

EKSTRAPOLACIJSKE METODE OSCILATORSKE BAZE U MODELIMA SREDNJEG POLJA

IGOR NOVAK
PMF-FO

MENTORICA: IZV. PROF. DR. SC. TAMARA NIKŠIĆ

UVOD

- razvoj u bazi harmoničkog oscilatora se često koristi u računima nuklearne strukture jer dozvoljava iskorištavanje svih simetrija nuklearnog problema mnoštva čestica
- u praksi moguće koristiti samo konačnu bazu, stoga dobiveni rezultati uvijek donekle ovise o dimenziji baze
- ekstrapolacija rezultata prema potpunoj bazi
- u seriji nedavnih radova izvedeni su jednostavni analitički izrazi za korekcije očekivanih vrijednosti energija i radijusa sustava
- analizirali i testirali predloženi model
 - jednostavni primjer Schrödingerove jednačbe s jednim stupnjem slobode,
 - Diracova jednačba
 - realistični proračuni svojstava osnovnog stanja većeg broja sfernih atomskih jezgara

TEORIJSKA POZADINA

- polazna točka razmatranja je Schrödingerova jednačina

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

- najčešće moramo rješavati numerički
- *shooting* metoda
- alternativna metoda je razvoj valne funkcije po potpunom skupu stanja

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(t)\varphi_k(\vec{r}) \quad \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

- u trodimenzionalnom sfernosimetričnom slučaju oscilatorske valne funkcije su:

$$\varphi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{N_{nl}}{\sqrt{b_0^3}} \xi^l L_n^{l+1/2}(\xi^2) e^{-\xi^2/2} \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \xi = r/b_0$$

$$b_0 = \sqrt{\hbar/M\omega_0}$$

- u principu bi trebalo uzeti u obzir sva stanja baze, no u praktičnim računima je to nemoguće pa se baza reže nakon nekog konačnog broja oscilatorskih ljusaka N_{max}
- ovisnost rješenja o korištenoj dimenziji baze
- moguće rješenje ovog problema predloženo je u:
R. J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, *Corrections to nuclear energies and radii in finite oscillator spaces*, Phys. Rev. C 86, 031301(R) (2012)
- rezultati dobiveni upotrebom konačne baze ekstrapoliraju, odnosno izvedu se korekcije pojedinih observabli

- promatramo česticu zarobljenu unutar konačne prostorne dimenzije tj. “kutije”
- prostorna dimenzija “kutije” odgovara prostornom rasponu oscilatorske baze te imamo Dirichletove rubne uvjete.
- promatramo prostor oscilatorskih valnih funkcija maksimalne oscilatorske energije $E = \hbar\omega(N + 1/2)$
- izabрати $\hbar\omega$ i N takve da odsječak impulsa korištene interakcije bude manji od ultraljubičastog impulsa i radijus sustava manji manji od radijalne granice

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

$$L_0 \equiv \sqrt{2(N + 1/2)}b \longrightarrow \begin{array}{l} \text{asimptotska procjena !} \\ \text{klasična točka obrata} \end{array}$$

- najbolja procjena konačne dimenzije oscilatorske baze

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

- uz Dirichletov rubni uvjet na radijusu $r=L$ energiju i radijus možemo izraziti kao

$$E_L = E_\infty + \Delta E_L \qquad \langle r^2 \rangle = \langle r^2 \rangle_\infty + \Delta \langle r^2 \rangle_L$$

- $u_E(r)$ radijalno rješenje s regularnim rubnim uvjetom u ishodištu i energijom E
- linearna aproksimacija (za $r \leq L$)

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

- uz primjenu rubnih uvjeta

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

- uz korištenje asimptotskih izraza za r veći od raspona potencijala R

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

$$u_\infty \xrightarrow{r \gg R} A_\infty e^{-k_\infty r} \text{ za } E = E_\infty$$

i izraza za korekciju radijusa

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

dobivamo glavne izraze

$$E_L = E_\infty + a_0 e^{-2k_\infty L}$$

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

$$\beta \equiv 2k_\infty L$$

- teorije srednjeg polja imaju široku primjenu u fizici u opisu interakcije sustava mnoštva čestica
- osnovna ideja - interakcija jedne čestice sa svim ostalim opiše preko srednjeg potencijala kojeg stvaraju sve ostale čestice

$$U(\vec{r}_i) = \sum_j V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \mapsto U[\rho(\vec{r}_i)] \quad \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{i=1}^A |\psi_i(\mathbf{r}, t)\rangle \langle \psi_i(\mathbf{r}', t)|$$

