

$$\hat{H}\phi_n(\alpha_{30}) = -\frac{\hbar^2}{2B} \frac{d^2}{d\alpha_{30}^2} \phi_n(\alpha_{30}) + \frac{1}{2}C\alpha_{30}^2 \phi_n(\alpha_{30}) \quad (4.14)$$

Pierwszy człon to pochodna po zmiennej kolektywnej:

$$\frac{d^2}{d\alpha_{30}^2}\phi_n(\alpha_{30}) = \frac{d^2}{d\alpha_{30}^2}\left(\frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}2^n n!}}\frac{1}{\sqrt{A}}e^{-\alpha_{30}^2/2\sigma^2}H_n\left(\frac{\alpha_{30}}{\sigma}\right)\right); \quad (4.15)$$

$$\frac{d^2}{d\alpha_{30}^2}\phi_n(\alpha_{30}) = \frac{d^2}{d\alpha_{30}^2} \quad (4.16)$$

i zakładamy, że:

$$\phi_n(\alpha_{30}) = N_n e^{-\alpha_{30}^2/2\sigma^2} H_n\left(\frac{\alpha_{30}}{\sigma}\right); \quad (4.17)$$

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}2^n n!}}\frac{1}{\sqrt{A}} \quad (4.18)$$

$$\frac{\alpha_{30}}{\sigma} = \xi; \quad \alpha_{30} = \xi\sigma; \quad d\alpha_{30} = \sigma d\xi; \quad (4.19)$$

Rozwiązaniem powyższego równania są:

$$\frac{d^2}{d\alpha_{30}^2}\phi_n(\alpha_{30}) = N_n \frac{1}{\sigma^2} \frac{d^2}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi); \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) &= -\xi e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) + e^{-\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) \\ &= -\xi e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) + e^{-\xi^2/2} 2n H_{n-1}(\xi). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Ponieważ:

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = 2n H_{n-1}(x), \quad (4.22)$$

to mamy:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) &= \frac{d}{d\xi} \left(\frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)) \right) = \\ &= \xi^2 e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) - e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) - \xi 2n e^{-\xi^2/2} H_{n-1}(\xi) - \xi 2n e^{-\xi^2/2} H_{n-1}(\xi) \\ &+ 4n(n-1) e^{-\xi^2/2} H_{n-2}(\xi) = \\ &= e^{-\xi^2/2} \left((\xi^2 - 1) H_n(\xi) - \xi 4n H_{n-1}(\xi) + 4n(n-1) H_{n-2}(\xi) \right) = \\ &= e^{-\xi^2/2} \left((\xi^2 - 1) H_n(\xi) - 2n(2\xi H_{n-1}(\xi) - 2(n-1) H_{n-2}(\xi)) \right) \end{aligned} \quad (4.23)$$

i

$$H_n(x) = 2x H_{n-1}(x) - 2n H_{n-2}(x). \quad (4.24)$$

Tak więc

$$\begin{aligned} e^{-\xi^2/2} \left((\xi^2 - 1) H_n(\xi) - 2n(2\xi H_{n-1}(\xi) - 2(n-1) H_{n-2}(\xi)) \right) &= \\ &= e^{-\xi^2/2} \left((\xi^2 - 1) H_n(\xi) - 2n H_n(\xi) \right), \end{aligned} \quad (4.25)$$

a stąd wychodzi, że:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{d\alpha_{30}^2}\phi_n(\alpha_{30}) &= N_n \frac{1}{\sigma^2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) (\xi^2 - 1 - 2n) \\
&= \frac{1}{\sigma^2} (\xi^2 - 1 - 2n) \phi_n(\alpha_{30}) \\
&= \frac{1}{\sigma^2} \left(\left(\frac{\alpha_{30}}{\sigma} \right)^2 - 1 - 2n \right) \phi_n(\alpha_{30})
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Wracając do równania Schrödinger'a:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\phi_n(\alpha_{30}) &= -\frac{\hbar^2}{2B} \frac{d^2}{d\alpha_{30}^2} \phi_n(\alpha_{30}) + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 \phi_n(\alpha_{30}) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2B} \frac{1}{\sigma^2} \left(\left(\frac{\alpha_{30}}{\sigma} \right)^2 - 1 - 2n \right) \phi_n(\alpha_{30}) + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 \phi_n(\alpha_{30}) \\
&= E \phi_n(\alpha_{30})
\end{aligned} \tag{4.27}$$

mamy:

$$-\frac{\hbar^2}{2B} \frac{1}{\sigma^2} \left(\left(\frac{\alpha_{30}}{\sigma} \right)^2 - 1 - 2n \right) \phi_n(\alpha_{30}) + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 \phi_n(\alpha_{30}) = E \phi_n(\alpha_{30}). \tag{4.28}$$

Gdy $\sigma = [\frac{\hbar^2}{BC}]^{1/4}$ i $E_n = (n + \frac{1}{2}) \sqrt{\frac{C}{B}}$ otrzymujemy:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2B} \left(\frac{BC}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_{30}^2 BC}{\hbar^2} - 1 - 2n \right) \phi_n(\alpha_{30}) + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 \phi_n(\alpha_{30}) - E \phi_n(\alpha_{30}) &= 0; \\
-\frac{\hbar^2}{2B} \left(\frac{BC}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_{30}^2 BC}{\hbar^2} - 1 - 2n \right) + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 - E &= 0; \\
-\frac{\hbar^2}{2B} \left(\frac{BC}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_{30}^2 BC}{\hbar^2} - 1 - 2n \right) + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 - (n + \frac{1}{2}) \sqrt{\frac{C}{B}} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Dla $n=0$ czyli wibracji zerowych mamy:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2B} \left(\frac{BC}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\alpha_{30}^2 \left(\frac{BC}{\hbar^2} \right)^{1/2} - 1 \right) + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{C}{B}} &= 0; \\
-\frac{\hbar^2}{2B} \alpha_{30}^2 \frac{BC}{\hbar^2} + \frac{\hbar C^{1/2}}{2B} + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{C}{B}} &= 0; \\
-\frac{1}{2} \alpha_{30}^2 C + \frac{\hbar C^{1/2}}{2B} + \frac{1}{2} C \alpha_{30}^2 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{C}{B}} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Sprawdzając otrzymujemy:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2 &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d(\frac{\alpha_{30}}{\sigma})^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_{30}}{\sigma}\right)^2 = -\frac{1}{2} \sigma^2 \frac{d^2}{d(\alpha_{30})^2} + \frac{1}{2} \frac{1}{\sigma^2} \alpha_{30}^2 = \\ &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{BC}} \frac{d^2}{d(\alpha_{30})^2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{BC}{\hbar^2}} \alpha_{30}^2 = \frac{E}{u} \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$u = \hbar \sqrt{\frac{C}{B}}. \quad (4.32)$$

W celu sprawdzenia stałej normalizacji

$$\begin{aligned} \langle \phi_{n=0} | \phi_{n=0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} 2^{0!}} \frac{\sigma}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x^2/2} H_0^2(\xi) d\xi \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = 1; \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{2}} = \sqrt{\pi}, \quad (4.34)$$

gdź

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} x^2 e^{-x^2} = 0 \quad (4.35)$$

Wiemy, że ($H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$, $\xi = \alpha_{30}/\sigma$):

$$\begin{aligned} \langle \phi_{n=0} | \xi^2 | \phi_{n=0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} 2^{0!}} \frac{\sigma}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-2x^2/2} H_0^2(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2} A}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \left| \begin{array}{l} u(\xi) = -\xi/2 \quad v'(\xi) = -2\xi e^{-\xi^2} \\ u'(\xi) = -1/2 \quad v(\xi) = e^{-\xi^2} \end{array} \right| \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi}} \left(-\xi/2 (-2\xi e^{-\xi^2}) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (-1/2) e^{-\xi^2} d\xi \right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi}} \left(\xi^2 e^{-\xi^2} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \right); \end{aligned} \quad (4.36)$$

oraz dla wibracji zerowego rzędu:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{n=0} | \xi^2 | \phi_{n=0} \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi}} \left(\xi^2 e^{-\xi^2} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\pi} \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

a ponieważ $\xi = \alpha_{30}/\sigma$ to

$$\langle \phi_{n=0} | \alpha_{30}^2 | \phi_{n=0} \rangle = \frac{1}{2} \sigma^2 = \frac{1}{2} 2A^2 = A^2, \quad (4.38)$$

oraz

$$\langle \phi_{n=0} | \alpha_{30}^2 | \phi_{n=0} \rangle = \frac{1}{2} \sigma^2 = \frac{1}{2} 2A^2 = A^2. \quad (4.39)$$

Jeśli trzeba policzyć $\langle \alpha_{20}^2 \rangle$ i mamy $\xi_{20} = \alpha_{30}/\sigma = \alpha_{20}/\sigma$ to

$$\langle \alpha_{20}^2 \rangle \langle \phi_{n=0} | \xi_{20}^2 \sigma^2 | \phi_{n=0} \rangle = \frac{1}{2} \sigma^2 = \frac{1}{2} \sigma^2 \quad (4.40)$$

$$\sqrt{\langle \alpha_{20}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{1}{2}} \sigma. \quad (4.41)$$

Dla deformacji nieosiowej kwadrupolowej $\langle \alpha_{22}^2 \rangle$ i $\xi_{22} = \alpha_{30}/\sigma = \sqrt{2} \alpha_{22}/\sigma$

$$\langle \alpha_{22}^2 \rangle \rightarrow \langle \phi_{n=0} | \xi_{22}^2 \sigma^2 / 2 | \phi_{n=0} \rangle = \frac{1}{2} \sigma^2 / 2 = \frac{1}{4} \sigma^2 \quad (4.42)$$

$$\sqrt{\langle \alpha_{22}^2 \rangle} = \frac{1}{2} \sigma. \quad (4.43)$$

Amplituda drgań zerowych jest to zatem

$$A(\alpha_{20}) = [\langle \phi_{n=0} | \alpha_{20}^2 | \phi_{n=0} \rangle]^{1/2} = [\hbar^2 / (4B_{gsb} C(\alpha_{20}, \alpha_{30} = 0.0))]^{1/4}. \quad (4.44)$$

Jednofononowe wzbudzenia czyli dla ($n = 1$)

$$\begin{aligned} \langle \phi_{n=1} | \xi^2 | \phi_{n=1} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} 2^{1/2} 1!} \frac{\sigma}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-2\xi^2/2} H_1^2(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2}A}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} 4\xi^2 d\xi \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \left| \begin{array}{l} u(\xi) = -\xi^3/2 \quad v'(\xi) = -2\xi e^{-\xi^2} \\ u'(\xi) = -3/2\xi^2 \quad v(\xi) = e^{-\xi^2} \end{array} \right| \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{2\sqrt{2\pi}} \left(-\xi^3/2 (-2\xi e^{-\xi^2}) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (-3/2)\xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \right) \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi}} \left(\xi^4 e^{-\xi^2} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{3}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \right) \end{aligned} \quad (4.45)$$

Ostatni człon był rozwiązany dla wibracji zerowych, a także:

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} = 0 \quad (4.46)$$

i

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi &= \left| \begin{array}{l} u(\xi) = -\xi/2 \quad v'(\xi) = -2\xi e^{-\xi^2} \\ u'(\xi) = -1/2 \quad v(\xi) = e^{-\xi^2} \end{array} \right| \\ &= -\xi/2 (-2\xi e^{-\xi^2}) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (-1/2) e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \xi^2 e^{-\xi^2} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (-1/2) e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\pi}, \end{aligned} \quad (4.47)$$

skąd otrzymujemy, że

$$\begin{aligned}\langle \phi_{n=1} | \xi^2 | \phi_{n=1} \rangle &= \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{3}{2} \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \\ &= \frac{6\sqrt{2}}{4\sqrt{2}} = \frac{3}{2},\end{aligned}\quad (4.48)$$

a ponieważ $\xi = \alpha_{30}/\sigma$ więc

$$\langle \phi_{n=1} | \alpha_{30}^2 | \phi_{n=1} \rangle = \frac{3}{2} \sigma^2 = 3A^2. \quad (4.49)$$

W poniższym przekształceniu będziemy potrzebować następujących wyrażeń:

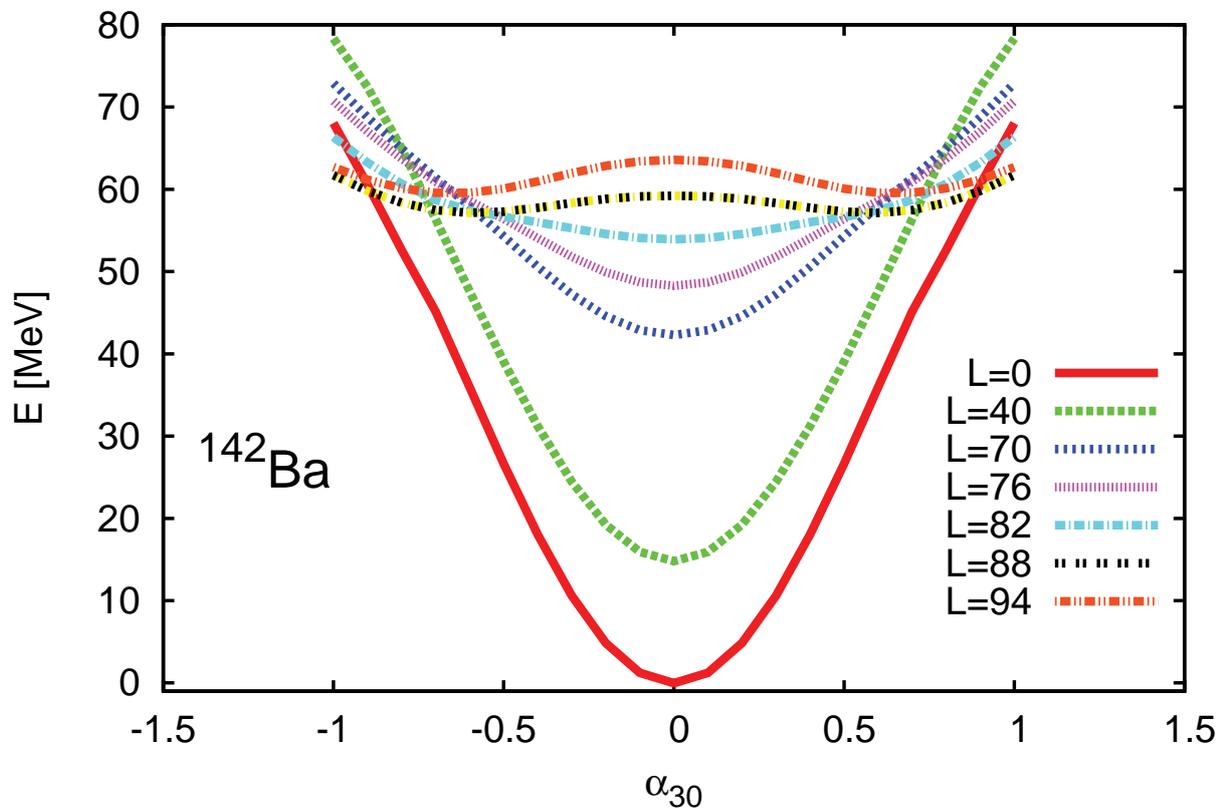
$$\begin{aligned}\frac{4\sqrt{2}}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-1/2) e^{-\xi^2} d\xi &= 1 \\ \frac{4\sqrt{2}}{4\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi &= 1 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi &= 1 \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi &= \sqrt{\pi}.\end{aligned}\quad (4.50)$$

Żeby sprawdzić unitarność funkcji falowych mamy:

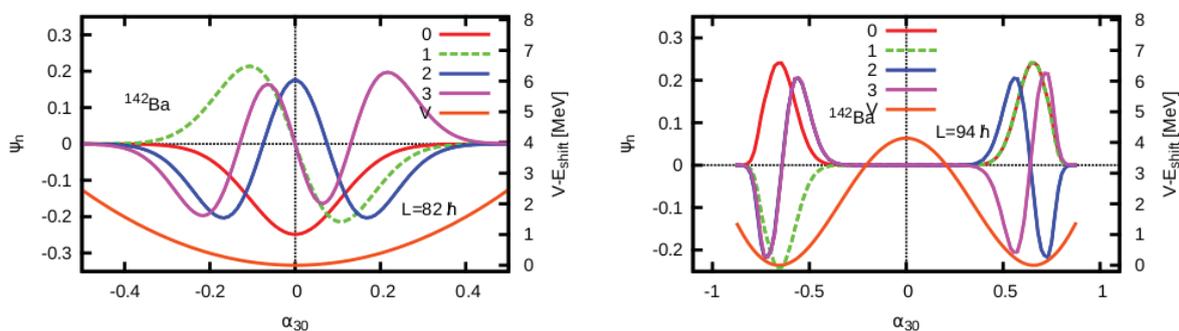
$$\begin{aligned}\langle \phi_{n=1} | \phi_{n=1} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} 2^1 1!} \frac{\sigma}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\xi^2/2} H_1^2(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2}A}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} 4\xi^2 d\xi \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \left| \begin{array}{ll} u(\xi) = -\xi/2 & v'(\xi) = -2\xi e^{-\xi^2} \\ u'(\xi) = -1/2\xi^2 & v(\xi) = e^{-\xi^2} \end{array} \right| \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{2\sqrt{2\pi}} \left(-\xi^1/2(-2\xi e^{-\xi^2}) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (-1/2) e^{-\xi^2} d\xi \right) = 1.\end{aligned}\quad (4.51)$$

Przy badaniu przejść Poincaré'go, współczynnik sztywności C wyznacza się dopasowując funkcję kwadratową do profilu energii w kierunku deformacji oktupolowej dla α_{20} odpowiadającej minimum energii. Oznacza to, że wraz ze wzrostem spinu i zmieniającym się położeniem minimum energetycznego, zmienia się wartość α_{20} , przy której wyznaczany jest współczynnik sztywności składowej potencjału w kierunku α_{30} .

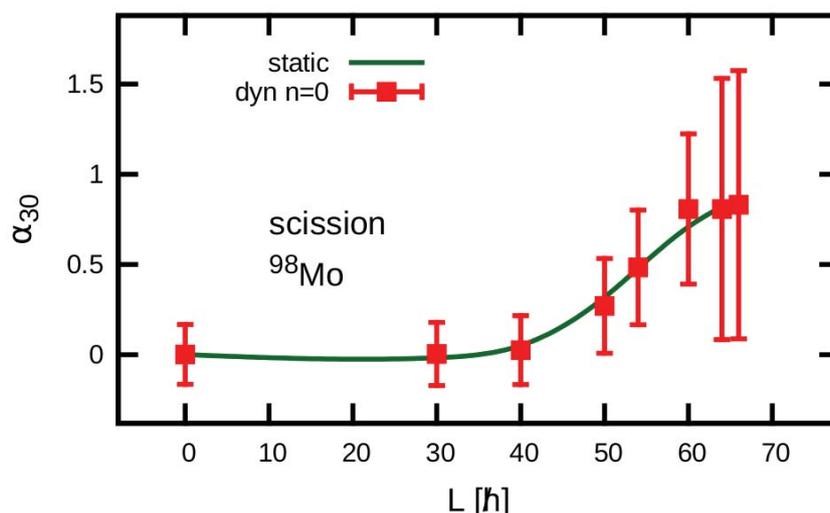
Kolejna uwaga dotyczy symetrii deformacji oktupolowej. Powierzchnie energii jądrowej są symetryczne dla dodatnich i ujemnych wartości parametru α_{30} . Przykładowe potencjały dla różnych wartości spinów pokazane są na Rys. 4.18. Potencjał z dwoma minimami pojawia się dla spinów większych od $82 \hbar$, co świadczy o pojawieniu się minimów energetycznych dla niezerowej deformacji oktupolowej $\alpha_{30} \neq 0$. Można zakładać więc, że pojawia się przejście Poincaré'go, a kształt jądra w minimum energii jest masowo niesymetryczny.



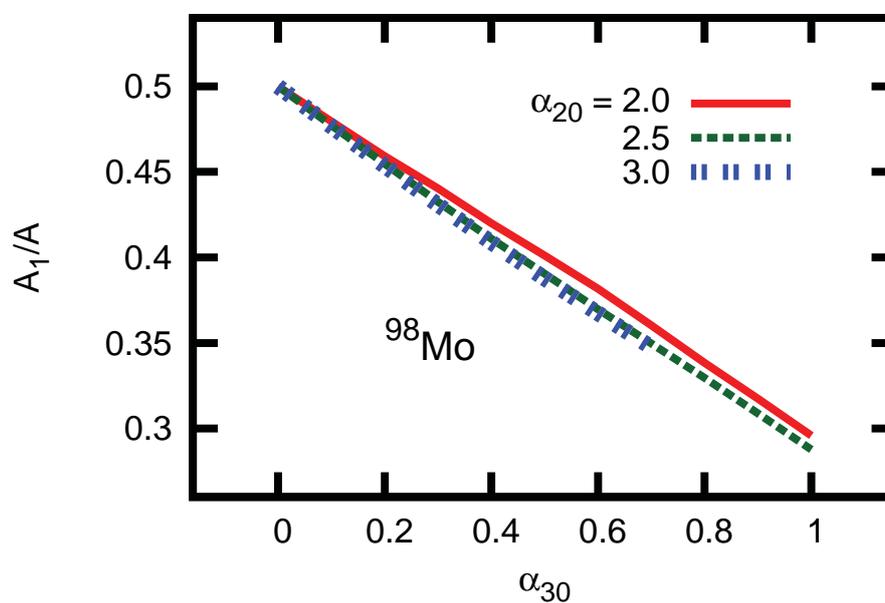
Rysunek 4.18: Przykład ewolucji kształtu profili energii wraz ze wzrostem spinu dla deformacji oktopolowej α_{30} dla ^{142}Ba . Do spinu $82 \hbar$ profile mają kształt paraboliczny, czyli deformacja jądra w minimum energii była odbiciowo symetryczna, a dla większych spinów pojawiają się potencjał dwudolkowy z minimumami energii dla $\alpha_{30} \neq 0$.