- naći točan funkcional gustoće koji minimizira mnogočestični hamiltonijan
- potrebno je odrediti energiju i gustoću osnovnog stanja - samosuglasnim rješenjima relativističkih Kohn-Sham jednadžbi za jedan nukleon
- jednadžba gibanja za gustoću jednočestičnih stanja dobiva se iz funkcionala energije vremenski ovisnim varijacijskim principom

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

- pretpostavka da su nukleoni gotovo nezavisne čestice koje se gibaju u srednjem potencijalu
- ukupna se valna funkcija jezgre može napisati kao produkt jednočestičnih valnih funkcija
- valna funkcija jezgre mora biti antisimetrična
- Hartree-Fockova aproksimacija
- suvremeni relativistički modeli srednjeg polja (RMF) daju dobre rezultate, a posjeduju i određene prednosti nad nerelativističkim modelima

$$|\phi\rangle = a_{\psi_1}^\dagger a_{\psi_2}^\dagger \cdots a_{\psi_A}^\dagger |0\rangle$$

NUMERIČKA IMPLEMENTACIJA MODELA

TESTOVI NA JEDNODIMENZIONALNOM MODELU

- testiran na jednostavnom jednodimenzionalnom potencijalu (tzv. *toy* modelu) za koji se Schrödingerova jednačba može riješiti do željene preciznosti
- cilj je provjeriti i ilustrirati neke glavne karakteristike metode ekstrapolacije
- *container* potencijal - vrlo sličan srednjem polju u atomskoj jezgri

$$V(x) = V_0 \frac{\tanh\left(\frac{x-a}{\sigma}\right) - \tanh\left(\frac{x+a}{\sigma}\right)}{2 \tanh\left(\frac{a}{\sigma}\right)}$$

- uspoređeni su dobiveni rezultati energija i kvadrata očekivane vrijednosti položaja za različite duljine baze s relacijama

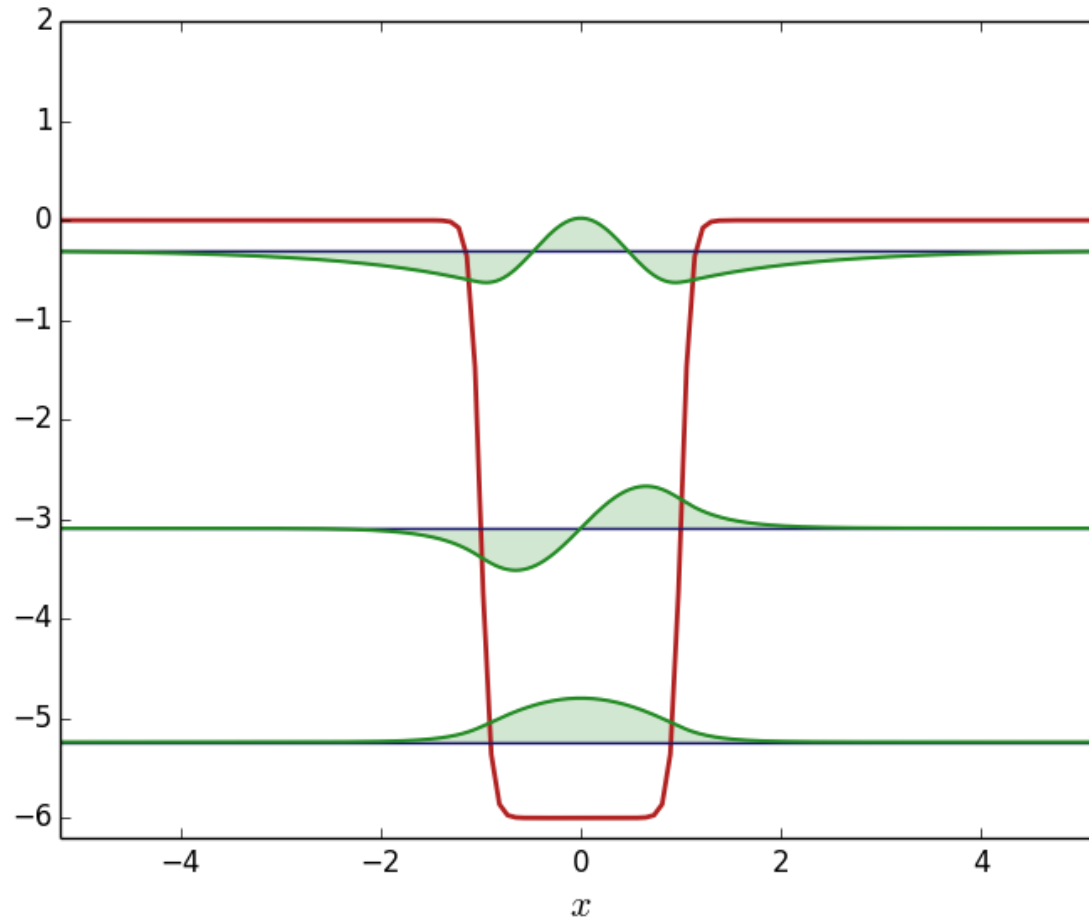
$$E_L = E_\infty + a_0 e^{-2k_\infty L_2}$$