Rysunek 4.19: Funkcje falowe wzbudzeń zerowego (czerwony), pierwszego (zielony), drugiego (niebieski) i trzeciego (różowy) rzędu dla spinu $82 \hbar$ i $94 \hbar$ dla ^{142}Ba . Krzywe pomarańczowe pokazują profil energii dla danego spinu (oś prawa).



Rysunek 4.20: Ewolucja parametru deformacji oktupolowej α_{30} ze wzrostem spinu. Deformacja statyczna odpowiada kształtom w minimum energii potencjalnej a deformacja dynamiczna jest zdefiniowana jako $\bar{\alpha}_{30}$, Równanie (3.47).



Rysunek 4.21: Asymetria masowa lżejszego fragmentu rozszczepienia (A_1/A) dla trzech wartości wydłużenia jądra złożonego: $\alpha_{20} = 2.0$; 2.5 i 3.0 dla jądra ^{98}Mo . Krzywe zostały otrzymane dla spinu ($L=0$) przy minimalizacji po parametrach deformacji $\alpha_{\lambda 0}$ aż do $\lambda \leq 12$.

Funkcje falowe otrzymane po diagonalizacji hamiltonianu, powinny także odzwierciedlać profile energii. Na Rys. 4.19 przedstawione są funkcje falowe dla poszczególnych wzbudzeń otrzymane poprzez rozwiązanie równania Schrödingera z potencjałami oznaczonymi pomarańczowymi krzywymi przy spinach $82 \hbar$ i $94 \hbar$ dla ^{142}Ba . W zależności od kształtu profilu, funkcje mogą wykazywać przybliżoną degenerację dla kolejnych wzbudzeń (krzywe zielona i czerwona pokrywają się dla $\alpha_{30} > 0$, a krzywe niebieska i różowa - dla $\alpha_{30} < 0$).

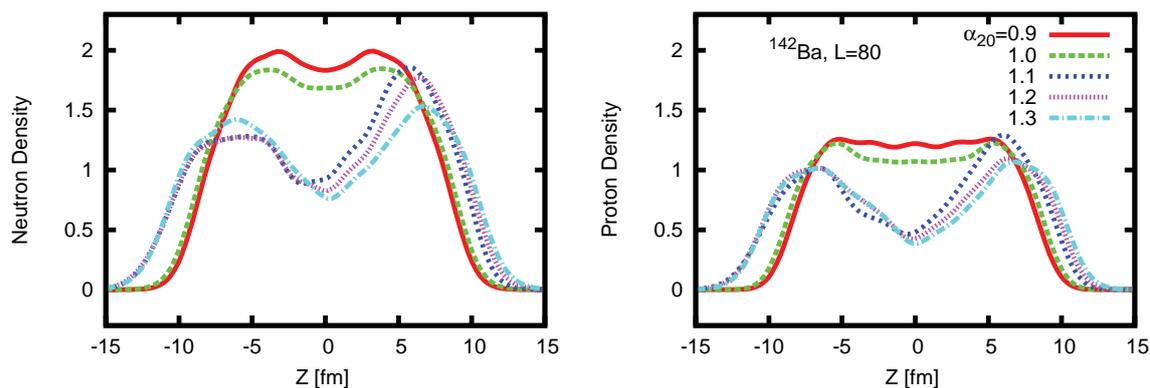
Korzystając z powyższych funkcji falowych można obliczyć wartości średnich deformacji dynamicznych (wzór 3.47) oraz ich dyspersję. Rysunek 4.20 pokazuje, jak różni się wartość parametru deformacji α_{30} otrzymanej w minimum energii od oszacowanej przy uwzględnieniu wibracji kolektywnych.

Wyniki dotyczące deformacji statycznej zostały otrzymane po minimalizacji po parzystych i nieparzystych parametrach deformacji aż do $\lambda = 12$, przy czym parametr α_{30} odgrywa decydującą rolę. Złamanie symetrii odbiciowej związane z niezerowością parametru oktopolowego, jest widoczne w przypadku obu podejść: statycznego i dynamicznego. Dla wibracji dynamicznych parametr oktopolowy jest niezerowy dla każdej wartości spinu ale zmienia się tak samo gwałtownie jak w przypadku statycznym. Deformacja oktopolowa opisuje kształty jąder masowo-asymetrycznych, co pozwala na oszacowanie wielkości asymetrii masowej fragmentów rozszczepienia, które powstaną po rozerwaniu jądra złożonego.

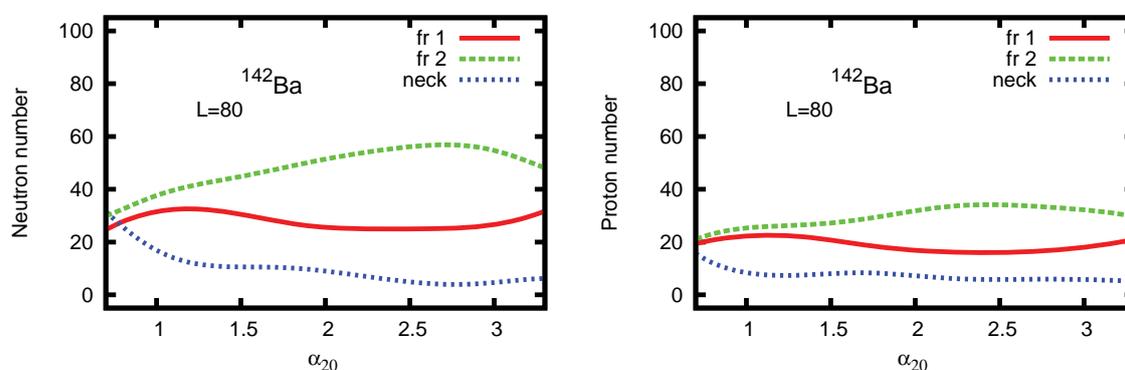
Rysunek 4.21 ilustruje zależność takiej asymetrii masowej dla lżejszego fragmentu rozszczepienia od parametru deformacji oktopolowej a dodatkowo wskazuje, że asymetria masowa może być słabo zależna od wydłużenia jądra rozszczepiającego się. Wydłużenia jądra, dla których policzono asymetrię masową odpowiadają kształtom jądra, dla których szyjka jest dobrze widoczna. Wyniki otrzymano poprzez konstrukcję dwóch elipsoid wpasowanych w kształt pierwotny jądra, tak by różnica objętości jądra-matki i sumy objętości jąder-córek była najmniejsza. Natomiast stosunek objętości jąder-córek pozwolił na oszacowanie asymetrii masowej fragmentów rozszczepienia.

4.6 Rozkład masy w jądrze oktopolowo zdeformowanym

W pierwszym przybliżeniu można przyjąć, że izospin fragmentów jest taki sam jak izospin jądra złożonego, gdyż materia jest równomiernie naładowana, ale można też, znając deformację jądra, użyć podejścia mikroskopowego. Dla danego zestawu parametrów deformacji można policzyć funkcje falowe i energie własne, które później mogą być użyte do liczenia energii całkowitej jądra z metody makroskopowo-mikroskopowej, tak jak to było opisane w rozdziałach 1 i 2. W tym podrozdziale funkcje falowe zostaną użyte do otrzymania gęstości protonów i neutronów w jądrze oktopolowo zdeformowanym. Na rysunku 4.22 przedstawione są gęstości protonów i neutronów otrzymane z całkowania iloczynu funkcji falowych dla zestawu parametrów deformacji otrzymanych przy minimalizacji energii makroskopowej dla jądra szybko rotującego ^{142}Ba . Ewolucja kształtu jądra wraz z wydłużeniem pokazuje moment włączania się deformacji oktopolowej. Oczywiście gęstość neutronów jest większa niż protonów ($Z=56$, $N=86$), ale kształt rozkładu gęstości jest taki sam dla danej deformacji. Można się pokusić o policzenie pochodnych i drugich pochodnych w celu zdefiniowania matematycznie obszaru, gdzie zaczyna i kończy się szyjka i oba fragmenty. Będzie to na przykład zerowanie się drugiej pochodnej gęstości po współrzędnej 'z'. W ten sposób możliwe jest określenie składu nukleonowego fragmentów i szyjki co jest pokazane na ry-



Rysunek 4.22: Mikroskopowe gęstości protonów i neutronów w jądrze zdeformowanym dla różnych wydłużeń i niezerowego parametru deformacji oktupolowej.

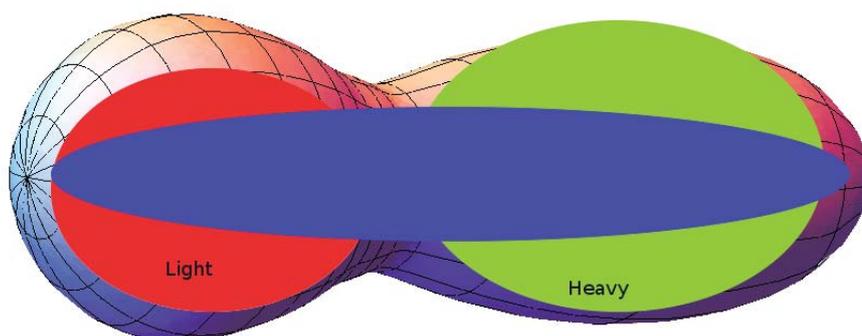


Rysunek 4.23: Ewolucja liczby protonów i neutronów we fragmentach rozszczepienia i szyjce z wydłużeniem. Zestawy parametrów są wzięte z minimalizacji energii makroskopowej przy spinie $I=80 \hbar$ dla ^{142}Ba .

sunku 4.23, gdzie zielona, przerywana krzywa dotyczy dużego fragmentu, czerwona, ciągła - małego fragmentu a niebieska, drobno przerywana - obszaru szyjki. Wyniki przedstawione tutaj są wstępne ale w przyszłości można będzie wykorzystać je do dokładniejszego oszacowania rozkładu mas i ładunków we fragmentach rozszczepienia. Korzystając z podejścia mikroskopowego możliwe jest też policzenie rozkładu spinów między fragmentami.

4.7 Funkcja nasilenia GDR w jądrach oktupolowo zdeformowanych

Eksperymentalne argumenty za tym że rzeczywiście zaobserwowano przejścia Jacobi'ego zostały otrzymane poprzez obserwację zmian kształtu funkcji nasilenia GDR. Przy przejściu Poincaré'go także będzie badać gigantyczny rezonans dipolowy ale należy oszacować teoretycznie, jak mogą takie funkcje wyglądać. Metoda termicznych fluktuacji kształtu była dotychczas stosowana do kształtów zwartych, kwadrupolowych. Przy przejściu Poincaré'go, jądro posiada dobrze zarysowane przewężenie, przez co oscylacje mogą być różne w obu wypukłych częściach. Ta hipoteza jest nie potwierdzona do tej pory, ani nie ma reguł w jaki sposób można składać oscylacje pochodzące do przyszłych fragmentów rozszczepienia. Tutaj zaproponowano złożenie oscylacji pochodzących z fragmentów (czerwony i zielony obszar na Rys. 4.24) i z części wspólnej (niebieska elipsa) z takimi samymi wagami, przez co można otrzymać funkcje nasilenia GDR, tak jak to pokazano na Rys. 4.26 (kolory krzywych są skorelowane z obszarami z Rys. 4.24).



Rysunek 4.24: Kształt jądra ^{142}Ba przy spinie $80 \hbar$ w minimum energetycznym. Kolorowe elipsy znaczą przykładowo obszary przyszłych fragmentów (zielony i czerwony) i kształt z minimum energetycznego jądra kwadrupolowo zdeformowanego (niebieski).

Do właściwego oszacowania funkcji nasilenia GDR, emitowanego z jądra bardzo zdeformowanego potrzebny jest kręt wewnętrzny fragmentów przed rozszczepieniem.

Za Moretto [Mor89] można przyjąć, że w momencie, gdy uformuje się przewężenie, mamy zdefiniowaną szyjkę i jądro będzie dążyło do rozszczepienia. Do każdego fragmentu można dopasować elipsoidę i w dalszej części posłużyć się jedną z dwóch hipotez roboczych: albo dwie elipsoidy będą się stykały lub bardziej ogólnie możemy je połączyć np. walcem imitującym szyjkę (tak jak na przykład przy parametryzacji typu hantli (*dumbbell parametrization*) [Has71]).

Elipsoidy zostały dopasowane w taki sposób, żeby mieć tę samą krzywiznę w płaszczyźnie Z-X lub Z-Y (ponieważ nieosiowość jądra jest niewielka w momencie, gdy szyjka jest formowana, to można przyjąć, że obie te krzywizny są takie same- w zdecydowanej większości przebadanych kształtów, takie założenie jest zgodne z prawdą). Suma długości obu elipsoid w pierwszym przypadku oraz uwzględnienie rozmiarów szyjki w drugim przypadku równa

się podwójnej długości dłuższych półosi całego jądra. (Przyjmujemy, że gęstość materii jądrowej jest stała.)

Dla obu fragmentów możemy obliczyć/ oszacować w grubym przybliżeniu, momenty bezwładności $J_i = 2/5(a_i^2 + b_i^2)$, gdzie: $i = 1, 2$ - elipsoidy, a_i - półoś wielka elipsoidy a b_i to mała półoś.

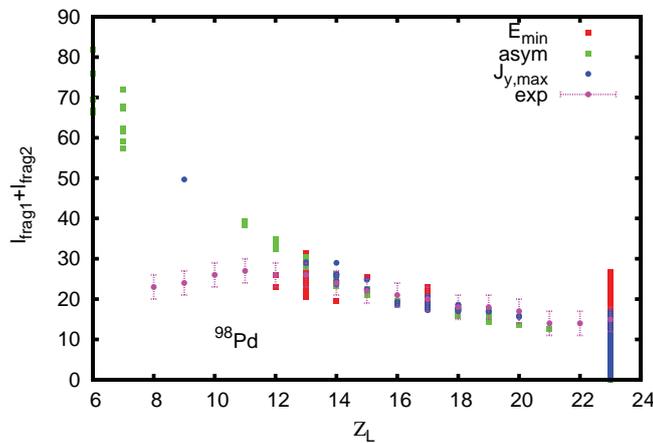
Jeśli używamy modelu z dwoma stykającymi się elipsoidami, to kręt fragmentu może być policzony z wzoru [Mor89]:

$$I_i = \frac{J_i I_0}{J_1 + J_2 + \mu d^2}, \quad (4.52)$$

gdzie: $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ - masa zredukowana, d - odległość między środkami elipsoid.

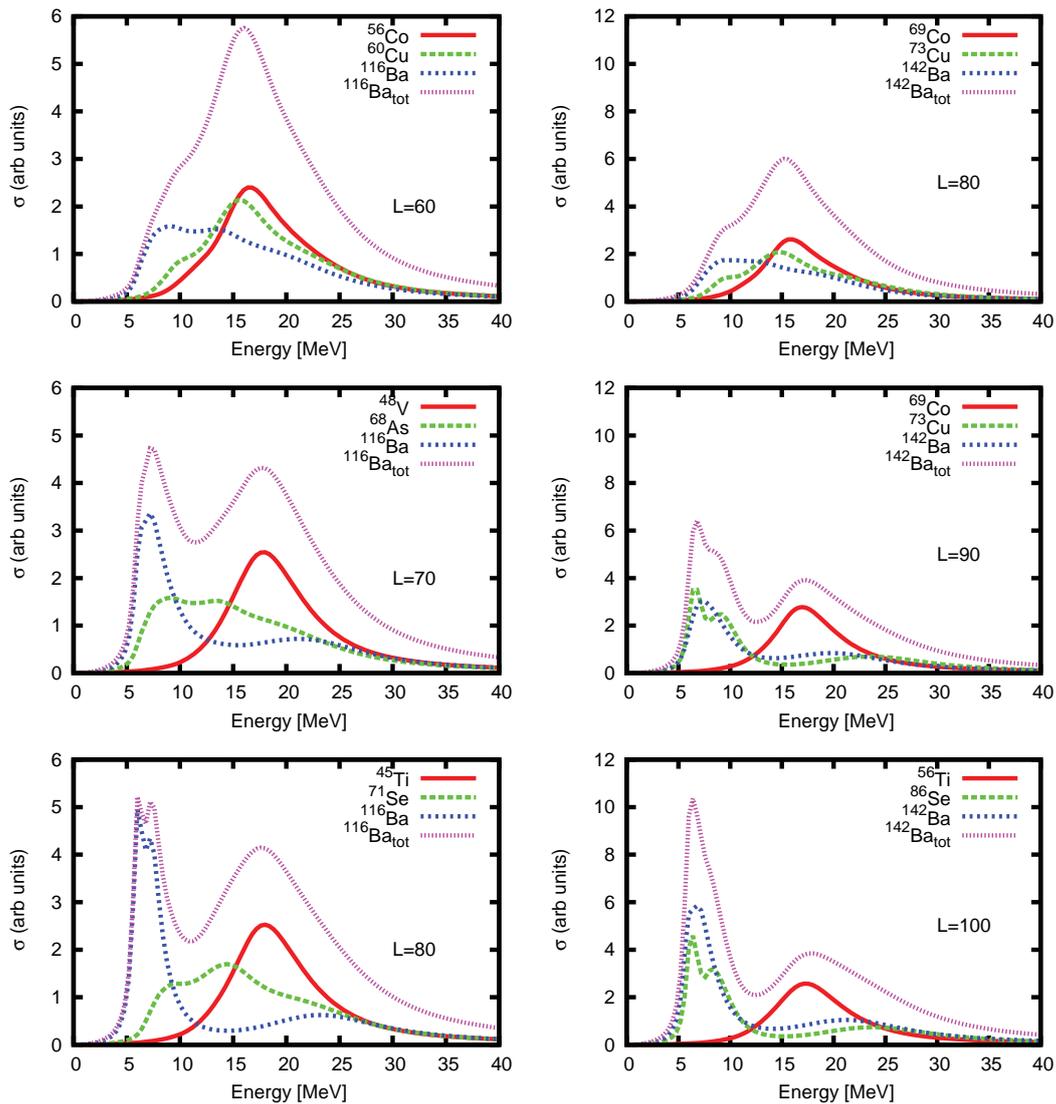
Porównanie z danymi eksperymentalnymi jest dość trudne gdyż było tylko kilka eksperymentów, gdzie badano jednocześnie masy fragmentów rozszczepienia jak i ich kręt. Jednym z takich doświadczeń może być reakcja $^{40}\text{Ar}(280 \text{ MeV}) + ^{58}\text{Ni}$, gdzie jądrem złożonym był ^{98}Pd .

Rysunek 4.25 przedstawia sumę momentów pędów fragmentów w zależności od Z lżejszego fragmentu. Wybór punktu rozerwania jest czysto arbitralny ale mamy kilka możliwości: możemy założyć, że rozerwanie nastąpi w minimum energii dla danego spinu (czerwone kropki) [E_{min}], przy odległości między fragmentami $2.3 * R_{sph}$ (zielone kwadraty) [asym] czy też przy maksymalnym momencie bezwładności jądra złożonego (niebieskie kropki) [$J_{y,max}$]. Jak widać z eksperymentem najlepiej zgadza się założenie o maksymalnym momencie bezwładności jądra złożonego, chociaż nie odtwarza się spinów jąder o $Z < 13$. Do



Rysunek 4.25: Dyskusja definicji punktu rozerwania. Suma spinów fragmentów rozszczepienia skorelowana z ładunkiem lżejszego fragmentu w reakcji $^{40}\text{Ar}(280 \text{ MeV}) + ^{58}\text{Ni} \rightarrow ^{98}\text{Pd}$ [Mor89].

liczenia funkcji nasilenia GDR zostały zastosowano spiny oszacowane z wzoru 4.52 a Z, N fragmentów policzono przy pomocy gęstości mikroskopowych. Należy podkreślić, że takie podejście jest bardzo uproszczone i trzeba znaleźć sposób na określenie stosunków przyczynków pochodzących od poszczególnych części na przykład poprzez rozwinięcie dyskusji wibracji oktupolowych. Tworzenie się szybki powoduje, że efektywny kształt funkcji nasilenia GDR a także efektywna szerokość połówkowa może być zupełnie inna od spodziewanej (porównanie różowej krzywej z niebieską na Rys. 4.26).



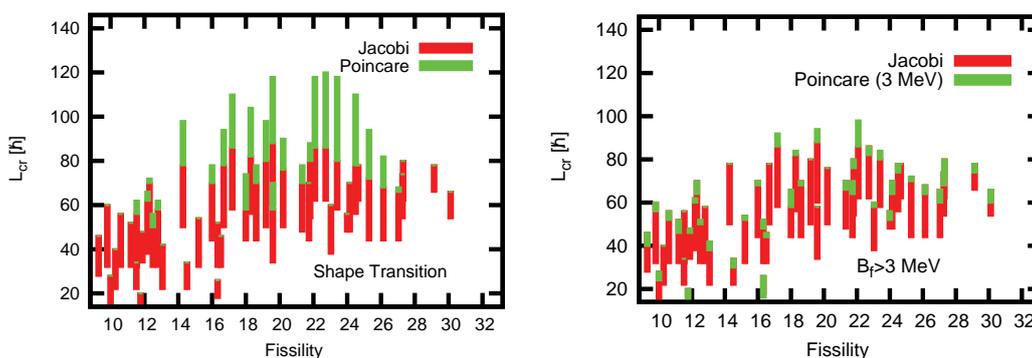
Rysunek 4.26: Funkcje nasilenia GDR dla jąder $^{116,142}\text{Ba}$ przy temperaturze 1 MeV. Kolory krzywych są skorelowane z obszarami na Rys. 4.24. Różowe krzywe to złożenie funkcji nasilenia pochodzących z fragmentów i z średniego kształtu jąder z takimi samymi wagami.