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

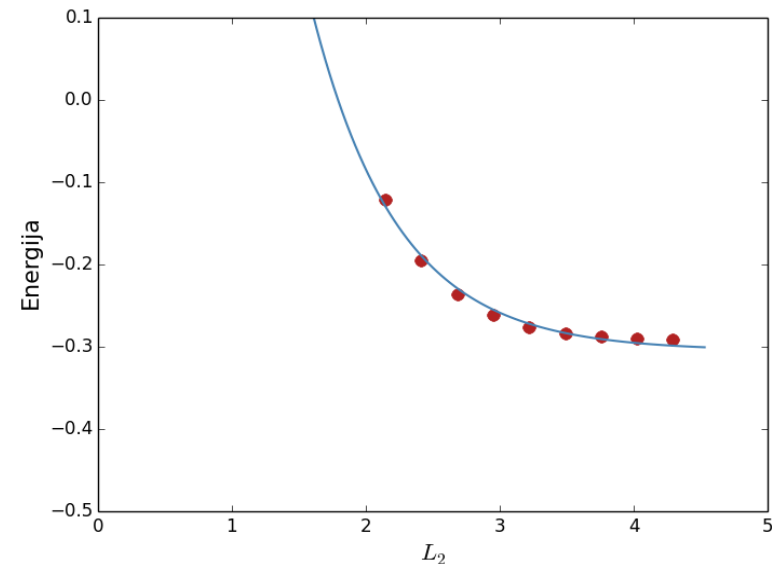
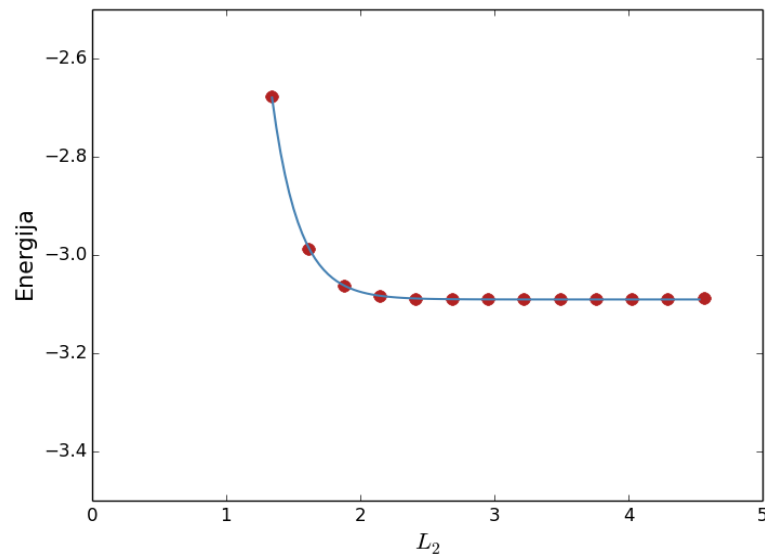
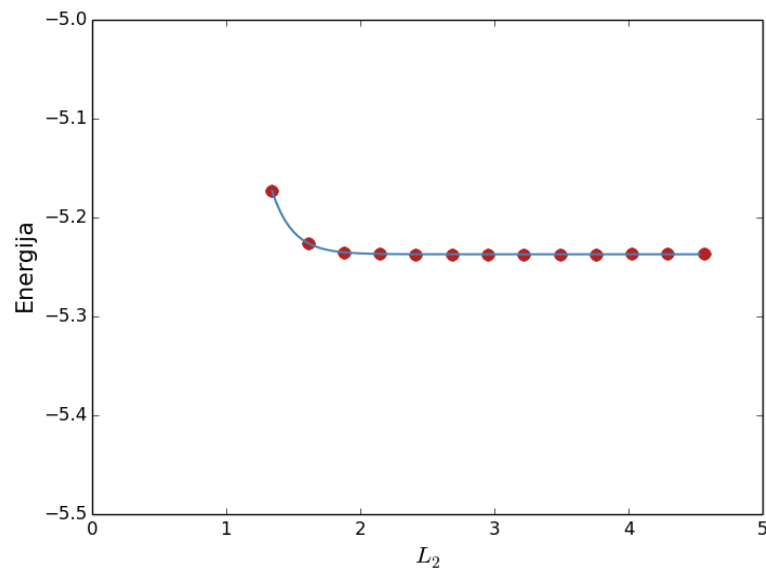
$$\beta = 2k_\infty L_2$$

$$k_\infty = \sqrt{-2mE_\infty/\hbar^2}$$

- fiksiramo broj ljusaka na $N_{sh} = 20$ i mijenjamo oscilatorsku duljinu



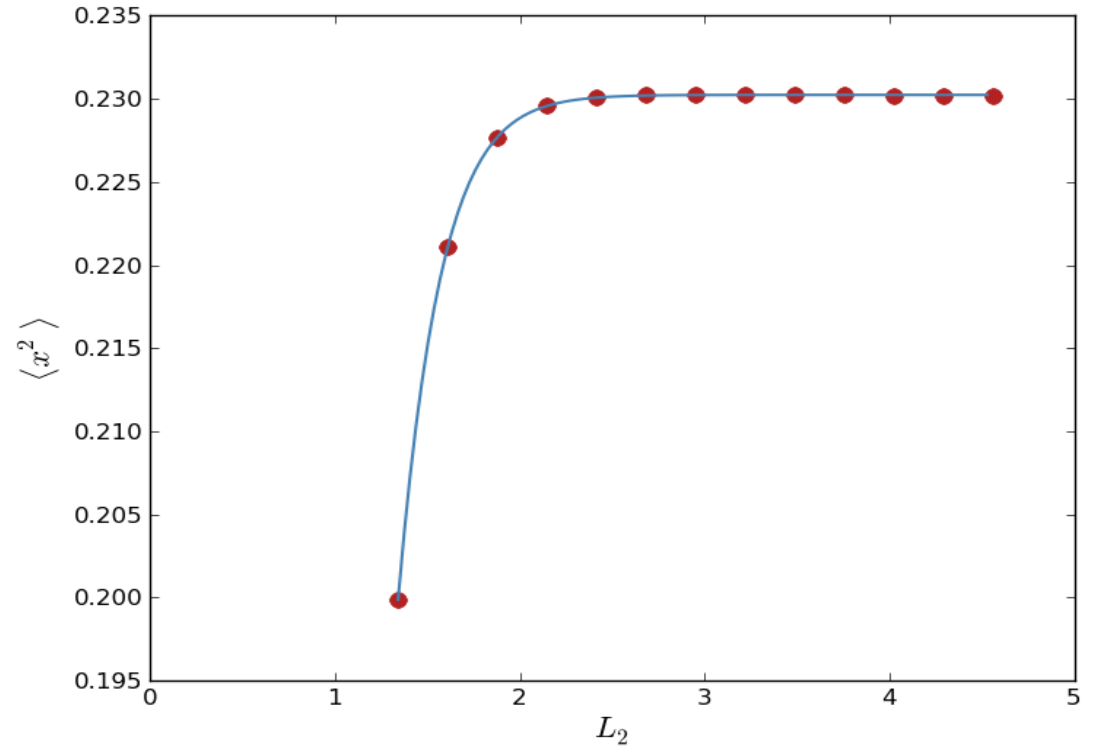
Slika 1: Prikaz *container* potencijala dubine $V_0 = 6$, širine $a = 1$ i strmine $\sigma = 0.1$. Potencijal podržava tri vezana stanja koja su također prikazana na slici.



Slika 2: Rezultati prilagodbe energija vezanih stanja *container* potencijala.