Z takich uproszczonych obliczeń widać, że dla jąder oktupełowych, czyli takich, których można oczekiwać po przejściu Poincaré'go, funkcja nasilenia GDR będzie bardziej pofragmentowana niż w przypadku, gdyby następowała emisja z jądra o deformacji kwadrupełowej, odbiciowo symetrycznej.

4.8 Zakres masowy występowania przejścia Poincaré'go

Badania złamania symetrii odbiciowej zapoczątkowane przez Poincaré'go [Poi85] dla obiektów grawitacyjnych były następnie kontynuowane w fizyce jądrowej przez Cohena i współpracowników [Coh74], gdzie dyskutowane były różne kształty, w tym także trójosiowe, zwane tam deformacją typu Beringera-Knox [Ber61] i oktupolowe. Oprócz dyskusji tych przejść z modelem LSD i parametryzacją kształtów bazującą na rozwinięciu powierzchni jądrowej w szereg harmonik sferycznych [XIII, XVI] prowadzone są prace z innymi modelami energii potencjalnej i w parametryzacji Modified Funny-Hills oraz z parametryzacją kształtów optymalnych (*optimal shape parametrization*) [Bar10, Bar11, Iva13, Bar13].

W szczególności stwierdzono, że w lekkich jądrach np.: ^{44}Ti istnieje niestabilność ze względu na symetrię odbiciową ale dla ^{84}Se i ^{88}Mo takiej niestabilności w punkcie siodłowym nie widać [Bar11] i jest to bardzo zależne od wysokości bariery na rozszczepienie, czyli od pozycji punktu siodłowego. Podkreślone zostało jednak [Bar13], że z parametryzacją Modified Funny-Hills punkty stacjonarne takie jak punkt siodłowy i minimum energii dla danego spinu są nieczułe na niestabilność oktupolową. Natomiast z parametryzacją kształtów optymalnych [Iva13] przy jądrach lekkich o parametrze *fissility* $x < 0.25$ widoczne jest wypłaszczenie energii a nawet minima oktupolowe.



Rysunek 4.27: Statyczne oszacowanie krytycznych przedziałów spinów dla przejść Jacobi'ego (czerwony kolor) i Poincaré'go (zielony kolor) przy założeniu, że rozszczepienie następuje dla bariery $B_f = 0$ MeV (lewy) i $B_f > 3$ MeV (prawy).

Wstępne obliczenia wykonane z modelem LSD i z parametryzacją z harmonikami sferycznymi pozwalają na oszacowanie spinów krytycznych na przejście Jacobi'ego i Poincaré'go tak jak to jest pokazane na Rys. 4.27. Lewy panel Rys. 4.27 pokazuje, dla jakich parametrów *fissility* należy oczekiwać przejść kształtów a maksymalny spin krytyczny na przejście Poincaré'go jest przy znikającej barierze na rozszczepienie, podczas gdy na prawym panelu pokazane są spiny przy barierze większej niż 3 MeV. Jest to statyczne oszacowanie, czyli nie są brane pod uwagę wibracje kwadrupolowe i oktupolowe, które zmienią zakresy spinów dla obu przejść, przez co należy oczekiwać, że w wielu wypadkach będzie pewien zakres spinów gdzie przejścia będą konkurować między sobą. Prace nad tym tematem są kontynuowane.

Podsumowując ten rozdział warto podkreślić, że przejścia Poincaré'ego stanowią nową jakość w fizyce jądrowej, a badania tutaj przedstawione mają na celu sprecyzowanie sposobu ich szacowania teoretycznego a także poszukiwanie najbardziej odpowiednich obserwacji fizycznych do ich weryfikacji, takich jak np.: kształt funkcji nasilenia GDR czy też rozkład fragmentów rozszczepienia jądra złożonego.

Przedstawione tutaj obliczenia dotyczące wibracji oktupolowych, pozwoliły na oszacowanie dynamicznych deformacji oktupolowych, dzięki którym opis procesu zmiany kształtu z wydłużonego na oktupolowy pod wpływem wzrostu częstości rotacji, stał się bardziej realistyczny. Biorąc pod uwagę wibracje kwadrupolowe i oktupolowe można stwierdzić w jakim zakresie wartości momentów pędu, przejścia Jacobie'go i Poincaré'go będą ze sobą konkurować a gdzie będą dominować.

Ponieważ przejście Jacobi'ego (oblate - trójosiowa deformacja - prolate) jest zwykle dla niższych spinów niż Poincaré, to w większości przebadanych dotychczas jąder jest ono widoczne. Natomiast przejście Poincaré'go zaczynając się od kształtu prolate, powinno następować po przejściu Jacobi'ego, ale w wielu jądrach spin krytyczny jest za wysoki i bariera na rozszczepienie znika, co oznacza, że jądro rozszczepia się nim osiągnie żadaną wartość spinu.

Podsumowanie i perspektywy

Podstawowe własności sił jądrowych a mianowicie krótkozasięgowość i własność wysycenia, powodują, że objętości jąder atomowych są bliskie sumie objętości nukleonów wchodzących w skład danego jądra a przy tym gęstość materii jądrowej spada eksponencjalnie przy oddalaniu się od centrum. Z własności tych wynika, że można wprowadzić pojęcie powierzchni jądrowej, pojęcie umowne, gdyż ściśle biorąc, systemy fizyczne opisywane są w mechanice kwantowej jedynie przy pomocy operatorów reprezentujących obserwable, i funkcji falowych – więc w takim formalizmie nie ma w zasadzie miejsca dla klasycznych pojęć takich jak powierzchnia czy równanie powierzchni.

Jednakże, właśnie krótkozasięgowość oddziaływań powoduje, że powierzchnie o których mowa, mogą być używane jako twory pomocnicze do generowania fenomenologicznych potencjałów jądrowych pola średniego, takich jak zdeformowane w ogólności potencjały Woodsa-Saxona czy ‘Yukawa-folded’ – potencjały, które są ogromnie wiarygodne jeśli idzie o przewidywania i interpretacje wyników doświadczalnych. Należy pamiętać, że wyniki teorii pola średniego w fizyce jądrowej posłużyły do uzyskania znaczącej proporcji rezultatów dzięki którym nasza znajomość obiektów jądrowych, znajduje się na obecnym poziomie.

Fakt, że symetrie powierzchni jądrowych implikują symetrie samych hamiltonianów fenomenologicznych, jest kolejnym ułatwieniem w badaniach zagadnienia symetrii. Jest tak dlatego, że grupy punktowe, znakomicie dziś znane, mogą posłużyć bezpośrednio do badania własności symetrii geometrycznych – zarówno powierzchni jądrowych, jak i generowanych przy ich pomocy hamiltonianów teorii pola średniego. W ten właśnie sposób teoria grup punktowych i ich reprezentacji, staje się wprost użyteczna do badania związanych z symetrami elementów struktury jąder atomowych.

Symetrie pola średniego wpływają wprost na rozkład gęstości poziomów jednocząstkowych i związanych z symetrami liczb magicznych, a te ostatnie, dzięki własności znanej w literaturze jako twierdzenie Strutinskiego, przekłada się w prosty sposób na energie wiązania jąder atomowych. Dzięki pomocniczej koncepcji powierzchni jądra (jak wskazano wyżej – elementu niekwantowego w opisie obiektów kwantowych) uzyskujemy niesłychanie potężne w skutkach połączenie narzędzi: teorii grup i teorii pola średniego. Te dwie koncepcje wykorzystałam w niniejszej pracy poświęconej w dużej mierze ilustracji wspomnianych mechanizmów w realistycznych obliczeniach struktury jądra a w szczególności, energii wiązania w funkcji kształtu powierzchni - a więc i deformacji jądrowej.

W pracy przebadalam efekty zarówno ‘tradycyjnych’ deformacji takich jak kwadrupolowa czy oktopolowa, a jednocześnie bardziej egzotycznych symetrii, takich jak tetrahedralna czy oktahedralna dla dużego zakresu jąder parzysto-parzystych ($Z=16-150$). Szczególnie rozbudowana została część pracy, w której badałam efekty łamania symetrii pod wpływem wzrostu momentu pędu (narastanie efektów ‘rotacji’ jąder atomowych) - efekty znane pod nazwą przejść Jacobi’ego i Poincaré’go.

Równoległe z przeprowadzanymi obliczeniami, wykonałam szereg uzupełnień w postaci dokumentacji czy wyprowadzeń (nie zamieszczone tutaj) dot. np. symetryzacji przestrzeni deformacji wykorzystując wiadomości dotyczące grup punktowych. Obliczenia wykonałam dla około 20 zestawów parametrów deformacji i częściowo je pokazałam (patrz referencja [XX]). Posłużyły one do znalezienia i zweryfikowania nowych liczb magicznych: tetrahedralnych i oktahedralnych, a także wysp stabilności, gdzie deformacje tetrahedralne i oktahedralne, są dominujące. Główny cel tej monografii czyli systematyczne badania, pokazały obszary jąder podatne na powstawanie minimów energii odpowiadających w szczególności symetriom egzotycznym oraz konkurencję między tymi minimami a minimami otrzymanymi dla jąder o kształtach wydłużonych czy spłaszczonych. Kolejnym osiągnięciem była realistyczna analiza własności pasm rotacyjnych w izotopach torów i uranów, jako pasm opartych na stanach wzbudzonych, gdzie jądra miały kształt tetrahedralny. Powyższe prace wykonywałam w ramach kolaboracji TETRANUC, we współpracy z grupami w Strasbourgu i w Lublinie.

Ponieważ powierzchnie energii potencjalnych stanowią integralną część Metody Termicznych Fluktuacji Kształtów, więc policzyłam energie makroskopowe LSD w pięciowymiarowej przestrzeni parametrów deformacji i zastosowałam do oszacowania prawdopodobieństwa danego kształtu jądra z wzoru Boltzmana. Pozwoliło to na całkowanie funkcji nasilenia GDR dla każdego z tych kształtów z tymi prawdopodobieństwami, a następnie odtworzenie kształtów funkcji GDR wyekstrahowanych z danych doświadczalnych np. dla jąder ^{46}Ti , ^{132}Ce , ^{147}Eu i innych. Badania wykonałam także dla szeregu jąder parzystoparzystych $Z=16-120$, a w celu szybkiego dostępu do danych teoretycznych utworzyłam stronę internetową (patrz referencja [XX]), gdzie możliwe są obliczenia funkcji GDR i innych wielkości pomocniczych, przy różnych spinach i temperaturach. Przeanalizowałam także wpływ parametrów gęstości jądrowej: stałych i zależnych od deformacji jąder na funkcje nasilenia GDR i ich szerokości dla poszczególnych spinów i kilku temperatur. Co więcej, znajomość poszczególnych deformacji jądra umożliwiła dyskusję współczynników anizotropowych, mówiących o rozkładzie kwantów γ w przestrzeni.

W jądrach gorących i szybko rotujących symetrie geometryczne mogą być łamane, a obserwacja zmiany deformacji jądra między dwoma kształtami osiowosymetrycznymi (oblate-prolate) poprzez deformacje tójosiową, co zostało nazwane przejściem Jacobi'ego, pozwoliła na wysunięcie przypuszczenia, że może następować także łamanie symetrii odbiciowej czyli przejście Poincarégo, gdzie wraz ze wzrostem spinu, jądro z kształtu prolate może stać się oktupolowo zdeformowane.

Tak więc przebadałam szereg jąder w celu znalezienia obszaru jąder podatnych na przejście Poincaré'go i jednocześnie dostępnych w eksperymencie. Wyniki otrzymane dla izotopów baru i kadmu przy założeniu, że badana jest tylko deformacja statyczna, okazały się wystarczająco interesujące, że w modelu LSD, członie energii kongruencji, zasugerowałam nową formę zależności od deformacji jądra. Zaproponowałam więc nową formułę, która pozwoliła na odtworzenie wysokości barier na rozszczepienie dla jąder lekkich, co pozwala wierzyć, że jest to w miarę odpowiednie podejście przy wykonywaniu obliczeń dla innych jąder o $70 < A < 140$.

Dużym sukcesem okazało się także stworzenie hamiltonianu kolektywnego dwuwymiarowego do badania efektów dynamicznych przy przejściu Jacobi'ego oraz jednowymiarowego – dla przejścia Poincaré'go. Obliczyłam dynamiczne deformacje kwadrupolowe osiowe i nieosiowe, a także dynamiczne deformacje oktupolowe, wraz z ich dyspersjami a pierwsze wyniki zostały opublikowane. Pozwoliły one na rozszerzenie obszaru spinów, gdzie pojawia

się przejście Poincarégo w kierunku mniejszych spinów, a także na znalezienie zakresu spinów, gdzie występuje konkurencja między przejściem Jacobi'ego i Poincaré'go.

Jeśli chodzi o dalsze badania dotyczące własności jąder w stanie podstawowym czy też niskoleżących stanach wzbudzonych, to analiza nie jest skończona, ze względu na olbrzymią liczbę zgromadzonych wyników. Dzięki tym wynikom można będzie badać problem współistnienia kształtów, czy też szukać jąder czułych na wibracje γ . Siatki energii całkowitych służą grupie lubelskiej do badania przejść B(E2) w jądrach oktopolowych i tetrahedralnych, a także do znalezienia nowych reguł wyboru takich pasm. Ostatnio liczyłam w tym celu siatki sześciowymiarowe, zawierające wszystkie parametry deformacji oktopolowych a także kwadrupolowych: osiowo i nieosiowo-symetrycznych.

Jeśli chodzi o rozwój metody termicznych fluktuacji kształtu, to należałoby uwzględnić energię wzbudzenia jądra zamiast jego temperatury. Kolejnym krokiem jest rozszerzenie obliczeń dla coraz wyższych temperatur i wprowadzenie wprost minimalizacji energii swobodnej.

Duże nadzieje pokładam w rozwiązywaniu równania Schrödingera z hamiltonianem kolektywnym. Otwiera to drogę do badania wibracji kwadrupolowych i wibracji γ . Można będzie w tym celu użyć map energii całkowitych dla jądra statycznego i szacować np.: energię drgań zerowych, czy też analizować własności pasm rotacyjnych.

Głównym projektem, który jest już dobrze zaawansowany jest badanie warunków koniecznych i wystarczających na udowodnienie istnienia przejścia Poincaré'go. Jest to bardzo trudne ze względu na bardzo wysokie spiny i niskie bariery na rozszczepienie, które są oczekiwane.

Mam nadzieję, że udało mi się pokazać jak ciekawą fizykę kryją symetrie kształtów jądra atomowego oraz ich łamanie. Część z obliczeń przedstawionych tutaj została potwierdzona eksperymentalnie (np. przejścia kształtów Jacobi'ego), a część nadal czeka na weryfikację (np.: kształty tetrahedralne czy też przejścia Poincaré'go). Można mieć nadzieję, że rozwój techniki akceleracji wiązek egzotycznych (jak np.: w SPIRAL2) umożliwi eksperymentalną weryfikację tych interesujących efektów.

Dodatki

A Czynniki geometryczne

A.1 Powierzchnia jądrowa: własności harmonik sferycznych

Zwykle równanie różniczkowe pochodzące z równania Laplace'a ma postać:

$$(1 - z^2) \frac{d^2 w}{dz^2} - 2z \frac{dw}{dz} + [\nu(\nu + 1) - \frac{\mu^2}{1 - z^2}] w = 0, \quad (\text{A.1})$$

gdzie $z = \cos \theta$ i $w = P_{\lambda\mu}(\cos \theta)$ [Abr64]. Zwykle możemy zapisać harmoniki sferyczne w postaci funkcji stowarzyszonych Legendre'a.

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = N_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) \Phi_{\mu}(\phi) \quad (\text{A.2})$$

$$\Phi_{\mu}(\phi) = e^{i\mu\phi} \quad (\text{A.3})$$

$$N_{\lambda\mu} = (-1)^{\mu} \left[\frac{2\lambda + 1}{2} \cdot \frac{(\lambda - \mu)!}{(\lambda + \mu)!} \right]^{1/2} ; \quad \mu > 0 \quad (\text{A.4})$$

$$N_{\lambda\mu} = (-1)^{2\mu} \left[\frac{2\lambda + 1}{2} \cdot \frac{(\lambda - |\mu|)!}{(\lambda + |\mu|)!} \right]^{1/2} ; \quad \mu < 0. \quad (\text{A.5})$$

Wiemy też, że

$$P_{\lambda-|\mu|}(\cos \theta) = (-1)^{\mu} \frac{(\lambda - |\mu|)!}{(\lambda + |\mu|)!} P_{\lambda\mu}(\cos \theta). \quad (\text{A.6})$$

Tak więc składając te informacje otrzymamy

dla $\mu > 0$:

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = (-1)^{\mu} \sqrt{\frac{2\lambda + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\lambda - \mu)!}{(\lambda + \mu)!}} P_{\lambda\mu}(\theta) e^{i\mu\phi}, \quad (\text{A.7})$$

dla $\mu < 0$:

$$\begin{aligned} Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi) &= (-1)^{\mu} \sqrt{\frac{2\lambda + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\lambda - \mu)!}{(\lambda + \mu)!}} P_{\lambda\mu}(\theta) e^{-i\mu\phi} \\ &= (-1)^{\mu} \sqrt{\frac{2\lambda + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\lambda - \mu)!}{(\lambda + \mu)!}} (-1)^{-\mu} \frac{(\lambda + \mu)!}{(\lambda - \mu)!} P_{\lambda, -\mu}(\theta) e^{-i\mu\phi} \\ &= \sqrt{\frac{2\lambda + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\lambda + \mu)!}{(\lambda - \mu)!}} P_{\lambda, -\mu}(\theta) e^{-i\mu\phi} \\ &= (-1)^{\mu} Y_{\lambda, -\mu}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Z powyższych rozważań wynika, że problem liczenia harmonik sferycznych redukuje się do problemu liczenia funkcji Legendre'a, które spełniają związki rekurencyjne:

$$\begin{aligned} (1-x^2)P'_{\lambda\mu}(x) &= -\lambda x P_{\lambda\mu}(x) + (\lambda + \mu)P_{\lambda-1,\mu}(x) \\ \sqrt{1-x^2}P_{\lambda\mu+1}(x) &= (\lambda - \mu)x P_{\lambda\mu}(x) - (\lambda + \mu)P_{\lambda-1,\mu}(x) \\ P_{\lambda 0}(x) &= P_{\lambda}(x) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$P_0(x) = 1; \quad P_1(x) = x, \quad (\text{A.10})$$

gdzie $P'_{\lambda\mu}(x) = \frac{dP_{\lambda\mu}}{dx}$, a $P_{\lambda}(x)$ są to wielomiany Legendre'a, $x = \cos \theta$. Możemy obliczyć funkcje Legendra dla dowolnego $\mu > 0$ mając powyższe związki i wielomiany Legendre'a $P_{\lambda}(x)$. Policzmy teraz pochodne po $x = \cos \theta$ funkcji stowarzyszonych Legendre'a:

$$P'_{\lambda\mu}(x) = \frac{dP_{\lambda\mu}}{dx} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} (1-x^2)P'_{\lambda\mu}(x) &= (1-\cos^2\theta)\frac{dP_{\lambda\mu}}{d(\cos\theta)} = \sin^2\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d(\cos\theta)} \\ &= -\sin\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d(\cos\theta)}\frac{d(\cos\theta)}{d\theta} = -\sin\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d\theta} \\ &= -\lambda\cos\theta P_{\lambda\mu}(\cos\theta) + (\lambda + \mu)P_{\lambda-1,\mu}(\cos\theta). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Zróżniczkujmy to równanie teraz po θ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta}\left(-\sin\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d\theta}\right) &= \frac{d}{d\theta}\left(-\lambda\cos\theta P_{\lambda\mu}(\cos\theta) + (\lambda + \mu)P_{\lambda-1,\mu}(\cos\theta)\right) \quad (\text{A.13}) \\ -\cos\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d\theta} - \sin\theta\frac{d^2P_{\lambda\mu}}{d\theta^2} &= \lambda\sin\theta P_{\lambda\mu}(\cos\theta) - \lambda\cos\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d\theta} + (\lambda + \mu)\frac{d}{d\theta}(P_{\lambda-1,\mu}(\cos\theta)) \\ -\sin\theta\frac{d^2P_{\lambda\mu}}{d\theta^2} &= \cos\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d\theta}(1 - \lambda) + \lambda\sin\theta P_{\lambda\mu}(\cos\theta) \\ &\quad + (\lambda + \mu)\frac{d}{d\theta}(P_{\lambda-1,\mu}(\cos\theta)) \\ \frac{d^2P_{\lambda\mu}}{d\theta^2} &= \frac{1}{-\sin\theta}\left[(1 - \lambda)\cos\theta\frac{dP_{\lambda\mu}}{d\theta} + (\lambda + \mu)\frac{dP_{\lambda-1,\mu}(\cos\theta)}{d\theta} + \lambda\sin\theta P_{\lambda\mu}(\cos\theta)\right]. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Te kilka przekształceń pokazują w jaki sposób należy programować funkcje kuliste, by w szybki i efektywny sposób liczyć deformacje jądra opisaną przez rozwinięcie harmonik sferycznych do dowolnego rzędu.

A.2 Symetrie geometryczne.

Użyte są następujące definicje funkcji harmonik sferycznych:

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = (-1)^\mu \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi} \cdot \frac{(\lambda-\mu)!}{(\lambda+\mu)!}} P_{\lambda\mu}(\theta) e^{i\mu\phi} \quad (\text{A.15})$$

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \sim P_{\lambda\mu}(\theta) e^{i\mu\phi} = P_{\lambda\mu}(\theta) (\cos \mu\phi + i \sin \mu\phi) \quad (\text{A.16})$$

$$\operatorname{Re}(Y_{\lambda\mu}) = P_{\lambda\mu}(\theta) \cos \mu\phi \quad ; \quad \operatorname{Im}(Y_{\lambda\mu}) = P_{\lambda\mu}(\theta) \sin \mu\phi. \quad (\text{A.17})$$

- **Warunek I. Symetria względem płaszczyzny XOZ**

Warunek symetrii względem płaszczyzny XOZ to $\mathcal{R}(\theta, \phi) = \mathcal{R}(\theta, -\phi)$ co oznacza, że $\alpha_{\lambda\mu}$ odpowiadająca członom proporcjonalnym do $\sin \mu\phi$ musi znikać czyli $\operatorname{Im}(\alpha_{\lambda\mu}) = 0$. Wynika to z faktu, że funkcja $\sin \mu\phi$ jest nieparzysta i zmienia znak członów proporcjonalnych do niej. W ten sposób otrzymamy tylko część rzeczywistą w równaniu:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_\Sigma(\theta, \phi) = \mathcal{R}_0 c(\beta) [1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} (\alpha_{\lambda 0} Y_{\lambda 0}(\theta, \phi)) + 2 \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=1}^{\lambda} \operatorname{Re}(\alpha_{\lambda\mu}) \operatorname{Re}(Y_{\lambda\mu}) \\ + 2 \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=1}^{\lambda} \operatorname{Im}(\alpha_{\lambda\mu}) \operatorname{Im}(Y_{\lambda\mu})] \quad (\text{A.18}) \end{aligned}$$

- **Warunek II. Symetria względem płaszczyzny YOZ**

Warunek symetrii względem płaszczyzny YOZ to $\mathcal{R}(\theta, \frac{\pi}{2} - \bar{\phi}) = \mathcal{R}(\theta, \frac{\pi}{2} + \bar{\phi})$

Zakładając, że $\bar{\phi} \sim 0$ mamy

- dla $\cos \mu(\frac{\pi}{2} \pm \bar{\phi}) \rightarrow$
 - * $\cos \frac{\pi}{2} \mu = 0$ gdy $\mu = 1, 3, 5, \dots$
 - * $\cos \frac{\pi}{2} \mu = \pm 1$ gdy $\mu = 0, 2, 4, \dots$
- dla $\sin \mu(\frac{\pi}{2} \pm \bar{\phi}) \rightarrow$
 - * $\sin \frac{\pi}{2} \mu = 0$ gdy $\mu = 0, 2, 4, \dots$
 - * $\sin \frac{\pi}{2} \mu = \pm 1$ gdy $\mu = 1, 3, 5, \dots$

co powoduje, że

- $\operatorname{Re}(\alpha_{\lambda\mu}) = 0$ dla $\mu = 1, 3, 5, \dots$
- $\operatorname{Im}(\alpha_{\lambda\mu}) = 0$ dla $\mu = 0, 2, 4, \dots$

- **Warunek III. Symetria względem płaszczyzny X0Y**

Warunek symetrii względem płaszczyzny X0Y to $\mathcal{R}(\frac{\pi}{2} - \bar{\theta}, \phi) = \mathcal{R}(\frac{\pi}{2} + \bar{\theta}, \phi)$ czyli $\alpha_{\lambda\mu} = 0$ dla wszystkich nieparzystych λ .

Wnioski

Nasza parametryzacja dopuszcza opis dowolnych kształtów; poszczególne symetrie charakteryzujące się obecnością jednej z trzech płaszczyzn dyskusyjnych powyżej uzyskamy spełniając warunki podane powyżej a ponadto:

- dla deformacji typu oktopolowego λ nieparzyste są w ogólności niezerowe;
- kształty z jedną płaszczyzną symetrii wymagają aż do $(2\lambda + 1)$ niezależnych rzeczywistych parametrów deformacji;
- kształty bez płaszczyzn symetrii wymagają w ogólności aż do $2(2\lambda + 1)$ rzeczywistych parametrów deformacji.

B Zasady całkowania Gaussa

Istnieje klasa funkcji $\{f(x)\}$ dobrze zdefiniowana i dająca się całkować w przedziale $[a, b]$ z wagami $w(x) \geq 0$. Możemy więc rozwinąć te funkcje w szereg postaci:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n P_n(x); \quad P_n(x) \in \mathcal{B}, \quad (\text{B.19})$$

gdzie \mathcal{B} oznacza bazę stowarzyszoną.

Zauważmy, że dla danego wielomianu $P_n(x)$ dowolny wielomian $Q_l(x)$ dla $x \in [a, b]$, $l \leq n$ zawsze można zapisać $Q_l(x) = \sum_{i=0}^l b_i P_i(x)$. Całkowanie daje:

$$\int_a^b w(x) Q_l(x) P_n(x) dx = \sum_{i=0}^l b_i \underbrace{\int_a^b w(x) P_i(x) P_n(x) dx}_{\delta_{in} \text{ dla } i \leq n} = 0, \quad (\text{B.20})$$

a stąd można wnioskować, że wszystkie wielomiany $Q_l(x)$ rzędu $l \leq n$ są ortogonalne do $P_n(x)$ w przedziale $[a, b]$ z wagami $w(x)$.

Załóżmy, że wielomian $P_{n+1}(x)$ poza przedziałem $[a, b]$ dąży do nieskończoności. Jest on ortogonalny do wszystkich wielomianów $Q_l(x)$ rzędu $l \leq n$, które są opisane w tym przedziale. Tak więc wielomian $P_{n+1}(x)$ ma dokładnie $(n + 1)$ pierwiastków rzeczywistych, należących do tego przedziału.

Dowód:

Przypuśćmy, że ostatnie stwierdzenie jest nieprawdziwe. To oznacza, że istnieje $m \leq n$ wartości $x = t_1, t_2 \dots t_m$ takich, że $P_{n+1}(t_i) = 0$ dla $i = 1, 2, 3 \dots m$. Znając miejsca zerowe danego wielomianu można go przedstawić w postaci:

$$s_m(x) = \pm(x - t_1)(x - t_2)(x - t_3) \dots (x - t_m). \quad (\text{B.21})$$

Jeśli teraz założymy, że znak wielomianu s_m to znak wielomianu $P_{n+1}(x)$ to $s_m(x)P_{n+1}(x) \geq 0$, co daje:

$$\int_a^b w(x) s_m(x) P_{n+1}(x) dx \geq 0. \quad (\text{B.22})$$

To jest nie możliwe dopóki $m \leq n + 1$ i w konsekwencji $s_m(x)$ musi być ortogonalne do $P_{n+1}(x)$.

Stąd wynika, że $P_{n+1}(x)$ musi mieć dokładnie $n + 1$ zmian znaku czyli miejsc zerowych. Wszystkie te miejsca zerowe powinny być rzeczywiste ponieważ odpowiadają zmianie znaku. Ponieważ wszystkie zmiany znaku są w przedziale $[a, b]$ to pierwiastki też powinny być w tym przedziale.

Ogólna idea Gaussa zakłada możliwość przybliżenia całek przez wielomiany:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i). \quad (\text{B.23})$$

Współczynniki $\{x_i, i = 0, 1, \dots, n\}$ są nazywane zerami lub więzami wzoru Gaussa, a $\{w_i, i = 0, 1, \dots, n\}$ to są wagi. Gauss znalazł sposób na optymalne dobranie tych współczynników. Ponieważ funkcja $f(x)$ może być w ogólności bardzo skomplikowana więc nie ma możliwości rozwiązania jej analitycznie i dlatego Gauss zaproponował przybliżyć ją wielomianami a następnie zoptymalizować.

W fizyce matematycznej bardzo często potrzebujemy specjalnej klasy wielomianów, które są wzajemnie ortogonalne (ortonormalne) w danym przedziale $[a, b]$, ten przedział może być skończony lub nieskończony.

Wielomiany należące do pewnego zbioru $\{p_n(x), n = 0, 1, \dots, \infty\}$ są ortogonalne jeśli:

$$\int_a^b p_n(x)p_{n'}(x)dx \neq 0 \text{ dla } n \neq n'. \quad (\text{B.24})$$

Uogólniona postać tego warunku wymaga istnienia specjalnej funkcji pomocniczej $w(x) \geq 0$ zwanej funkcją wagową. Wtedy warunek uogólniony ma postać:

$$\int_a^b w(x)p_n(x)p_{n'}(x)dx \neq 0 \text{ dla } n \neq n'. \quad (\text{B.25})$$

Warunek unormowania zapiszemy jako:

$$\int_a^b w(x)|p_n(x)|dx \neq \mathcal{N}_n \quad (\text{B.26})$$

a stąd

$$P_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_n}}p_n(x) \quad (\text{B.27})$$

Spełniony jest warunek:

$$\int_a^b w(x)P_n(x)P_{n'}(x)dx = \delta_{n'n}, \quad (\text{B.28})$$

co oznacza, że wielomiany są ortonormalne w przedziale $[a, b]$ z odpowiednimi funkcjami wagowymi $w(x)$.

Wielomiany ważne w fizyce matematycznej spełniają równanie różniczkowe w postaci:

$$g_2(x)p_n''(x) + g_1(x)p_n'(x) + a_n p_n(x) = 0, \quad (\text{B.29})$$

gdzie z definicji $g_1(x)$ jest liniową, a $g_2(x)$ - kwadratową funkcją x niezależną od n podczas gdy a_n są stałymi zależnymi tylko od n czyli rzędu wielomianu.

1. Wielomiany Legendra możemy otrzymać po przez położenie:

$$g_1(x) = -2x, \quad g_2(x) = 1 - x^2, \quad a_n = n(n + 1) \quad (\text{B.30})$$

i w ten sposób otrzymamy równanie różniczkowe drugiego rodzaju w postaci:

$$(1 - x^2) \frac{d^2 P(x)}{dx^2} - 2x \frac{dP(x)}{dx} + n(n+1)P(x) = 0. \quad (\text{B.31})$$

Rozwiązania $P(x) \rightarrow p_n(x)$ nazwane są wielomianami Legendra i ich miejsca zerowe leżą w przedziale $[-1,1]$ i można udowodnić, że

$$\int_{-1}^1 p_n(x)p_{n'}(x)dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{n'n} \quad (\text{B.32})$$

2. Wielomiany Laguerre dostajemy przy założeniu:

$$g_1(x) = \alpha + 1 - x, \quad g_2(x) = x, \quad a_n = n \quad (\text{B.33})$$

i mamy wtedy równanie postaci:

$$x \frac{d^2 L(x)}{dx^2} + (\alpha + 1 - x) \frac{dL(x)}{dx} + nL(x) = 0. \quad (\text{B.34})$$

Rozwiązania zwane wielomianami Laguerre $L(x) \rightarrow L_n^\alpha(x)$ a wszystkie ich miejsca zerowe leżą w przedziale $[0, \infty]$. Są one ortogonalne z wagami $w(x) = e^{-x}x^\alpha$ i można pokazać, że

$$\int_0^\infty L_n^\alpha(x)L_{n'}^\alpha(x)dx = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1n!)}{\alpha + n + 1} \delta_{n'n}. \quad (\text{B.35})$$

Symbol $\Gamma(y)$ oznacza funkcje Γ -Eulera.

3. Wielomiany Hermite'a otrzymamy przy założeniu:

$$g_1(x) = -2x, \quad g_2(x) = 1, \quad a_n = 2n \quad (\text{B.36})$$

i dostajemy równanie różniczkowe drugiego stopnia

$$\frac{d^2 H(x)}{dx^2} - 2x \frac{dH(x)}{dx} + 2nH(x) = 0. \quad (\text{B.37})$$

Rozwiązania są nazywane wielomianami Hermite'a $H(x) \rightarrow H_n(x)$ a ich miejsca zerowe są na osi rzeczywistej w przedziale $[-\infty, \infty]$. Są ortogonalne z funkcją wagową $w(x) = e^{-x^2}$. Te wielomiany spełniają związek:

$$\int_{-\infty}^\infty H_n(x)H_{n'}(x)(x)dx = \sqrt{\pi}2^n n! \delta_{n'n}. \quad (\text{B.38})$$

Należy teraz formułować zasadę optymalizacji $(2n+1)$ wag w_i i $(2n+1)$ więzów x_i .

Załóżmy wielomian $P_{n+1}(x)$ ze wszystkimi więzami w przedziale $[a,b]$ i wszystkimi możliwymi wielomianami $p_l(x)$ dla $l \leq n$ w przedziale $[a,b]$. Przyjmując, że x_i to wszystkie $(n+1)$ miejsca zerowe wielomianu $P_{n+1}(x)$ i mając wzór:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (\text{B.39})$$

możemy zawsze wybrać współczynniki wagowe tak, żeby pierwsze n - wielomianów np.: $p_l(x)$ było liczonych dokładnie. Można też pokazać, że ten warunek będzie dokładny aż do rzędu $(2n + 1)$.

Formuła gaussowska jest numerycznie stabilna, to znaczy: $w_i \geq 0$ dla wszystkich i , a co więcej dla każdej funkcji $f(x)$ całkownej w przedziale $[a, b]$ mamy:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n f(x_i) = \int a^b w(x) f(x) dx, \quad (\text{B.40})$$

czyli błąd całkowania może być całkiem mały jeśli wybierzemy rząd funkcji gaussowskiej n , wystarczająco duży. W tym momencie funkcje falowe oscylatora, które tworzą naszą bazę zależą tylko od geometrii jądra i nie ma w nich żadnych jawnych związków ze spinem cząstek czy też pędem. Załóżmy, że $\{\phi_n(x) : n = 1, 2, 3, \dots \infty\}$ to zbiór wielomianów ortogonalnych dla $x \in [a, b]$ z funkcjami wagowymi $w(x) \geq 0$

$$\int a^b w(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx = 0 \quad (\text{B.41})$$

dla $i \neq j$. Przypuśćmy, że wszystkie wielomiany mają węzły w przedziale $[a, b]$ i wprowadźmy czynnik k_n następująco:

$$p_n(x) = x^n + c_{n-1}x^{n-1} + \dots \quad \leftrightarrow \quad \phi_n(x) = k_n p_n(x). \quad (\text{B.42})$$

Zdefiniujmy także wielkości:

$$b_n = \frac{k_{n+1}}{k_n} \quad ; \quad \mathcal{N}_n = \int a^b w(x) \phi_n^2(x) dx. \quad (\text{B.43})$$

Ustalmy teraz $N = n_0$ i przedyskutujmy wzór całkowy Gaussa rzędu N . Wybierzmy węzły x_1, x_2, \dots, x_N jako miejsca zerowe wielomianu $\phi_N(x)$.

Możemy pokazać, że czynniki wagowe odpowiadające wzorowi całkowemu Gaussa są dane jako:

$$w_i = -\frac{k_{N+1}}{k_N} \cdot \frac{\mathcal{N}_{N+1}}{\phi_{N+1}(x_i) \phi'_N(x_i)}. \quad (\text{B.44})$$

Stąd wynika, że

$$\int a^b w(x) f(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + E_f, \quad (\text{B.45})$$

gdzie E_f to przewidywany błąd:

$$E_f = -\frac{\mathcal{N}_N}{k_N} \cdot \frac{1}{(2n)!} \cdot f^{2n}(\eta), \quad (\text{B.46})$$

natomiast $\eta \in [a, b]$.

Współczynnik liczbowy przed pochodną $f(x)$ jest odwrotnie proporcjonalny do bardzo szybko rosnącego czynnika $(2n!)$. Dla $n = 5$ mamy $10! = 3\,628\,800$. Tak więc dla regularnych funkcji, których wysoko-rzędowe pochodne nie rosną szybko, metoda Gaussa jest doskonała.

C Bazy - definicje

Weźmy bazę kartezjańską:

$$|b\rangle = i^{n_y} |n_x n_y n_z; s_z\rangle \quad s_z = +\frac{1}{2} \quad (\text{C.47})$$

$$\begin{aligned} |\bar{b}\rangle &= \hat{\mathcal{T}}|b\rangle = (-1)^{s+s_z} |n_x n_y n_z; -s_z\rangle \\ &= -i^{-n_y} |n_x n_y n_z; -s_z\rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.48})$$

a także interesuje nas baza sferyczna $|nljm\rangle$. Zdefiniujmy nową bazę, która jest dobrą bazą dla operatora simplexu, którym jest złożenie obrotu wokół osi OY o 180° z odbiciem w środku układu odniesienia (parzystość) $\hat{\Pi}$ czyli $\hat{S}_y = \hat{R}_y(\pi)\hat{\Pi}$:

$$|t_+; n_x n_y n_z\rangle = a_{n_x n_y n_z}^{(+)} |n_x n_y n_z; s_z = +\frac{1}{2}\rangle + b_{n_x n_y n_z}^{(+)} |n_x n_y n_z; s_z = -\frac{1}{2}\rangle; \quad (\text{C.49})$$

$$|t_-; n_x n_y n_z\rangle = a_{n_x n_y n_z}^{(-)} |n_x n_y n_z; s_z = +\frac{1}{2}\rangle + b_{n_x n_y n_z}^{(-)} |n_x n_y n_z; s_z = -\frac{1}{2}\rangle. \quad (\text{C.50})$$

Inaczej można zapisać:

$$|t_+; n_x n_y n_z\rangle = a_{n_x n_y n_z}^{(+)} |b\rangle + b_{n_x n_y n_z}^{(+)} |\bar{b}\rangle; \quad (\text{C.51})$$

$$|t_-; n_x n_y n_z\rangle = a_{n_x n_y n_z}^{(-)} |b\rangle + b_{n_x n_y n_z}^{(-)} |\bar{b}\rangle. \quad (\text{C.52})$$

Zakładamy więc następującą konwencję faz:

$$\begin{aligned} a_{n_x n_y n_z}^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \quad ; \quad b_{n_x n_y n_z}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \\ a_{n_x n_y n_z}^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y} \quad ; \quad b_{n_x n_y n_z}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} i^{1-n_y}. \end{aligned} \quad (\text{C.53})$$

C.1 Baza 'r' —> baza sferyczna

Baza $|ljm; r\rangle$ jest dobrą bazą dla operatora obrotu \hat{R}_y , czyli operatora sygnatury.

$$|r_+; nljm\rangle = \alpha_{nljm}^{(+)} |nljm\rangle + \beta_{nljm}^{(+)} |nlj - m\rangle \quad (\text{C.54})$$

$$|r_-; nljm\rangle = \alpha_{nljm}^{(-)} |nljm\rangle + \beta_{nljm}^{(-)} |nlj - m\rangle, \quad (\text{C.55})$$

gdzie: j jest połówkowe więc $m = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, j$, oraz:

$$|r_+; nljm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|ljm\rangle + i(-1)^{m+j} |lj - m\rangle] \quad (\text{C.56})$$

$$|r_-; nljm\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} [i |ljm\rangle + (-1)^{m+j} |lj - m\rangle]. \quad (\text{C.57})$$

Stąd mamy współczynniki fazowe:

$$\begin{aligned} \alpha_{nljm}^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \beta_{nljm}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} i (-1)^{m+j} \\ \alpha_{nljm}^{(-)} &= \frac{-1}{\sqrt{2}} i \quad ; \quad \beta_{nljm}^{(-)} = \frac{-1}{\sqrt{2}} (-1)^{m+j}. \end{aligned} \quad (\text{C.58})$$

Jeśli przyjmiemy, że $\kappa, \kappa' = \pm$ to możemy zapisać elementy macierzowe w bazie 'r':

$$\begin{aligned}
\langle r_{\kappa'}; n'l'j'm' | g(s, \Omega) | r_{\kappa}; nljm \rangle &= \{ \alpha_{n'l'j'm'}^{(\kappa')\star} \langle n'l'j'm' | + \beta_{n'l'j'm'}^{(\kappa')\star} \langle n'l'j' - m' | \} \\
&g(s, \Omega) \\
&\{ \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} |nljm\rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} |nlj - m\rangle \} \\
&= \alpha_{n'l'j'm'}^{(\kappa')\star} \alpha_{nljm}^{(\kappa)} \langle n'l'j'm' | g(s, \Omega) |nljm\rangle \\
&+ \alpha_{n'l'j'm'}^{(\kappa')\star} \beta_{nljm}^{(\kappa)} \langle n'l'j'm' | g(s, \Omega) |nlj - m\rangle \\
&+ \beta_{n'l'j'm'}^{(\kappa')\star} \alpha_{nljm}^{(\kappa)} \langle n'l'j' - m' | g(s, \Omega) |nljm\rangle \\
&+ \beta_{n'l'j'm'}^{(\kappa')\star} \beta_{nljm}^{(\kappa)} \langle n'l'j' - m' | g(s, \Omega) |nlj - m\rangle \\
&= \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{j'j} \{ \alpha_{nljm'}^{(\kappa')\star} \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nljm' | g(s, \Omega) |nljm\rangle \\
&+ \alpha_{nljm'}^{(\kappa')\star} \beta_{nljm}^{(\kappa)} \langle nljm' | g(s, \Omega) |nlj - m\rangle \\
&+ \beta_{nljm'}^{(\kappa')\star} \alpha_{nljm}^{(\kappa)} \langle nlj - m' | g(s, \Omega) |nljm\rangle \\
&+ \beta_{nljm'}^{(\kappa')\star} \beta_{nljm}^{(\kappa)} \langle nlj - m' | g(s, \Omega) |nlj - m\rangle \} \\
&= \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{j'j} (-1)^{l(1-s)/2} \{ \alpha_{nljm'}^{(\kappa')\star} \alpha_{nljm}^{(\kappa)} D_{m'm}^j \\
&+ \alpha_{nljm'}^{(\kappa')\star} \beta_{nljm}^{(\kappa)} D_{m'-m}^j \\
&+ \beta_{nljm'}^{(\kappa')\star} \alpha_{nljm}^{(\kappa)} D_{-m'm}^j \\
&+ \beta_{nljm'}^{(\kappa')\star} \beta_{nljm}^{(\kappa)} D_{-m'-m}^j \}. \tag{C.59}
\end{aligned}$$

C.2 Przejście pomiędzy bazami 't' —> 'r'

Funkcję falową możemy zapisać w postaci:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z} \tilde{c}_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z} |t_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z}\rangle = \sum_{\kappa; nljm} c_{\kappa; nljm} |r_{\kappa; nljm}\rangle, \tag{C.60}$$

gdzie: $\kappa, \tilde{\kappa} = \pm$.