- prilagodba daje dobre rezultate za sva tri vezana stanja
- energije dobivene prilagodbom iznose se u potpunosti slažu s numeričkim rezultatima dobivenima diskretizacijom Schrödingerove jednačbe ili *shooting* metodom

- rezultat za kvadrat položaja slaže se s numeričkim rezultatima dobijenima diskretizacijom Schrödingerove jednačbe ili *shooting* metodom
- ekstrapolacija preciznija za pliće jame jer tada nisu toliko izraženi efekti UV kontaminacije
- smanjivanjem raspona parametra L_2 , odnosno oscilatorske duljine, možemo izbjeći UV kontaminaciju, no tada na raspolaganju imamo manje točaka za prilagodbu

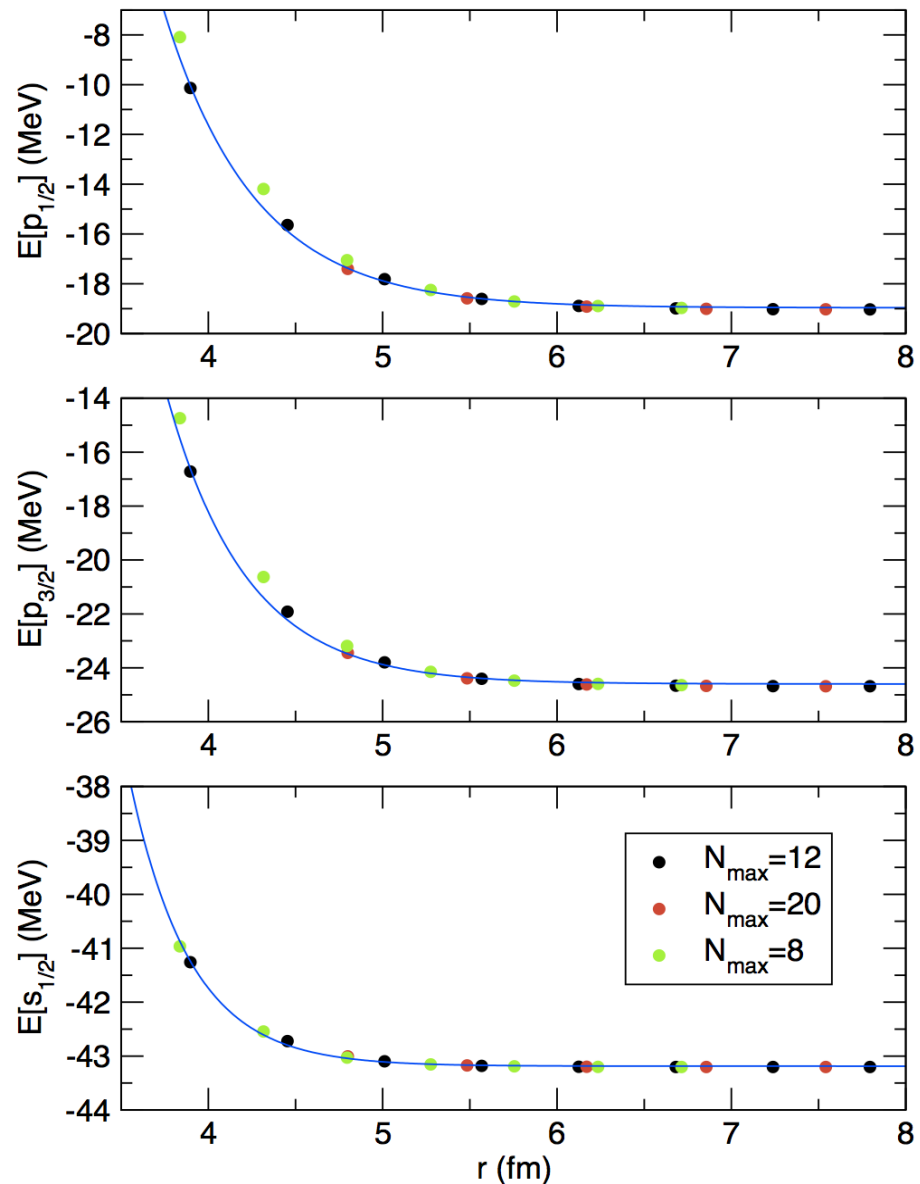


Slika 3: Rezultati prilagodbe kvadrata položaja osnovnog stanja *container* potencijala.