Po diagonalizacji macierzy hamiltonianu otrzymujemy współczynniki $\tilde{c}_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z}$ a potrzebujemy $c_{\kappa; nljm}$. Zaczniemy od:

$$\begin{aligned}
\langle r_{\kappa; nljm} | \sum_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z} \tilde{c}_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z} |t_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z}\rangle &= \sum_{\kappa'; n'l'j'm'} c_{\kappa'; n'l'j'm'} \langle r_{\kappa; nljm} || r_{\kappa'; n'l'j'm'} \rangle \\
&= \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{j'j} \delta_{m'm} c_{\kappa; nljm}, \tag{C.61}
\end{aligned}$$

a stąd mamy:

$$c_{\kappa; nljm} = \sum_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z} \tilde{c}_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z} \langle r_{\kappa; nljm} | t_{\tilde{\kappa}; n_x n_y n_z} \rangle. \tag{C.62}$$

Potrzebny jest iloczyn skalarny:

$$\begin{aligned}
\langle r_{\kappa;nljm} | t_{\tilde{\kappa};n_x n_y n_z} \rangle &= \{ \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nljm | + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nlj - m | \} \\
&\{ a_{n_x n_y n_z}^{(\tilde{\kappa})} | n_x n_y n_z; s_z = +\frac{1}{2} \rangle + b_{n_x n_y n_z}^{(\tilde{\kappa})} | n_x n_y n_z; s_z = -\frac{1}{2} \rangle \} \\
&= \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} a_{n_x n_y n_z}^{(\tilde{\kappa})} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} b_{n_x n_y n_z}^{(\tilde{\kappa})} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} a_{n_x n_y n_z}^{(\tilde{\kappa})} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} b_{n_x n_y n_z}^{(\tilde{\kappa})} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle. \tag{C.63}
\end{aligned}$$

Na przykład dla $\tilde{\kappa} = +$ i $\kappa = +$ można dokonać następujących przeliczeń:

$$\begin{aligned}
\langle r_{+;nljm} | t_{+;n_x n_y n_z} \rangle &= \alpha_{nljm}^{(+)\star} a_{n_x n_y n_z}^{(+)} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \alpha_{nljm}^{(+)\star} b_{n_x n_y n_z}^{(+)} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \beta_{nljm}^{(+)\star} a_{n_x n_y n_z}^{(+)} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \beta_{nljm}^{(+)\star} b_{n_x n_y n_z}^{(+)} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2}} (-i) (-1)^{m+j} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2}} (-i) (-1)^{m+j} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&= \frac{1}{2} i^{n_y+1} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \frac{1}{2} i^{-n_y} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} i^{n_y} (-1)^{m+j} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} i^{-n_y-1} (-1)^{m+j} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&= \frac{1}{2} (i^{n_y+1} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + i^{-n_y} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&+ i^{n_y} (-1)^{m+j} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\
&+ i^{-n_y-1} (-1)^{m+j} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle) \tag{C.64}
\end{aligned}$$

Wstawiając powyższe równanie do wzoru C.62 otrzymamy:

$$c_{\kappa;nljm} = \sum_{n_x n_y n_z} \tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} \langle r_{\kappa;nljm} | t_{+;n_x n_y n_z} \rangle + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} \langle r_{\kappa;nljm} | t_{-;n_x n_y n_z} \rangle. \tag{C.65}$$

Policzmy teraz elementy macierzowe:

$$\begin{aligned}
\langle r_{\kappa;nljm} | t_{+;n_x n_y n_z} \rangle &= \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\
&+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle, \tag{C.66}
\end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned} \langle r_{\kappa;nljm}|t_{-;n_x n_y n_z} \rangle &= \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{1-n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{1-n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle. \end{aligned} \quad (C.67)$$

Powyższa dyskusja pozwala na wyliczenie współczynników funkcji falowych z odpowiednimi fazami, używanymi między innymi do liczenia funkcji yn (wz. 1.181).

$$\begin{aligned} c_{\kappa;nljm} &= \sum_{n_x n_y n_z} (\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} \langle r_{\kappa;nljm}|t_{+;n_x n_y n_z} \rangle + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} \langle r_{\kappa;nljm}|t_{-;n_x n_y n_z} \rangle) \\ &= \sum_{n_x n_y n_z} [\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} (\alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nljm|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle) \\ &+ \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} (\alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{1-n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{1-n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle)] \\ &= \sum_{n_x n_y n_z} [(\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nljm|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{1-n_y} \langle nljm|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y+1} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{1-n_y} \langle nlj - m|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n_x n_y n_z} [\alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} i^{n_y} (\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} i + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z}) \langle nljm|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} i^{-n_y} (\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} i) \langle nljm|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} i^{n_y} (\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} i + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z}) \langle nlj - m|n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle \\ &+ \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} i^{-n_y} (\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z} i) \langle nlj - m|n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle] \end{aligned}$$

Kontynuując mamy:

$$\begin{aligned}
c_{\kappa;nljm} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n_x n_y n_z} [i^{n_y} (i\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z}) \\
&\quad (\alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle) \\
&\quad + i^{-n_y} (\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} + i\tilde{c}_{-;n_x n_y n_z}) \\
&\quad (\alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle)] \\
&= \frac{i^{n_y}}{\sqrt{2}} \sum_{n_x n_y n_z} [(i\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} + \tilde{c}_{-;n_x n_y n_z}) \\
&\quad (\alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nljm | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; +\frac{1}{2} \rangle) \\
&\quad + (-1)^{n_y} (\tilde{c}_{+;n_x n_y n_z} + i\tilde{c}_{-;n_x n_y n_z}) \\
&\quad (\alpha_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nljm | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle + \beta_{nljm}^{(\kappa)\star} \langle nlj - m | n_x n_y n_z; -\frac{1}{2} \rangle)] \quad (C.68)
\end{aligned}$$

D Symetrie przestrzenne

D.1 Odbicie w płaszczyźnie

Zdefiniujmy operatory odbicia:

- odbicie w płaszczyźnie Π_{yz} : $\mathcal{R}_x = R_x(\pi)\hat{\Pi}$
- odbicie w płaszczyźnie Π_{xz} : $\mathcal{R}_y = R_y(\pi)\hat{\Pi}$
- odbicie w płaszczyźnie Π_{xy} : $\mathcal{R}_z = R_z(\pi)\hat{\Pi}$

gdzie: $R_x(\pi) = e^{-i\pi\hat{j}_x}$, $R_y(\pi) = e^{-i\pi\hat{j}_y}$ i $R_z(\pi) = e^{-i\pi\hat{j}_z}$ a $\hat{\Pi}$ to operator parzystości. Większość operacji jest bardzo podobna dla tych trzech operatorów. Zaczniemy od \mathcal{R}_y .

$$R_y(\pi) = e^{-i\pi\hat{j}_y} = e^{-i\pi\hat{l}_y + \hat{s}_y} = e^{-i\pi\hat{l}_y} e^{-i\pi\hat{s}_y}, \quad (D.69)$$

gdzie

$$e^{-i\pi\hat{s}_y} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{\sigma}_y} = \mathbb{I} \cos \frac{\pi}{2} - i\hat{\sigma}_y \sin \frac{\pi}{2} = -i\hat{\sigma}_y, \quad (D.70)$$

stąd mamy:

$$\mathcal{R}_y = -i\hat{\sigma}_y e^{-i\pi\hat{l}_y} \hat{\Pi} \quad (D.71)$$

i podobnie dla pozostałych operatorów:

$$\mathcal{R}_x = -i\hat{\sigma}_x e^{-i\pi\hat{l}_x} \hat{\Pi}; \quad (D.72)$$

$$\mathcal{R}_z = -i\hat{\sigma}_z e^{-i\pi\hat{l}_z} \hat{\Pi}. \quad (D.73)$$

Patrząc teraz na operację odwrócenia w czasie mamy:

$$\hat{\mathcal{T}} = i\sigma_y \hat{K} \quad ; \quad \mathcal{R}_y = -i\hat{\sigma}_y e^{-i\pi\hat{l}_y} \hat{\Pi}, \quad (\text{D.74})$$

a także:

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{l}_y\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{l}_y \quad ; \quad \hat{\mathcal{T}}\hat{\Pi}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\Pi}. \quad (\text{D.75})$$

Dlatego też

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{T}}\mathcal{R}_y\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= (i\sigma_y \hat{K})[-i\hat{\sigma}_y e^{-i\pi\hat{l}_y} \hat{\Pi}](i\sigma_y \hat{K}) \\ &= (i\sigma_y)(-i\sigma_y)(-i\sigma_y)e^{-i\pi\hat{l}_y} \hat{\Pi}\hat{K}^2 = (-i\sigma_y)e^{-i\pi\hat{l}_y} \hat{\Pi} = \mathcal{R}_y, \end{aligned} \quad (\text{D.76})$$

bo $(i\sigma_y)(-i\sigma_y) = -i^2\sigma_y^2 = \mathbb{I}$, $\hat{K}^2 = \mathbb{I}$. Ostatecznie operacja odwrócenia czasu nie zmienia operatora \mathcal{R}_y :

$$\hat{\mathcal{T}}\mathcal{R}_y\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \mathcal{R}_y. \quad (\text{D.77})$$

Operator odbicia \mathcal{R}_y komutuje z operatorem odwrócenia w czasie $\hat{\mathcal{T}}$:

$$[\hat{\mathcal{T}}, \mathcal{R}_y] = 0. \quad (\text{D.78})$$

Operator odbicia w płaszczyźnie może wpływać na bazę, w której pracujemy. Przypomnijmy bazę rzeczywistą:

$$|n\rangle = |n_x, n_y, n_z; s_z\rangle \quad (\text{D.79})$$

i załóżmy, że wybieramy fazę (wz. C.47:

$$|b\rangle = i^{n_y} |n_x, n_y, n_z; s_z\rangle \quad (\text{D.80})$$

Mamy teraz:

$$\hat{\mathcal{T}}|n\rangle = (-1)^{s+s_z} |n_x, n_y, n_z; -s_z\rangle \quad (\text{D.81})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_y|n\rangle &= (-i\sigma_y)e^{-i\pi\hat{l}_y}\hat{\Pi}|n\rangle = (-1)^{n_x+n_z}(-1)^{n_x+n_y+n_z}(-i\sigma_y)|n\rangle \\ &= (-1)^{n_y}(-i\sigma_y)|n\rangle \end{aligned} \quad (\text{D.82})$$

Sprawdźmy:

$$\begin{aligned} \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; \\ i\sigma_y|s_z\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -| -s_z\rangle \\ i\sigma_y| -s_z\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |s_z\rangle \end{aligned}$$

Możemy też znaleźć

$$(i\sigma_y)|s_z\rangle = (-1)^{s+s_z} | -s_z\rangle; \quad (\text{D.83})$$

$$(-i\sigma_y)|s_z\rangle = (-1)^{s-s_z} |s_z\rangle \quad (\text{D.84})$$

i w konsekwencji:

$$(-i\sigma_y)|n_x, n_y, n_z; s_z\rangle = (-1)^{s-s_z}|n_x, n_y, n_z; -s_z\rangle \quad (\text{D.85})$$

oraz

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_y|n_x, n_y, n_z; s_z\rangle &= (-1)^{n_y}(-1)^{s-s_z}|n_x, n_y, n_z; -s_z\rangle \\ &= (-1)^{n_y}(-1)^{s-s_z}(-1)^{s+s_z}[(-1)^{s+s_z}|n_x, n_y, n_z; -s_z\rangle] \\ &= -(-1)^{n_y}|\bar{n}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.86})$$

Stąd otrzymujemy:

$$\mathcal{R}_y|n_x, n_y, n_z; s_z\rangle = (-1)^{n_y+1}|\bar{n}\rangle, \quad (\text{D.87})$$

oraz:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_y^2 &= (-i\sigma_y)e^{-i\pi\hat{l}_y}\hat{\Pi}(-i\sigma_y)e^{-i\pi\hat{l}_y}\hat{\Pi} = i^2\sigma_y^2\hat{\Pi}^2(e^{-i\pi\hat{l}_y})^2 = -\mathbb{I} \\ \mathcal{R}_y^2 &= -\mathbb{I}, \end{aligned} \quad (\text{D.88})$$

a także:

$$\mathcal{R}_y^2|n\rangle = (-1)^{n_y+1}\mathcal{R}_y|\bar{n}\rangle = (-1)^{n_y}|n\rangle. \quad (\text{D.89})$$

Weźmy teraz bazę postaci (wz. C.47) oraz

$$\hat{\mathcal{T}}|b\rangle = \hat{\mathcal{T}}i^{n_y}|n_x, n_y, n_z; s_z\rangle = i^{-n_y}(-1)^{s+s_z}|n_x, n_y, n_z; -s_z\rangle = |\bar{b}\rangle \quad (\text{D.90})$$

$$\mathcal{R}_y|b\rangle = -(-1)^{n_y}i^{n_y}|\bar{n}\rangle = -(-1)^{n_y}i^{n_y}i^{n_y}i^{-n_y}|\bar{n}\rangle = -(-1)^{n_y}i^{2n_y}|\bar{b}\rangle = -|\bar{b}\rangle \quad (\text{D.91})$$

$$\mathcal{R}_y^2|b\rangle = -\mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle \quad (\text{D.92})$$

stąd

$$\mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = |b\rangle. \quad (\text{D.93})$$

Udowodniliśmy, że:

$$\mathcal{R}_y|b\rangle = -|\bar{b}\rangle \quad \mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = |b\rangle \quad (\text{D.94})$$

i teraz łącząc te związki z funkcjami własnymi operatora odwrócenia w czasie: dostajemy:

$$\mathcal{R}_y|t_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|\bar{b}\rangle + i|b\rangle) = i\frac{1}{\sqrt{2}}(|b\rangle + i|\bar{b}\rangle) = i|t_+\rangle; \quad (\text{D.95})$$

$$\mathcal{R}_y|t_-\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(-i|\bar{b}\rangle + |b\rangle) = -i\frac{1}{\sqrt{2}}(-|\bar{b}\rangle - i|b\rangle) = -i|t_-\rangle \quad (\text{D.96})$$

Można zatem wyciągnąć następujące wnioski:

1. Baza jest złożona ze stanów własnych operatora \mathcal{R}_y

2. Jeśli baza $\{|b\rangle\}$ spełnia równania $\mathcal{R}_y|b\rangle = -|\bar{b}\rangle$, $\mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = |b\rangle$ i \mathcal{R}_y jest symetrią hamiltonianu

$$\mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}\mathcal{R}_y = \hat{H} \quad (\text{D.97})$$

to wszystkie elementy macierzowe muszą być rzeczywiste.

Dowód:

Z jednej strony mamy:

$$\langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle = \langle b'|\mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}\mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = -\langle b'|\hat{H}|b\rangle = \langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle^*. \quad (\text{D.98})$$

Z drugiej strony widzimy, że:

$$\langle b'|\hat{H}|b\rangle = \langle b'|\mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}\mathcal{R}_y|b\rangle = -\langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle = \langle b'|\hat{H}|b\rangle^*. \quad (\text{D.99})$$

3. Hamiltonian zespolony o wymiarach $2N \times 2N$ może redukować się do dwóch macierzy $N \times N$ jeśli użyjemy bazy $\{|b\rangle\}$; własność $\mathcal{R}_y|b\rangle = -|\bar{b}\rangle$, $\mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = |b\rangle$ i \mathcal{R}_y jest własnością bazy i nie ma nic wspólnego z hamiltonianem; hamiltonian symetryczny ze względu na \mathcal{R}_y może być zawsze zdiagonalizowane blokowo używając bazy transformowanej $\{|t_+\rangle, |t_+\rangle\}$.

W naszej reprezentacji mamy:

$$\mathcal{R}_y|b\rangle = -|\bar{b}\rangle; \quad \mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = -|b\rangle; \quad (\text{D.100})$$

$$\hat{T}|b\rangle = |\bar{b}\rangle; \quad \hat{T}|\bar{b}\rangle = |b\rangle \quad (\text{D.101})$$

$$\mathcal{R}_y\hat{T}|b\rangle = \mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = -|b\rangle \quad (\text{D.102})$$

$$\mathcal{R}_y\hat{T}|\bar{b}\rangle = \mathcal{R}_y|b\rangle = -|\bar{b}\rangle \quad (\text{D.103})$$

Stąd mamy:

$$\hat{T} = \mathcal{R}_y^{-1} \quad (\text{D.104})$$

D.2 Jednoczesna obecność symetrii \mathcal{R}_x i \mathcal{R}_y .

Policzmy działanie operatora \mathcal{R}_x na naszą bazę:

$$\mathcal{R}_x|b\rangle = (-i\sigma_x)e^{-i\pi\hat{l}_x}\hat{\Pi}|b\rangle = (-1)^{n_y+n_z}(-1)^{n_x+n_y+n_z}(-i\sigma_x)|b\rangle = (-1)^{n_x}(-i\sigma_x)|b\rangle \quad (\text{D.105})$$

Sprawdźmy, że:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & -i\sigma_y &= -\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ i\sigma_x|s_z\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = | -s_z \rangle \\ \sigma_x| -s_z \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = | -s_z \rangle \end{aligned}$$

Dlatego też

$$\mathcal{R}_x|b\rangle = -i(-1)^{n_x}|n_x, n_y, n_z; -s_z\rangle i^{n_y} = -i(-1)^{n_x}i^{n_y}(-1)^{s+s_z}|\bar{b}\rangle \quad (\text{D.106})$$

i w konsekwencji mamy

$$\mathcal{R}_x|b\rangle = -i(-1)^{n_x+n_y}(-1)^{s+s_z}|\bar{b}\rangle. \quad (\text{D.107})$$

Działając powtórnie operatorem obrotu na powyższe równanie otrzymamy:

$$\mathcal{R}_x^2|b\rangle = -i(-1)^{n_x+n_y}(-1)^{s+s_z}\mathcal{R}_x|\bar{b}\rangle = -|b\rangle, \quad (\text{D.108})$$

a stąd wynika, że

$$\mathcal{R}_x|\bar{b}\rangle = -i(-1)^{n_x+n_y}(-1)^{s+s_z}\mathcal{R}_x|b\rangle. \quad (\text{D.109})$$

Założmy, że macierz hamiltonianu jest symetryczna ze względu na \mathcal{R}_x

$$\begin{aligned} \langle b'|\hat{H}|b\rangle &= \langle b'|\mathcal{R}_x^{-1}\hat{H}\mathcal{R}_x|b\rangle \\ &= -ii(-1)^{s+s'_z}(-1)^{s+s_z}(-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}\langle \bar{b}'|\hat{H}|\bar{b}\rangle \\ &= (-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}\langle b'|\hat{H}|b\rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.110})$$

stąd

$$\langle b'|\hat{H}|b\rangle = (-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}\langle b'|\hat{H}|b\rangle \quad (\text{D.111})$$

$$\langle b'|\hat{H}|b\rangle \cdot [1 - (-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}] = 0, \quad (\text{D.112})$$

co więcej

$$\begin{aligned} \langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle &= \langle b'|\mathcal{R}_x^{-1}\hat{H}\mathcal{R}_x|\bar{b}\rangle \\ &= -ii(-1)^{s+s'_z}(-1)^{s+s_z}(-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}\langle \bar{b}'|\hat{H}|\bar{b}\rangle \\ &= (-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}\langle \bar{b}'|\hat{H}|\bar{b}\rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.113})$$

stąd

$$\langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle = (-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}\langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle \quad (\text{D.114})$$

$$\langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle \cdot [1 - (-1)^{n_x+n'_x+n_y+n'_y}] = 0. \quad (\text{D.115})$$

Ponieważ \mathcal{R}_x i \mathcal{R}_y nie komutują ze sobą, nie możemy używać symetrii \mathcal{R}_x jako dobrej liczby kwantowej ale połowa elementów macierzowych znika i rzeczywista reprezentacja macierzy hamiltonianu ma wymiar $N \times N$.

$$h = \left[\begin{array}{cc|cc} a & 0 & x & 0 \\ 0 & b & 0 & y \\ \hline -x^* & 0 & a^* & 0 \\ 0 & -y^* & 0 & b^* \end{array} \right]$$

Zdefiniujmy macierz unitarną:

$$U = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad (\text{D.116})$$

$$U \cdot U = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right], \quad (\text{D.117})$$

czyli $U^{-1} = U$ i $U^\dagger = U = U^{-1}$. Podziałajmy teraz macierz unitarna na macierz hamiltonianu:

$$\begin{aligned}
UhU^{-1} &= \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{cc|cc} a & 0 & x & 0 \\ 0 & b & 0 & y \\ \hline -x^* & 0 & a^* & 0 \\ 0 & -y^* & 0 & b^* \end{array} \right] \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \\
&= \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{cc|cc} a & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & y \\ \hline -x^* & a^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -y^* & b^* \end{array} \right] \\
&= \left[\begin{array}{cc|cc} a & x & 0 & 0 \\ -x^* & a^* & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & b & y \\ 0 & 0 & -y^* & b^* \end{array} \right]. \tag{D.118}
\end{aligned}$$

Wnioski:

1. Zredukowaliśmy macierz do dwóch $N \times N$
2. Jedna macierz jest zbudowana ze stanów o parzystości $x, y = +1$ a druga ze stanów o parzystości $x, y = -1$
3. Struktura bloków zapewnia, że stany własne są podwójnie zdegenerowane (degeneracja Kramersa).
4. Bloki mają postać:

$$h' = UhU^{-1} = \left[\begin{array}{cc|cc} a & x & 0 & 0 \\ -x^* & a^* & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & b & y \\ 0 & 0 & -y^* & b^* \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc|cc} a & x & 0 & 0 \\ x^\dagger & a^* & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & b & y \\ 0 & 0 & y^\dagger & b^* \end{array} \right].$$

Jeśli macierze a, b, x, y są rzeczywiste wtedy możemy zapisać:

$$h' = \left[\begin{array}{cc|cc} a & x & 0 & 0 \\ x^T & a^* & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & b & y \\ 0 & 0 & y^T & b^* \end{array} \right].$$

E Symetrie członów kranking

Rozważmy osobno trzy osie krankingowe, które dają trzy jednowymiarowe hamiltoniany krankingowe

$$H_x^\omega = H - \omega_x \hat{j}_x; \tag{E.119}$$

$$H_y^\omega = H - \omega_y \hat{j}_y; \tag{E.120}$$

$$H_z^\omega = H - \omega_z \hat{j}_z. \tag{E.121}$$

Możemy znaleźć, że jeśli $\mathcal{R}_y|\bar{b}\rangle = |b\rangle$, to:

$$\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle = \langle b'|\hat{l}_x|b\rangle + \underbrace{\langle b'|\hat{s}_x|b\rangle}_0; \quad (\text{E.122})$$

$$\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle = \underbrace{\langle b'|\hat{l}_x|\bar{b}\rangle}_0 + \langle b'|\hat{s}_x|\bar{b}\rangle; \quad (\text{E.123})$$

$$\langle b'|\hat{j}_y|b\rangle = \langle b'|\hat{l}_y|b\rangle + \underbrace{\langle b'|\hat{s}_y|b\rangle}_0; \quad (\text{E.124})$$

$$\langle b'|\hat{j}_y|\bar{b}\rangle = \underbrace{\langle b'|\hat{l}_y|\bar{b}\rangle}_0 + \langle b'|\hat{s}_y|\bar{b}\rangle; \quad (\text{E.125})$$

$$\langle b'|\hat{j}_z|b\rangle = \langle b'|\hat{l}_z|b\rangle + \langle b'|\hat{s}_z|b\rangle; \quad (\text{E.126})$$

$$\langle b'|\hat{j}_z|\bar{b}\rangle = \underbrace{\langle b'|\hat{l}_z|\bar{b}\rangle}_0 + \underbrace{\langle b'|\hat{s}_z|\bar{b}\rangle}_0. \quad (\text{E.127})$$

Podobnie możemy znaleźć wartości własne mając funkcje falowe trzeciej składowej spinu i pseudospinu.

$$\langle s_z|\hat{s}_x|\bar{s}_z\rangle = -\frac{1}{2}; \quad (\text{E.128})$$

$$\langle s_z|\hat{s}_y|\bar{s}_z\rangle = \frac{i}{2}; \quad (\text{E.129})$$

$$\langle s_z|\hat{s}_z|\bar{s}_z\rangle = \frac{1}{2}. \quad (\text{E.130})$$

Policzmy element macierzowy:

$$\begin{aligned} \langle t'_+|\hat{j}_x|t_+\rangle &= \frac{1}{2}(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle + i\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle - i\langle \bar{b}'|\hat{j}_x|b\rangle + \langle \bar{b}'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle) \\ &= \frac{1}{2}\underbrace{(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle - \langle b'|\hat{j}_x|b\rangle^*)}_{2i\Im(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle)} + \frac{i}{2}\underbrace{(\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle - \langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle^*)}_{2i\Im(\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle)}. \end{aligned} \quad (\text{E.131})$$

Korzystamy z własności liczb zespolonych $z = a + ib$ i $z^* = a - ib$ a stąd $z - z^* = a + ib - a + ib = 2ib$, co pozwala zapisać:

$$\langle t'_+|\hat{j}_x|t_+\rangle = -Im(\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle) + iIm(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle). \quad (\text{E.132})$$

Podobnie postępujemy z elementami:

$$\langle t'_-|\hat{j}_x|t_-\rangle = \frac{1}{2}\underbrace{(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle - \langle b'|\hat{j}_x|b\rangle^*)}_{2i\Im(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle)} + \frac{i}{2}\underbrace{(\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle^* - \langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle)}_{-2i\Im(\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle)}, \quad (\text{E.133})$$

więc dostajemy:

$$\langle t'_-|\hat{j}_x|t_-\rangle = Im(\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle) + iIm(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle). \quad (\text{E.134})$$

Elementy mieszane dostajemy z:

$$\begin{aligned} \langle t'_+|\hat{j}_x|t_-\rangle &= \frac{i}{2}(-\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle + \langle \bar{b}'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle) + \frac{1}{2}(-\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle - \langle \bar{b}'|\hat{j}_x|b\rangle) \\ &= \frac{-1}{2}(\langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle + \langle b'|\hat{j}_x|\bar{b}\rangle^*) \frac{-i}{2}(\langle b'|\hat{j}_x|b\rangle + \langle b'|\hat{j}_x|b\rangle^*), \end{aligned} \quad (\text{E.135})$$

a stąd

$$\langle t'_+ | \hat{j}_x | t_- \rangle = -Re(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) - iRe(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) \quad (E.136)$$

i podobnie

$$\begin{aligned} \langle t'_- | \hat{j}_x | t_+ \rangle &= \frac{1}{2}(-\langle \bar{b}' | \hat{j}_x | b \rangle - \langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) + \frac{i}{2}(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle - \langle \bar{b}' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) \\ &= \frac{-1}{2}(\langle \bar{b}' | \hat{j}_x | b \rangle + \langle \bar{b}' | \hat{j}_x | b \rangle^*) + \frac{i}{2}(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle + \langle b' | \hat{j}_x | b \rangle^*), \end{aligned} \quad (E.137)$$

a stąd

$$\langle t'_- | \hat{j}_x | t_+ \rangle = -Re(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) + iRe(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle). \quad (E.138)$$

Pokazaliśmy zatem związki:

$$\langle t'_+ | \hat{j}_x | t_+ \rangle = -\langle t'_- | \hat{j}_x | t_- \rangle^* \quad ; \quad \langle t'_+ | \hat{j}_x | t_- \rangle = \langle t'_- | \hat{j}_x | t_+ \rangle^* \quad (E.139)$$

$$\langle t'_+ | \hat{H} | t_+ \rangle = \langle t'_- | \hat{H} | t_- \rangle^* \quad ; \quad \langle t'_+ | \hat{H} | t_- \rangle = -\langle t'_- | \hat{H} | t_+ \rangle^*. \quad (E.140)$$

Ponieważ w bazie $\{|b\rangle, |\bar{b}\rangle\}$ wszystkie elementy macierzy \hat{j}_x są rzeczywiste mamy:

$$\langle t'_+ | \hat{j}_x | t_+ \rangle = 0 = \langle t'_- | \hat{j}_x | t_- \rangle \quad (E.141)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_x | t_- \rangle = -Re(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) - iRe(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) \quad (E.142)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_x | t_- \rangle = \langle t'_- | \hat{j}_x | t_+ \rangle^*. \quad (E.143)$$

Podobne wzory można otrzymać dla pozostałych składowych \hat{j}_y i \hat{j}_z .

$$\langle t'_+ | \hat{j}_z | t_+ \rangle = 0 = \langle t'_- | \hat{j}_z | t_- \rangle \quad (E.144)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_z | t_- \rangle = -Re(\langle b' | \hat{j}_z | \bar{b} \rangle) - iRe(\langle b' | \hat{j}_z | b \rangle) \quad (E.145)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_z | t_- \rangle = \langle t'_- | \hat{j}_z | t_+ \rangle^*, \quad (E.146)$$

oraz

$$\langle t'_+ | \hat{j}_y | t_- \rangle = 0 = \langle t'_- | \hat{j}_y | t_+ \rangle \quad (E.147)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_y | t_+ \rangle = -Im(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) - iIm(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle) \quad (E.148)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_y | t_+ \rangle = -\langle t'_- | \hat{j}_y | t_- \rangle^*. \quad (E.149)$$

Podsumowując mamy:

$$\langle t'_+ | \hat{j}_x | t_+ \rangle = 0 \quad ; \quad \langle t'_- | \hat{j}_x | t_- \rangle = 0 \quad (E.150)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_y | t_- \rangle = 0 \quad ; \quad \langle t'_- | \hat{j}_y | t_+ \rangle = 0 \quad (E.151)$$

$$\langle t'_+ | \hat{j}_z | t_+ \rangle = 0 \quad ; \quad \langle t'_- | \hat{j}_z | t_- \rangle = 0. \quad (E.152)$$

Człony niezerowe rzeczywiste są to:

$$\langle t'_+ | \hat{j}_x | t_- \rangle = -Re(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) - iRe(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) \quad (E.153)$$

$$\langle t'_- | \hat{j}_x | t_+ \rangle = -Re(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) + iRe(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle). \quad (E.154)$$

Człony niezerowe urojone są to:

$$\langle t'_+ | \hat{j}_y | t_+ \rangle = -Im(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) - iIm(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle) \quad (\text{E.155})$$

$$\langle t'_- | \hat{j}_y | t_- \rangle = -Im(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) + iIm(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle), \quad (\text{E.156})$$

ponieważ

$$Im(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) = 0 = Im(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) \quad (\text{E.157})$$

$$Re(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) = 0 = Re(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle). \quad (\text{E.158})$$

Kranking X czyli elementy macierzowe hamiltonianu w przypadku obrotu wokół osi O_x :

$$\begin{aligned} H_x^\omega &= H - \omega_x j_x = \begin{bmatrix} \langle t'_+ | \hat{H}_x^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_+ | \hat{H}_x^\omega | t_- \rangle \\ \langle t'_- | \hat{H}_x^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_- | \hat{H}_x^\omega | t_- \rangle \end{bmatrix} \\ &= \left[\begin{array}{c|c} Re(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) + iRe(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) & \omega_x Re(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) + iRe(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) \\ \hline \omega_x Re(\langle b' | \hat{j}_x | \bar{b} \rangle) - iRe(\langle b' | \hat{j}_x | b \rangle) & Re(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) - iRe(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) \end{array} \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.159})$$

Mamy więc postać:

$$H_x^\omega = H - \omega_x j_x = \begin{bmatrix} H & J \\ J^* & H^* \end{bmatrix}.$$

Kranking Y czyli elementy macierzowe hamiltonianu w przypadku obrotu wokół osi O_y

$$\begin{aligned} H_y^\omega &= H - \omega_y j_y = \begin{bmatrix} \langle t'_+ | \hat{H}_y^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_+ | \hat{H}_y^\omega | t_- \rangle \\ \langle t'_- | \hat{H}_y^\omega | t_+ \rangle & \langle t'_- | \hat{H}_y^\omega | t_- \rangle \end{bmatrix} \\ &= \left[\begin{array}{c|c} Re(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) + iRe(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) & 0 \\ +\omega_y Jm(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) - i\omega_y Jm(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle) & \\ \hline 0 & Re(\langle b' | \hat{H} | b \rangle) - iRe(\langle b' | \hat{H} | \bar{b} \rangle) \\ & -\omega_y Jm(\langle b' | \hat{j}_y | \bar{b} \rangle) + i\omega_y Jm(\langle b' | \hat{j}_y | b \rangle) \end{array} \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.160})$$

Stąd wynika, że kranking - y czyli obrót wokół osi O_y redukuje macierz zespoloną wchodzącą do diagonalizacji o wymiarach $2n \times 2n$ do macierzy zespolonej $n \times n$.

$$H_y^\omega = H - \omega_y j_y = \begin{bmatrix} H + J & 0 \\ 0 & H^* + J^* \end{bmatrix}.$$

Podziękowania

Serdecznie dziękuję Panu Profesorowi Jerzemu Dudkowi z Institute Pluridisciplinaire Hubert Curien w Strasourgu za długoletnią opiekę naukową, wszechstronną pomoc i porady udzielone w trakcie przygotowywania i redakcję tej pracy.

Szczególne podziękowania składam Panu Profesorowi Adamowi Majowi i Pani Doktor habilitowanej Marii Kmiecik z Instytutu Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie za nieocenioną pomoc przy pisaniu tej monografii, jak również przybliżenie tematyki dotyczącej Gigantycznych Rezonansów Dipolowych i umożliwienie mi udziału w licznych eksperymentach oraz wsparcie i przyjaźń.

Chciałabym podziękować Panu Profesorowi Andrzejowi Gózdziowi oraz Doktorowi Arturowi Dobrowolskiemu z Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej, za cierpliwość i czas poświęcony dyskusjom dotyczącym teorii grup punktowych i ich symetriom, bez których ta praca nie mogłaby powstać.

Dziękuję serdecznie Kolegom i Koleżankom z IFJ-PAN, IPHC Strasbourg oraz GANIL, Caen, za stworzenie wspaniałej atmosfery, dzięki której praca nad wynikami przedstawionymi w tej monografii, była bardzo owocna.

Moim Rodzicom, rodzinie i przyjaciołom dziękuję za wsparcie i okazywaną mi wyrozumiałość.

Praca była częściowo wykonana w ramach projektu badawczego NCN nr 2011/03/B/ST2/01894 oraz w ramach współpracy polsko-francuskiej COPIN-IN2P3 nr 05-119 i LEA COPIGAL – projekt: “Search for the high-rank symmetries in subatomic physics”.

Literatura

- [I] K. Mazurek, J. Dudek, AIP Conf. Proc. **802**, 153 (2005);
- [II] K. Mazurek, J. Dudek, B. Nerlo-Pomorska, Acta Phys. Pol. **B 36**, 1355 (2005);
- [III] M. Kmiecik et al. Acta Phys. Pol. **B 36**, 1169 (2005);
- [IV] K. Mazurek, N. Dubray, J. Dudek, N. Schunck, Int. J. Mod. Phys. **E 15**, 542 (2006);
- [V] K. Mazurek, M. Kmiecik, A. Maj, J. Dudek, N. Schunck, Acta Phys. Pol. **B 38**, 1455 (2007);
- [VI] K. Mazurek, M. Matejska, M. Kmiecik, A. Maj, J. Dudek, Int. J. of Mod Phys. **E 17**, 132 (2008);
- [VII] K. Mazurek, J. Dudek, A. Gózdź, D. Curien, M. Kmiecik, A. Maj, Acta Phys. Pol. **B 40**, 731 (2009);
- [VIII] J. Dudek, D. Curien, A. Gózdź, K. Mazurek, Int. J. Mod. Phys. **E 18**, 2155 (2009);
- [IX] J. Dudek, K. Mazurek, D. Curien, A. Dobrowolski, A. Gózdź, D. Hartley, A. Maj, L. Riedinger, N. Schunck, Acta Phys. Pol. **B 40**, 713 (2009) (1877);
- [X] Q.T. Doan et al., Acta. Phys. Polon., **B 40**, 725 (2009); PhD Thesis, Uni. C. Bernard, Lyon
- [XI] Q.T. Doan et al., Phys. Rev. **C 82**, 067306 (2010);
- [XII] J. Dudek, A. Gózdź, K. Mazurek, H. Molique, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **37**, 064032 (2010);
- [XIII] A. Maj, K. Mazurek, J. Dudek, M. Kmiecik, D. Rouvel, Int. J. Mod. Phys. **E 19**, 532 (2010);
- [XIV] D. Curien, J. Dudek, K. Mazurek, J. Phys. (Conference Series) **205**, 012034 (2010);
- [XV] D. Curien, J. Dudek, A. Gózdź, K. Mazurek, H. Molique, L. Sengele, Int. J. Mod. Phys. **E 20**, 219 (2011);
- [XVI] K. Mazurek, J. Dudek, M. Kmiecik, A. Maj, J. P. Wieleczko, D. Rouvel, Acta Phys. Pol. **B 42**, 471 (2011);
- [XVII] A. Dobrowolski, A. Gózdź, K. Mazurek, J. Dudek, Int. J. Mod. Phys. **E 20**, 500 (2011);

- [XVIII] H. Molique, J. Dudek, A. Gózdź, K. Mazurek, *Int. J. Mod. Phys. E* **20**, 811 (2011);
- [XIX] K. Mazurek, J. Dudek, A. Maj, D. Rouvel, wysłane do *Phys. Rev. C*, arXiv:1308.3273;
- [XX] K. Mazurek, <http://jacobi.ifj.edu.pl/~mazurek/index.php>
- [Abr64] M. Abramowitz, I.A. Stegun, 'Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables', Dover Publications New York: Dover Publications (1972);
- [Ant02] M.S. Antony, 'Nuclide Chart 2002', IReS, Strasbourg, France, Association Européenne contre les Leucodystrophies;
- [Art97] A. Artna-Cohen, *Nucl. Data Sheets* **80**, 723 (1997);
- [Aru04] P. Arumugam, G. Shanmugan, S.K. Patra, *Phys. Rev. C* **69**, 054313 (2004);
- [Bar57] J. Bardeen, L. H. Cooper, I. L. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957);
- [Bar08] J. Bartel, K. Pomorski, *Int. J. Mod. Phys. E* **17**, 100 (2008);
- [Bar09] J. Bartel, B. Nerlo-Pomorska, K. Pomorski, *Int. Journ. Mod. Phys. E* **18**, 986 (2009);
- [Bar10] J. Bartel, F. Ivanyuk, K. Pomorski, *Int. Journ. Mod. Phys. E* **19**, 601 (2010);
- [Bar10a] R.A.Bark, J.F.Sharpey-Schafer, S.M.Maliage, et al. *Phys.Rev.Lett.* **104**, 022501 (2010);
- [Bar11] J. Bartel and K. Pomorski, *Int. Journ. Mod. Phys. E* **20**, 333 (2011);
- [Bar13] J. Bartel, K. Pomorski, *Physica Scripta*, **T 154**, 014022 (2013);
- [Bel59] S. T. Belyaev, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **31**, 11 (1959);
- [Ber61] R. Beringer and W. J. Knox, *Phys. Rev.* **121** 1195 (1961);
- [Bes63] D.R. Bes, Z. Szymanski, *Nucl. Phys.***28**, 42 (1963);
- [Bet36] H. Bethe, *Rev. Mod. Phys.* **8**, 82 (1936);
- [Boh75] A. Bohr, B.R. Mottelson, *Struktura jądra atomowego*, PWN, Warszawa (1984);
- [Blo60] J. Blomqvist, S. Walhborn, *Ark. Fys.* **16** (1960) 543;
- [Bol72] M. Bolstreli, E. O. Fiset, J. R. Nix, J. L. Norton, *Phys. Rev. C* **5**, 1050 (1972);
- [Bon05] D. Bonatsos, D. Lenis, N. Minkov, D. Petrellis, P. Yotov, *Phys. Rev. C* **71**, 064309 (2005);
- [Bra72] M. Brack, J. Damgaard, A.S. Jensen, H.C. Pauli, V.M. Strutinsky, and C.Y. Wong, *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 320 (1972);

- [Bre07] M. Brekiesz, A. Maj, M. Kmiecik, K. Mazurek, et al. Nucl. Phys. **A788**, 224c (2007);
- [Cam57] A. Cameron, Canad. J. Phys. **35**, 1021 (1957);
- [Cam94] F. Camera, A. Bracco, B. Million, M. Pignanelli, J.J. Gaardhoje, Z. Zelazny, T. Ramsay, A. Maj, Nucl. Phys. **A572**, 401 (1994);
- [Che68] V. A. Chepurinov, Yad. Fiz. **6**, 955 (1968);
- [Che08] Y.-S. Chen, Y. Sun, Z.-C. Gao, Phys.Rev.**C 77**, 061305 (2008);
- [Cie13] M. Ciemała et al. Acta Phys. Pol. **B 42**, 633 (2011);
- [Cor94] J.F. Cornwell, *Group Theory in Physics*, Academic Press, London, 1994;
- [Coh63] S. Cohen, W.J. Świątecki, Ann. Phys.**22**, 406 (1963);
- [Coh74] S. Cohen, F. Plasil, W.J. Świątecki, Ann. Phys. **82**, 557 (1974);
- [Cwi87] S. Ćwiok, J. Dudek, W. Nazarewicz, J. Skalski, T. Werner, Comput. Phys. Commun. **46**, 379 (1987);
- [Cwi92] S. Ćwiok, A. Sobiczewski, Z. Phys. **A 342**, 203 (1992);
- [Cwi94] S. Ćwiok, W. Nazarewicz, J.X. Saladin, W. Płóciennik, A. Johnson, Phys. Lett. **B 322**, 304 (1994);
- [Dav76] K. T. R. Davies, J. R. Nix, Phys. Rev. **C 14**, 1977 (1976);
- [Del91] D.N. Delis, *et al*, Nucl. Phys. **A 534**, 403 (1991);
- [Dia12] A. Diaz, praca doktorska, Uniwersytet Mediolański, Mediolan, Włochy, 2012;
- [Din13] N. Dinh Dang, M. Ciemała, M. Kmiecik, A. Maj, Phys. Rev. **C 87**, 054313 (2013);
- [Dob00] J. Dobaczewski, J. Dudek, S.G. Rohoziński, T.R. Werner, Phys. Rev. **C 62**, 012310, 014311 (2000);
- [Dub05] N. Dubray, J. Dudek and A. Maj, Acta Phys. Pol. **B 36**, 1161 (2005);
- [Dub05a] N. Dubray, praca doktorska, Université de Louis Pasteur de Strasbourg, Francja (2005);
- [Dud78] J. Dudek, Acta Phys. Polon. **B 9**, 919 (1978);
- [Dud78a] J. Dudek, T.Werner, J. Phys. **G 4**, 1543 (1978);
- [Dud80] J. Dudek, A. Majhofer and J. Skalski, J. Phys. **G 6**, 447 (1980);
- [Dud02] J. Dudek, A. Gózdź, N. Schunck, M. Miśkiewicz, Phys. Rev. Lett. **88**, 252502 (2002);
- [Dud03] J. Dudek, K. Mazurek, B. Nerlo-Pomorska, Acta Phys. Polon. **B 34**, 2247 (2003);

- [Dud03a] J. Dudek, A. Gózdź, N. Schunck, Acta Phys. Pol. **B 34**, 2491 (2003);
- [Dud03b] J. Dudek, A. Gózdź, and N. Schunck, Acta Phys. Pol. **B 34**, 2491 (2003);
- [Dud04] J. Dudek, K. Mazurek, B. Nerlo-Pomorska,
Int. J. of Modern Phys. **E 13**, 117 (2004);
- [Dud04a] J. Dudek, K. Mazurek, B. Nerlo-Pomorska, Acta Phys. Polon. **B 35**, 1263 (2004);
- [Dud05] J. Dudek, K. Mazurek, B. Nerlo-Pomorska,
Int. J. of Modern Phys. **E 14**, 383 (2005);
- [Dud06] J. Dudek, D. Curien, N. Dubray, J. Dobaczewski, V. Pangon, P. Olbratowski,
N. Schunck, Phys. Rev. Lett. **97**, 072501 (2006);
- [Dud06a] J. Dudek, D. Curien, N. Dubray, J. Dobaczewski, V. Pangon, P. Olbratowski,
N. Schunck, Phys. Rev. Lett. **97**, 072501 (2006);
- [Dud07] J. Dudek, J. Dobaczewski, N. Dubray, A. Gózdź, V. Pangon, N. Schunck,
Int. J. of Modern Phys. **E 16**, 516 (2007);
- [Dud07a] J. Dudek, A. Gózdź, D. Curien, V. Pangon, N. Schunck, Acta Phys. Polon. **B 38**, 1389 (2007);
- [Eis87] J.M. Eisberg, W. Greiner, 'Nuclear models: collective and single particle phenomena', North-Holland, Amsterdam, 1987;
- [Fan00] T.S. Fan, K.X. Jing, L. Phair, K. Tso, McMahan M, Hanold K, G.J. Wozniak,
L.G. Moretto, Nucl. Phys. **A 679**, 121 (2000);
- [Gaa92] J.J. Gaardhoje, *Nuclear structure at light excitation energy studied with giant resonances*, Niels Bohr Institut, University of Copenhagen, 1992;
- [Gal85] M. Gallardo, M. Diebel, T. Dossing, R.A. Broglia, Nucl. Phys. **A 443**, 415 (1985);
- [Ghe99] R.A. Gherghescu, J. Skalski, Z. Patyk, A. Sobiczewski,
Nucl. Phys. **A 651**, 237 (1999);
- [Gop55] M. Gopper - Meyer, H. J. D. Jensen 'Elementary theory of structure' (Wiley 1955);
- [Goz03] A. Gózdź, J. Dudek, M. Miśkiewicz, Acta Phys. Polon. **B 34**, 2123 (2003);
- [Goz13] A. Gózdź, J. Dudek, prywatna korespondencja;
- [Goz04] A. Gózdź, A. Olszewski, Int. J. Mod. Phys. **E 13**, 357 (2004);
- [Goz10] A. Gózdź, A. Dobrowolski, J. Dudek, K. Mazurek,
Int. J. Mod. Phys. **E 19**, 621 (2010);
- [Gre98] P. Greenless et al., J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **24**, 63 (1998);
- [Ham87] M. Hamermesh *Teoria Grup w zastosowaniu do zagadnień fizycznych* Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1987;

- [Has71] R.W. Hasse, *Ann. Phys.* **68**, 377 (1971);
- [Ign75] A.V. Ignatyuk et al., *Yad. Fiz.* **21** (1975) 1185 [*Sov. J. Nucl. Phys.* **21** (1976) 612];
- [Iva09] F. A. Ivanyuk, K Pomorski, *Phys. Rev.* **C 79**, 054327 (2009);
- [Iva13] F. A. Ivanyuk, K Pomorski, *Physica Scripta*, **T 154**, 014021 (2013);
- [Jac84] C. G. J. Jacobi, *Vorlesungen über Dynamik*; Ed. A. Clebsch, printed by G. Reimer, Berlin 1884;
- [Jac10] P. Jachimowicz, M. Kowal, P. Rozmej, J. Skalski, A. Sobiczewski, *Int. J. Mod. Phys.* **E 19**, 768 (2010);
- [Jac11] P. Jachimowicz, P. Rozmej, M. Kowal, J. Skalski, A. Sobiczewski, *Int. J. Mod. Phys.* **E 20**, 514 (2011);
- [Jen10] M.Jentschel, W.Urban, J.Krempel, D.Tonev, J.Dudek, D.Curien, B.Lauss, G.de Angelis, P.Petkov, *Phys.Rev.Lett.* **104**, 222502 (2010);
- [Jin99] K.X. Jing, *et al*, *Nucl. Phys.* **A 645**, 203 (1999);
- [Kmi00] M. Kmiecik, A. Maj, A. Bracco, F. Camera, M. Casanova, S. Leoni, B. Million, B. Herskind, R.A. Bark, W.E. Ormand, *Nucl. Phys.* **A 674**, 29 (2000);
- [Kmi07] M. Kmiecik, A. Maj, M. Brekiesz, K. Mazurek, et al, *Acta Phys. Polon.* **B 38**, 1437 (2007);
- [Kon81] J. Konijn et al., *Nucl. Phys.* **A 352**, 191 (1981);
- [Kow10] M. Kowal, J. Skalski, *Phys.Rev.* **C 82**, 054303 (2010);
- [Kow12] M. Kowal, J. Skalski, *Phys.Rev.* **C 85**, 061302 (2012);
- [Kra79] H.J. Krappe, J.R. Nix, and A.J. Sierk, *Phys. Rev.* **C 20**, 992 (1979);
- [LiD94] X. Li, J. Dudek, *Phys. Rev.* **C 49**, R1250 (1994);
- [Maj92] A. Maj, J.J. Gaardhoje, B. Herskind, G. Sletten, J. Nyberg, A. Bracco, B. Million, M. Pignanelli, *Phys.Lett.* **B 291**, 385 (1992) i referencje;
- [Maj94] A. Maj, J.J. Gaardhoje, A. Atac, S. Mitarai, J. Nyrberg, et al. *Nucl. Phys.* **A 571**, 185 (1994);
- [Maj04] A. Maj, M. Kmiecik, A. Bracco et al. *Nucl. Phys.* **A 371**, 319 (2004);
- [Maj10] A. Maj, S. Leoni, K. Mazurek, et al. *Spiral2 Day1-Phase2 LoI* (2010);
- [Mat07] M. Matejska, 'Teoretyczna interpretacja danych doświadczalnych gigantycznego rezonansu dipolowego', praca magisterska, Politechnika Krakowska, Kraków, 2007;
- [Maz11a] K. Mazurek, C. Schmitt, J.P. Wieleczko, P.N. Nadtochy, and G. Ademard, *Phys. Rev. C* **84**, 014610 (2011);
- [Mol97] H. Molique and J. Dudek, *Phys. Rev.* **C 56**, 1795 (1997);

- [Mol04] P. Möller, A.J. Sierk, A. Iwamoto, Phys. Rev. Lett. **92**, 072501 (2004);
- [Mol86] P. Möller, G.A. Leander, J.R. Nix, Z. Phys. **A 323**, 41 (1986);
- [Mol95] P. Möller, J.R. Nix, W.D. Myers, W.J. Świątecki,
At. Data Nucl. Data Tables **59**, 185 (1995);
- [Mor72] L.G. Moretto, S.G. Thompson, J. Routti, R.C. Gatti, Phys. Lett. **B 38**, 471 (1972);
- [Mor89] L.G. Moretto, G.F. Peaslee, G.J. Wozniak, Nucl. Phys. **A 502**, 453c (1989);
- [Mye66] W.D. Myers, W.J. Świątecki, Nucl. Phys. **81**, 1 (1966);
- [Mye69] W.D. Myers, W.J. Świątecki, Ann. Phys. **N. Y.**, 55 (1969);
- [Mye96] W.D. Myers, W.J. Świątecki, Nucl. Phys. **A 601**, 141 (1996);
- [Mye01] W.D. Myers, W.J. Świątecki, Acta Phys. Pol. B **32**, 1033 (2001);
- [Naz84] W. Nazarewicz, P. Olanders, I. Ragnarsson, J. Dudek, G.A. Leander, P. Möller
and E. Ruchowska, Nucl. Phys. **A 429**, 269 (1984);
- [Ner82] K. Neergard, Phys. Lett. **B 110**, 7 (1982);
- [Nil55] S.G. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **29**, 16 (1955);
- [NNDC] <http://www.nndc.bnl.gov>;
- [Poi85] H. Poincaré, Acta Math. **7**, 259 (1885);
- [Pom03] K. Pomorski, J. Dudek, Phys. Rev. **C 67**, 044316 (2003);
- [Pom07] K. Pomorski, B. Nerlo-Pomorska and J. Bartel, Int. J. Mod. Phys. **E 16**, 566
(2007);
- [Ran11] J. Randrup, P. Möller, A. Sierk, Phys. Rev. **C 84**, 034613 (2011);
- [Ray77] J. Rayleigh, *The Theory of Sound*, Mac Millan, London (1877);
- [Ros68] E. Rost, Phys. Lett. **B 26**, 184 (1968);
- [Ros02] D. Rosły, praca doktorska, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, 2002;
- [Sch02] C. Schmitt, J. Bartel, A. Surowiec, K. Pomorski, Acta Phys. Pol. **33**, 431 (2002);
- [Sch04] N. Schunck, J. Dudek, A. Gózdź, P.H. Regan, Phys. Rev. **C 67**, 061305 (2004);
- [Sch05] N. Schunck, J. Dudek, S. Frauendorf, Acta Phys. Polon. **B 36**, 1071 (2005);
- [Sch06] N. Schunck, P. Olbratowski, J. Dudek, J. Dobaczewski,
Int. J. Mod. Phys. **E 15**, 490 (2006);
- [Sie86] A.J. Sierk, Phys. Rev. **C 33**, 2039 (1986);
- [Ska91] J. Skalski, Phys. Rev. **C 43**, 140 (1991);

- [Ska92] J. Skalski, Phys. Lett. **B 274**, 1 (1992);
- [Smo93] R. Smolańczuk, H.V. Klapdor-Klengrohaus, A. Sobiczewski, Acta Phys. Pol. **B 24**, 685 (1993);
- [Sob69] A. Sobiczewski, Z. Szymański, S. Wycech, S.G. Nilsson, J.R. Nix, C.F. Tsang, C. Gustafson, P. Möller, B. Nilsson, Nucl. Phys. **A 131**, 67 (1969);
- [Sob88] A. Sobiczewski, Z. Patyk, S. Ćwiok, P. Rozmej, Nucl. Phys. **A 485**, 16 (1988);
- [Str66] V. M. Strutinsky, Yad. Fiz **3**, 614 (1966);
- [Str67] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A 95**, 420 (1967);
- [Str68] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A 122**, 1 (1968);
- [Tag13] S. Tagami, Y. R. Shimizu, and J. Dudek, Phys. Rev. **C 87**, 054306 (2013);
- [Tak98] S. Takami, K. Yabana, M. Matsuo, Phys. Lett. **B 431**, 242 (1998);
- [Tre80] S. Trentalange, S. E. Koonin, A. J. Sierk, Phys. Rev. **C 22** 1159 (1980);
- [War96] D. Ward et al, Nucl. Phys. **A 600**, 88 (1996);
- [Wei35] C. Weizsäcker, Z. Phys **96**, 431 (1935);
- [Wie06] O. Wieland, et al. Phys. Rev. Lett. **97**, 012501 (2006);
- [Wig37] E. Wigner, Phys. Rev. **51**, 106 (1937); E. Wigner, Phys. Rev. **51**, 947 (1937);
- [Woo54] R.D. Woods, D.S. Saxon, Phys. Rev. **95**, 577 (1954);
- [Voi83] M. J. A. de Voigt, J. Dudek, and Z. Szymański, Rev. Mod. Phys. **55**, 949 (1983);
- [Zbe09] K. Zberecki, P.-H.Heenen, P. Magierski, Phys.Rev. **C 79**, 014319 (2009).

Spis rysunków

1.1	Przykładowe kształty jąder generowane za pomocą funkcji kulistych dla deformacji kwadrupolowych: (a) (kształt spłaszczony) oblate, (b) kształty trójosiowe, (c) (kształt wydłużony) prolate, (d) kształt wydłużony z szyjką i (e) – deformacja oktopolowa.	13
1.2	Przykładowe kształty oktopolowe jąder, generowane za pomocą funkcji kulistych osiowosymetryczne – (a) i osiowo asymetryczne (tetrahedralne) – (b). Deformacja oktahedralna została przedstawiona na rysunkach (c) dla $\sigma_1 < 0$ i (d) dla $\sigma_1 > 0$	14
1.3	Przykładowe kształty jąder, generowane za pomocą funkcji kulistych dla złożenia deformacji tetrahedralnych t_1 i oktahedralnych σ_1 , posiadających znaki ujemne i dodatnie.	15
1.4	Lewa strona ilustruje rozkład gęstości materii w jądrze a prawa strona pokazuje, jak zdefiniowana jest funkcja odległości danego punktu od powierzchni jądrowej.	21
1.5	Potencjały w jądrze: a) potencjał oscylatora harmonicznego V_{ho} , b) potencjał Woodsa-Saxona V_{WS} ; c) dopasowanie potencjału pomocniczego do potencjału Woodsa-Saxona.	25
1.6	Porównanie profili energii otrzymanych z obliczeń modelu kropłowego Myersa-Świąteckiego (MS-LD) i Yukawa plus exponential (YF) dla wydłużenia $\alpha_{20} = 2.0$ w funkcji parametru deformacji α_{60} (lewy) i α_{80} (prawy) (informacja prywatna).	36
2.1	Poziomy jednocząstkowe protonowe i neutronowe w funkcji deformacji α_{30} , α_{31} , α_{32} i α_{33} dla jądra $Z=126$, $N=196$ przy założeniu, że wszelkie inne deformacje są równe zero. Taka ilustracja pokazuje wstępowanie (lub nie) szczególnie dużych przerw energetycznych w funkcji wzrastającej deformacji - przy ustalonej symetrii jądra.	51
2.2	Poziomy jednocząstkowe protonowe i neutronowe w funkcji deformacji α_{32} dla jądra ($Z=40$, $N=70$) i ($Z=70$, $N=90$). Różne kolory krzywych oznaczają przynależność do poszczególnych reprezentacji grupy tetrahedralnej. Oznaczenia kolorów - w tekście.	52
2.3	Podobne do Rys. 2.2 ale centrowane na ($Z=90$, $N=136$), ($Z=100$, $N=168$) i ($Z=112$, $N=196$).	53
2.4	Mapy energii całkowitej złożonej z energii makroskopowej Folded-Yukawa ($E(fyu)$), energii mikroskopowej (energia powłokowej Strutinskiego (Shell[e]) i energii korelacji pairing (Correlation [PNP])) na płaszczyźnie deformacji (α_{20} , α_{32}) dla jąder ($Z=40$, $N=70$), ($Z=70$, $N=90$), ($Z=90$, $N=136$), ($Z=100$, $N=142$, $N=168$) oraz ($Z=112$, $N=168$).	55

- 2.5 Cięcia przestrzeni czterowymiarowej parametrów deformacji oktopolowej (α_{30} , α_{31} , α_{32} , α_{33}) dla ($Z=100$, $N=142$). 56
- 2.6 Poziomy energii jednocząstkowych dla protonów (prawy) i neutronów (lewy) w funkcji deformacji oktahedralnej w okolicach ($Z=40$, $N=70$), ($Z=70$, $N=90$), ($Z=90$, $N=136$) i ($Z=118$, $N=164$). Różne kolory krzywych oznaczają przynależność do poszczególnych reprezentacji grupy oktahedralnej. Oznaczenia kolorów - w tekście. 58
- 2.7 Mapy energii całkowitej na płaszczyźnie kwadrupolowo-oktahedralnej zminimalizowane po tetrahedralnym parametrze deformacji dla wybranych jąder ciężkich i superciężkich, związanych z dużymi przerwami energetycznymi widocznymi na Rys. 2.6 59
- 2.8 Gęstość dla neutronowych poziomów jednocząstkowych w funkcji deformacji kwadrupolowej (lewy) i tetrahedralnej (prawy). 61
- 2.9 Gęstość Strutinskiego dla neutronowych (lewa kolumna) i protonowych (prawa kolumna) poziomów energetycznych w oknach energetycznych 1.5, 2, 2.5 i 6 MeV ($\Delta E = 1.2 \cdot 41 \cdot A^{-1/3} = 6$ MeV dla $Z=126, N=196$) wokół poziomu Fermiego dla deformacji kwadrupolowej. Z powyższego porównania wnosimy że wartość $g=0.25$ uwypukla w sposób dostatecznie czuły fluktuacje w terminach przesuwania poziomu Fermiego z jednej strony i zmian deformacji kwadrupolowej z drugiej. 64
- 2.10 Podobny do rys. 2.9 ale dla osiowej deformacji oktopolowej. 65
- 2.11 Gęstość Strutińskiego dla neutronowych (lewa kolumna) i protonowych (prawa kolumna) poziomów energetycznych w oknie energetycznym 1.5 MeV ($\Delta E = 0.25 \cdot 41 \cdot A^{-1/3} = 1.5$ MeV dla $Z=126, N=196$) wokół poziomu Fermiego dla wszystkich deformacji oktopolowych: α_{30} , α_{31} , α_{32} i α_{33} 66
- 2.12 Energie jednocząstkowe poziomów nukleonowych w funkcji deformacji tetrahedralnej dla całego obszaru jąder ekstremalnie superciężkich. Kolorem zielonym oznaczone są stany należące do reprezentacji czterowymiarowych, będące właśnie elementem strukturalnie 'egzotycznym' w porównaniu z pozostałymi. W celu ułatwienia czytelności rysunku, krzywe są etykietowane przy pomocy oznaczeń nilssonowskich. Rysunek pokazuje dramatyczne efekty powłokowe przy niezerowych deformacjach tetrahedralnych, w tym, dla liczby protonów $Z=136$ z przerwą energetyczną większą niż ta dla konfiguracji sferycznej przy $Z=126$ oraz dla neutronów przy $N=196$, porównywalna ze sferyczną liczbą magiczną $N=184$ 67
- 2.13 Gęstość Strutińskiego dla neutronowych (lewa kolumna) i protonowych (prawa kolumna) poziomów energetycznych w oknach energetycznych 1.5 MeV w funkcji deformacji tetrahedralnej α_{32} . Oznaczenie 'rep' (IRREPS) odnosi się do numeru reprezentacji i dyskutowane jest w tekście. 68
- 2.14 Energia powłokowa dla neutronów (lewa kolumna) i protonów (prawa kolumna) w funkcji deformacji α_{32} 69
- 2.15 Poziomy energii jednocząstkowych dla neutronów w funkcji deformacji oktahedralnej w okolicach $N=176$. Reprezentacje czterowymiarowe w parzystości dodatniej oznaczone są kolorem jasnozielonym a w parzystości ujemnej kolorem ciemnozielonym. 70

2.16	Gęstość poziomów zgodnie z podejściem Strutińskiego dla neutronowych poziomów energetycznych w oknie energetycznym 1.5 MeV dla $Z=126, N=196$) wokół poziomu Fermiego dla deformacji oktahedralnej.	70
2.17	Podobny do rys. 2.15 ale dla protonów	71
2.18	Podobny do rys. 2.16 ale dla protonów.	71
2.19	Gęstość liczona metodą Strutińskiego dla neutronowych poziomów jedno- cząstkowych w oknie energetycznym 1.5 MeV dla $Z=118$ i $N=176$) wokół poziomu Fermiego dla deformacji oktahedralnej.	72
2.20	Podobny do rys. 2.19 ale dla protonów.	73
2.21	Energia powłokowa dla neutronów (lewa kolumna) i protonów (prawa kolumna) w funkcji deformacji oktahedralnej.	73
2.22	Energia korelacji pairing (górny), energia powłokowa (środkowy) i suma tych energii (dolny) dla neutronów (lewa kolumna) i protonów (prawa kolumna) w funkcji deformacji α_{30}	75
2.23	Podobne do rys. 2.22 ale w funkcji deformacji α_{31}	76
2.24	Podobne do rys. 2.22 ale w funkcji deformacji α_{32}	77
2.25	Podobne do rys. 2.22 ale w funkcji deformacji α_{33}	78
2.26	Energia mikroskopowa dla obszaru jąder z okolicy $Z=90, N=136$. Dyskusja w tekście.	80
2.27	Ilustracja porównawcza skali efektów powłokowych dla izotopów Zr, Yb, Th i jądra superciężkiego $Z=126$ w funkcji deformacji kwadrupolowej. Jądra cen- tralne, dla których diagonalizowano hamiltonian z potencjałem WS wybrane zostały biorąc pod uwagę, że odpowiadające im liczby protonów są tetrahe- dralnymi liczbami magicznymi.	81
2.28	Mapy efektów powłokowych dla izotopów Zr (lewy) i Yb (prawy) w funkcji deformacji oktahedralnej, minimalizowana po deformacji tetrahedralnej. . .	82
2.29	Minima energii mikroskopowej zrzutowane na płaszczyznę (Z,N) dla wszys- tkich obszarów masowych przy założeniu minimalizacji po deformacjach: kwadrupolowej, heksadekapolowej, tetrahedralnej i oktahedralnej. Wyspy stabilności występują dla $Z,N=28, 50, 82, 126$	83
2.30	Wyspy stabilności oszacowane przez badanie efektów powłokowych wynika- jących z deformacji klasycznych i symetrii wyższych rzędów [VIII]. Krop- kowane linie pokazują zakresy jąder znanych eksperymentalnie. Czarne linie wskazują obszary o największym wpływie deformacji egzotycznych (tetrahe- dralnych i oktahedralnych) na energię mikroskopową czyli potencjalne nowe wyspy stabilności. Skopiowane z artykułu [VII].	84
2.31	Energia całkowita dla izotopów $Z=126$ (lewy) i izotonów $N=196$ (prawy) względem parametrów deformacji kwadrupolowej.	86
2.32	Podobny do Rys. 2.31 ale dla deformacji nieosiowej γ dla ustalonego wydłuże- nia jądra $\beta = 0.25$	86
2.33	Podobny do Rys. 2.31 ale w funkcji deformacji tetrahedralnej	86
2.34	Niestabilność oktopolowa dla superdeformacji kwadrupolowej. Mapa energii całkowitej na płaszczyźnie $\alpha_{30}(\alpha_{20})$ z minimalizacją po α_{40} (lewa kolumna) oraz na płaszczyźnie $\alpha_{32}(\alpha_{20})$ z minimalizacją po deformacji oktahedralnej dla $Z = 108, N = 172, Z = 114, N = 164, Z = 118, N = 186$ i $Z = 126, N =$ 196	87

2.35	Eksperymentalne i teoretyczne stosunki energii stanów wzbudzonych oraz wielkość staggeringu między pasmami o stanach z parzystych i nieparzystych spinach (skopiowane z pracy [Bon05] w celu zilustrowania staggeringu poziomów rotacyjnych).	90
2.36	Eksperymentalne (niebieskie kwadraty) i teoretyczne (czerwone kółka) energie rotacyjnych stanów wzbudzonych dla jądra ^{228}Th . Teoretyczne pasmo kwadrupolowe zostało policzone przy deformacji $\alpha_{20} = 0.26$ a pasmo oktopolowe z $\alpha_{30} = 0.12$.	91
2.37	Energie całkowite jądra ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) dla deformacji kwadrupolowej (lewy) i tetrahedralnej (prawy)	91
2.38	Porównanie spin versus częstość obrotu, momentów kinetycznych i dynamicznych dla ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) doświadczalnych i teoretycznych (Theor.), dla deformacji stanu podstawowego (gsb - lewy) i tetrahedralnego (tet - prawy).	93
2.39	Porównanie energii danego poziomu versus spin całkowity – teoretyczny (Theor.) i doświadczalny dla ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) zakładając, że minimalna delta pairing wynosi 0.20 MeV, dla deformacji stanu podstawowego (gsb) i tetrahedralnego (tet).	94
2.40	Porównanie spinów całkowitych (lewy) i momentów kinetycznych (prawy) - teoretycznych (Theor.) i doświadczalnych (gsb) dla ($Z_0 = 90, N_0 = 136$) dla deformacji stanu podstawowego	95
2.41	Częściowy układ poziomów dla izotopów uranu od ^{226}U do ^{238}U pokazujący tylko widmo zbudowane na stanie podstawowym i na pierwszym poziomie o negatywnej parzystości. Różnice energii pomiędzy stanami o ujemnej parzystości są oznaczone na niebiesko. Dane pochodzą z [War96]-[Gre98].	96
3.1	Powierzchnie całkowitej energii potencjalnej zminimalizowane po parametrach deformacji osiowych $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq 12$, dla spinów wokół wartości spinu krytycznego dla przejścia Jacobi'ego w ^{46}Ti (lewa kolumna) i ^{142}Ba (prawa kolumna). Tutaj używamy współrzędnych (β, γ) . Linie proste wyznaczają rodziny kształtów oblate ($\gamma = 60^\circ, -60^\circ$) i prolate ($\gamma = 0^\circ, -120^\circ$).	108
3.2	Powierzchnie różnic całkowitej energii potencjalnej minimalizowanych po osiowych parametrach deformacji $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq 12$ oraz po parametrze deformacji α_{42} : $E(\alpha_{22}) - E(\alpha_{22}, \alpha_{42})$ (lewa kolumna). Prawa kolumna to różnica energii minimalizowanych po α_{42} i energii otrzymanych z minimalizacji po $(\alpha_{42}, \alpha_{62}) - E(\alpha_{22}, \alpha_{42}) - E(\alpha_{22}, \alpha_{42}, \alpha_{62})$, dla spinów wokół wartości spinu krytycznego dla przejścia Jacobi'ego w ^{46}Ti (lewy) i ^{142}Ba (prawy).	109
3.3	Energia całkowita znormalizowana do wartości energii jądra sferycznego, $E_{tot} - E_{LSD}(0)$ ma płszczyźnie β, γ dla ^{132}Ce .	110
3.4	Prawdopodobieństwo kształtu jądra otrzymane z Równ. 3.6 w funkcji parametrów deformacji dla ^{132}Ce i spinów $I = 10 - 80\hbar$ i temperaturze $T = 2$ MeV.	111
3.5	Efektywne funkcja nasilenia GDR dla ^{132}Ce i spinów $I = 10 - 80\hbar$.	111
3.6	Efektywna funkcja nasilenia GDR dla ^{46}Ti przy spinach $I = 20 - 30\hbar$ (lewy) i $I = 28 - 34\hbar$ (prawy). Wartości eksperymentalne są wzięte z prac odpowiednio: [Bre07] i [Kmi07].	112
3.7	Szerokość połówkowa funkcji nasilenia GDR, $\Gamma_{1/2}$, dla temperatur $T = 0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0$ w funkcji krętu (lewy) oraz szerokości eksperymentalne GDR [Wie06] i przewidywania teoretyczne w funkcji temperatury (prawy) dla ^{132}Ce	113

3.8	Nasilenie GDR w funkcji E_γ dla ^{147}Eu ; eksperymentalne (punkty, [Kmi00]) i teoretyczne (rysunek wykonany na potrzeby pracy [Mat07]).	114
3.9	Funkcje nasilenia GDR dla ^{106}Sn i spinów $50\hbar$, $56\hbar$ i $60\hbar$ liczone z różnymi wyrażeniami na parametr gęstości poziomów jądrowych a : 1) $(A/8)$, 2) Ignatyuk [Ign75] (ign) i 3) Pomorski [Pom07] (pom).	115
3.10	Średnia szerokość połówkowa GDR dla ^{106}Sn w funkcji spinu jądra, przy stałych wartościach parametru gęstości $(A/8)$, oraz z parametryzacjami Ignatyuk (ign) i Pomorski (pom). Dla porównania pokazane są wyniki nie uśredniane z $a = A/8$ (szczegóły w [VI]).	116
3.11	Ewolucja średniego wydłużenia jądra w temperaturze $T=2$ MeV dla ^{106}Sn w funkcji spinu jądra, przy stałych wartościach parametru gęstości $(A/8)$, oraz z parametryzacjami Ignatyuk (ign) i Pomorski (pom).	117
3.12	Średnia szerokość połówkowa GDR dla ^{132}Ce w funkcji temperatury, przy stałych wartościach parametru gęstości $(A/8)$, oraz z parametryzacjami Ignatyuk (ign) i Pomorski (pom). Dla porównania pokazane są wyniki nie uśredniane z $a = A/8$ ($A/8, \text{cut}$).	118
3.13	Składowe funkcje nasilenia GDR (lewy) i współczynnik anizotropii całkowany po całej płaszczyźnie deformacji dla spinu $46\hbar$ dla ^{132}Ce i $\Gamma=4.5$ MeV.	119
3.14	Powierzchnie całkowitej energii potencjalnej minimalizowane po osiowych parametrach deformacji $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq 12$, dla spinów wokół wartości spinu krytycznego dla przejścia Jacobi'ego w ^{88}Mo . Tutaj używamy współrzędnych α_{20} i α_{22} zaadoptowanych do dyskusji kolektywnych ruchów jądra.	125
3.15	Współczynniki sztywności powierzchni energii, $C_x \equiv C_{\alpha_{20}}$ i $C_y \equiv C_{\alpha_{22}}$ otrzymane poprzez zrzutowanie powierzchni energii całkowitej takiej jak na Rys. 3.14 i równanie (3.88).	127
3.16	Oszacowane pomocnicze wartości energii wibracji otrzymane z przybliżenia harmonicznego przy pomocy równania $E_{vib;x,y} = \sqrt{C_{x,y}/B_{irr}}$, cf. równ. (3.88)-(3.89).	128
3.17	Statyczne wartości osiowego parametru deformacji kwadrupolowej α_{20} (koła)brane w minimum energii całkowitej i średnie dynamiczne deformacje kwadrupolowe $\sqrt{\langle \alpha_{20}^2 \rangle}$, (kwadraty). Pionowe kreski pokazują odchylenie $\pm\sigma$ (lewy) i $\pm 3\sigma$ (prawy) wokół centroidy.	128
3.18	Ilustracja podobna do Rys. 3.17 ale dla nieosiowego parametru deformacji α_{22}	129
3.19	Czerwona ciągła linia pokazuje średnią wartość parametru wydłużenia jądra $\langle \beta \rangle$, zielona, przerywana to odchylenie $\langle \beta \rangle + \sigma$ (lewy) i $\langle \beta \rangle + 3\sigma$ (prawy) a cienka, niebieska to odchylenie $\langle \beta \rangle - \sigma$ (lewy) i $\langle \beta \rangle - 3\sigma$ (prawy)	129
3.20	Ilustracja podobna do Rys. 3.19 ale dla nieosiowego parametru deformacji γ	129
4.1	Powierzchnie energii LSD-C dla ^{128}Ba na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{30})$ (lewy, górny), $(\alpha_{20}, \alpha_{31})$ (prawy, górny), $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ (lewy, dolny) and $(\alpha_{20}, \alpha_{33})$ (prawy, dolny) zminimalizowane po α_{40}	132
4.2	Powierzchnie energii LSD-C dla ^{128}Ba na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{30})$ (górze), i $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ (dół) zminimalizowane po α_{40} (prawy) i $\alpha_{40}, \alpha_{41}, \alpha_{42}, \alpha_{43}, \alpha_{44}$ (lewy).	133
4.3	Promienie szyjki w funkcji parametru wydłużenia jądra dla $^{64,94}\text{Se}$ i $^{202,228}\text{Ra}$. Skopiowany z [XIX]	134

- 4.4 Wysokości barier na rozszczepienie otrzymane z (linie przerywane) i bez (linie ciągłe) użycia energii kongruencji, przy czym czynnik rozmycia szyjki to $a_{neck} = 0.5$. Skopiowany z [XIX] 136
- 4.5 Przejście Jacobi'ego: powierzchnie energii LSD na płaszczyźnie (β, γ) dla ^{142}Ba przy spinach: 70, 76, 82, 88, 94 i 100 \hbar ; wyniki minimalizacji po parametrach deformacji $(\alpha_{40}, \alpha_{60})$. Parametrem nieosiowości jest tutaj γ , a klasycznie zdeformowane jądro typu oblate rotujące wokół swojej osi symetrii odpowiada $\gamma = +60^\circ$ (pionowa, dodatnia oś). Ilustracja wzięta z [XIII]. 138
- 4.6 Przejście Poincarégo: powierzchnie energii LSD na płaszczyźnie $(\alpha_{20}, \alpha_{30})$ -liczone dla spinów takich jak Rys. 4.5 ale przy minimalizacji po parzystych i nieparzystych parametrach deformacji $(\alpha_{40}, \alpha_{50}, \alpha_{60}, \alpha_{70}$ and $\alpha_{80})$. Ilustracja wzięta z [XIII]. 139
- 4.7 Zależność od krętu różnorodnych deformacji jądrowych policzonych dla ^{142}Ba : parametru deformacji β , i $\alpha_{30}-\alpha_{80}$ (góra), parametru deformacji trójosiowej γ (dół); $\gamma = 0^\circ$ odpowiada kształtom prolate-, a $\gamma = 60^\circ$ to deformację kwadrupolową typu oblate. Ilustracja wzięta z [XIII]. 140
- 4.8 Kształty jądra w pozycji równowagi dla różnych momentów pędu dla ^{142}Ba , odpowiadające zestawom wartości parametrów deformacji z Rys. 4.6. Ilustracja wzięta z [XIII]. 141
- 4.9 Lewy: spin jądra w funkcji częstość obrotów liczona z modelem LSD dla ^{142}Ba . Prawy: przewidywania zależności spinowej dla energii gamma E2 (od spinu I+2 do spinu I). Skopiowane z [XIII]. 142
- 4.10 Podobne do Rys. 4.7 ale dla $^{116,128,142,152}\text{Ba}$. Poziome linie oznaczają spiny, dla których bariera na rozszczepienie jest mniejsza od 8 lub 3 MeV. Skopiowane z [XVI]. 143
- 4.11 Podobny do Rys. 4.9 ale dla $^{116,128,142,152}\text{Ba}$. Skopiowane z [XVI]. 143
- 4.12 Zależność energii liczonej z wyrażenia LSD-C z $a_{neck} = 0.5$ dla dużych wydłużeń i spinu $L = 0 \hbar$ w funkcji obciążenia bazy. Energie zostały zminimalizowane po deformacjach $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq \lambda_{max}$ napisanych w polu rysunków. Aby zwiększyć czytelność ilustracji, odjęto funkcję liniową, jak wskazano w opisie na osi pionowej. Krzywe zatrzymują się na deformacji, dla której $R_{neck} < 0.3 \cdot R_0$ 144
- 4.13 Zależność minimum energii od obciążenia bazy parametrów deformacji λ_{max} w funkcji wzrastającego spinu. Minimalizowano po parametrach deformacji $\alpha_{\lambda 0}$ dla $\lambda \leq \lambda_{max}$. Energie makroskopowe zawierają energię kongruencji zależną od kształtu z $a_{neck} = 0.5$. Krzywe kończą się albo jeśli warunek rozerwania jest spełniony ($R_{neck} < 0.3 \cdot R_0$) dla niższego spinu niż spin, dla którego bariera znika, albo przy spinie, gdzie bariera zniknęła. Stabilność została uzyskana dla $\lambda_{max} = 8$ 144
- 4.14 Test dobroci obciążenia liczby parametrów deformacji poprzez obserwację zmian kształtu jądra w okolicy szyjki dla wydłużenia $\alpha_{20} = 2$. (lewy, góra) i $\alpha_{20} = 2.5$ (prawy, góra) dla ^{70}Se . Pozostały obszar dla wszystkich zestawów parametrów deformacji się pokrywa. Zestawy wartości parametrów deformacji użyte do wyrysowania kształtów są otrzymane po minimalizacji dla ^{70}Se przy $\alpha_{20} = 2.5$ (prawy), oraz przy $\alpha_{20} = 2$. (lewy). 145

- 4.15 Różnica energii otrzymanych w zależności od liczby parametrów deformacji użytych do minimalizacji energii. Obniżenie energii przy minimalizacji po wszystkich parametrach deformacji osiowych aż do $\lambda=10$ w stosunku do energii, gdy minimalizowane są tylko deformacje do $\lambda=8$, jest o około rząd wielkości większe w stosunku do dołożenia jeszcze dwóch parametrów deformacji: $\lambda=11$ i 12 145
- 4.16 (Lewa kolumna) Zmiana rozmiaru szyjki w zależności od liczby parametrów deformacji użytych do minimalizacji energii dla ^{70}Se , ^{98}Mo i ^{173}Lu . Proste oznaczają wartości deformacji, gdzie następuje zmiana wartości energii otrzymanej poprzez minimalizację po różnych zestawach parametrów. (Prawa kolumna) Różnica promieni szyjki otrzymanych przy minimalizacji po zbiorach parametrów deformacji. 146
- 4.17 Rysunek podobny do 4.15 ale dla ^{70}Se (górze), dla ^{90}Mo (środek) i dla ^{173}Lu (dół) przy spinie $I=0$ i $50 \hbar$ 147
- 4.18 Przykład ewolucji kształtu profili energii wraz ze wzrostem spinu dla deformacji oktapolowej α_{30} dla ^{142}Ba . Do spinu $82 \hbar$ profile mają kształt paraboliczny, czyli deformacja jądra w minimum energii była odbiciowo symetryczna, a dla większych spinów pojawiają się potencjał dwudolkowy z minimami energii dla $\alpha_{30} \neq 0$ 154
- 4.19 Funkcje falowe wzbudzeń zerowego (czerwony), pierwszego (zielony), drugiego (niebieski) i trzeciego (różowy) rzędu dla spinu $82 \hbar$ i $94 \hbar$ dla ^{142}Ba . Krzywe pomarańczowe pokazują profil energii dla danego spinu (oś prawa). 154
- 4.20 Ewolucja parametru deformacji oktapolowej α_{30} ze wzrostem spinu. Deformacja statyczna odpowiada kształtom w minimum energii potencjalnej a deformacja dynamiczna jest zdefiniowana jako $\bar{\alpha}_{30}$, Równanie (3.47). . . . 155
- 4.21 Asymetria masowa lżejszego fragmentu rozszczepienia (A_1/A) dla trzech wartości wydłużenia jądra złożonego: $\alpha_{20} = 2.0$; 2.5 i 3.0 dla jądra ^{98}Mo . Krzywe zostały otrzymane dla spinu ($L=0$) przy minimalizacji po parametrach deformacji $\alpha_{\lambda 0}$ aż do $\lambda \leq 12$ 155
- 4.22 Mikroskopowe gęstości protonów i neutronów w jądrze zdeformowanym dla różnych wydłużeń i niezerowego parametru deformacji oktapolowej. 157
- 4.23 Ewolucja liczby protonów i neutronów we fragmentach rozszczepienia i szyjce z wydłużeniem. Zestawy parametrów są wzięte z minimalizacji energii makroskopowej przy spinie $I=80 \hbar$ dla ^{142}Ba 157
- 4.24 Kształt jądra ^{142}Ba przy spinie $80 \hbar$ w minimum energetycznym. Kolorowe elipsy znaczą przykładowo obszary przyszłych fragmentów (zielony i czerwony) i kształt z minimum energetycznego jądra kwadrupolowo zdeformowanego (niebieski). 158
- 4.25 Dyskusja definicji punktu rozerwania. Suma spinów fragmentów rozszczepienia skorelowana z ładunkiem lżejszego fragmentu w reakcji $^{40}\text{Ar}(280 \text{ MeV}) + ^{58}\text{Ni} \rightarrow ^{98}\text{Pd}$ [Mor89]. 159
- 4.26 Funkcje nasilenia GDR dla jąder $^{116,142}\text{Ba}$ przy temperaturze 1 MeV . Kolory krzywych są skorelowane z obszarami na Rys. 4.24. Różowe krzywe to złożenie funkcji nasilenia pochodzących z fragmentów i z średniego kształtu jąder z takimi samymi wagami. 160

- 4.27 Statyczne oszacowanie krytycznych przedziałów spinów dla przejść Jacobi'ego (czerwony kolor) i Poincaré'go (zielony kolor) przy założeniu, że rozszczepienie następuje dla bariery $B_f=0$ MeV (lewy) i $B_f>3$ MeV (prawy). . . . 161

Spis tablic

- 2.1 Porównanie doświadczalnych [Art97] i teoretycznych dla ($Z_0 = 90, N_0 = 138$) energii poziomów z pasma rotacyjnego. $\Delta E(L)$ to względne przesunięcie poziomów o parzystości ujemnej i dodatniej, eksperymentalne (*exp*) i teoretyczne (*TH*). 92
- 3.1 Podobieństwa między klasycznym i kolektywnym oscylatorem harmonicznym. 121
- 3.2 Parametry masowe z modelu przepływu bezwirowego B_{irr} obliczone z $B_{irr} = 2/15MAR_0^2$ and $R_0 = r_0A^{1/3}$, $r_0 = 1.2$ fm oraz Energie wibracji dla spinu $L = 0$ policzone przy pomocy modelu LSD-C. 126
- 4.1 Porównanie wysokości barier dla szeregu jąder. Kolumny zawierają: wartości eksperymentalne (Exp), referencje do artykułów (Ref), wyniki dla LSD bez energii kongruencji oraz z energią kongruencji zaproponowaną przez Myersa i Święteckiego (C. M.-S.), [Mye96]. Ostatnie trzy kolumny przedstawiają wyniki otrzymane przy założeniu, że czynnik rozmycia szyjki wynosi: $a_{neck} = 0.5, 1.0$ i 1.5 . (Tabela pochodzi z pracy [XIX]). 135