NUMERIČKA IMPLEMENTACIJA MODELA TEST NA DIRACOVOJ JEDNADŽBI

- numerički test proveden na Diracovoj jednadžbi za Woods-Saxon potencijal čiji su parametri prilagođeni jezgri ^{16}O
- Diracova jednadžba je riješena razvojem u bazi sferno-simetričnog harmoničkog oscilatora s $Nsh=8$, $Nsh=12$ i $Nsh=20$ ljusaka

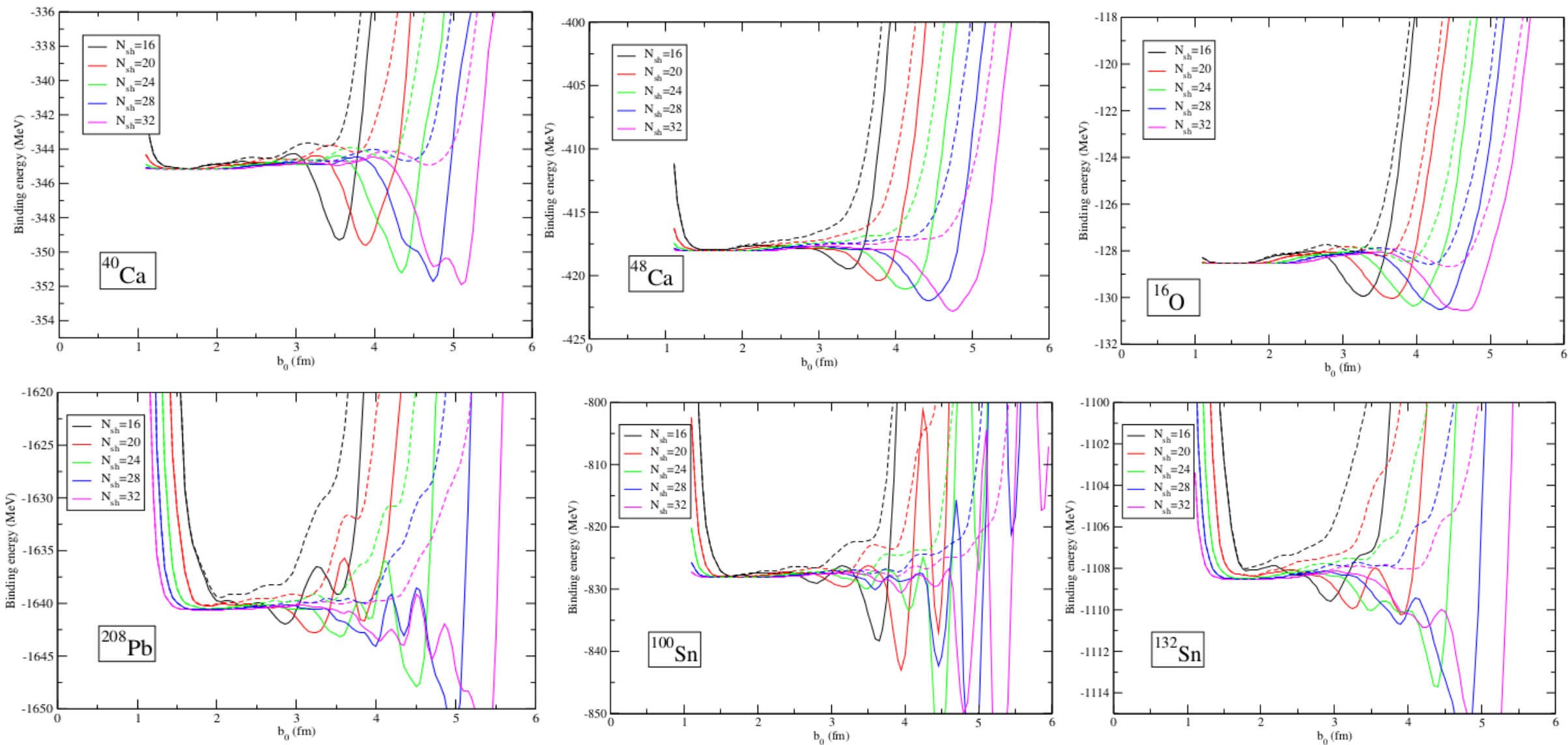
Slika 4: Rezultati prilagodbe vezanih stanja sferno-simetričnog Woods-Saxon potencijala čiji parametri su prilagođeni jezgri ^{16}O .



- Prilagodba je napravljena koristeći podatke za $Nsh=12$ ljusaka i vezu

$$k_{\infty} = \sqrt{-2mE_{\infty}/\hbar^2}$$

- dobivena funkcionalna ovisnost dobro opisuje i podatke za $Nsh=8$ te $Nsh=20$ ljusaka



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

- problem pri visokim vrijednostima konstante oscilatorske duljine
- u UV limesu pojavljuju se novi, niži minimumi zbog čega prilagodba nije dobra i ekstrapolacija ne daje dobru vrijednost energije osnovnog stanja
- uzrok problema nalazi se u razvoju malih komponenti Diracova spinora

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

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

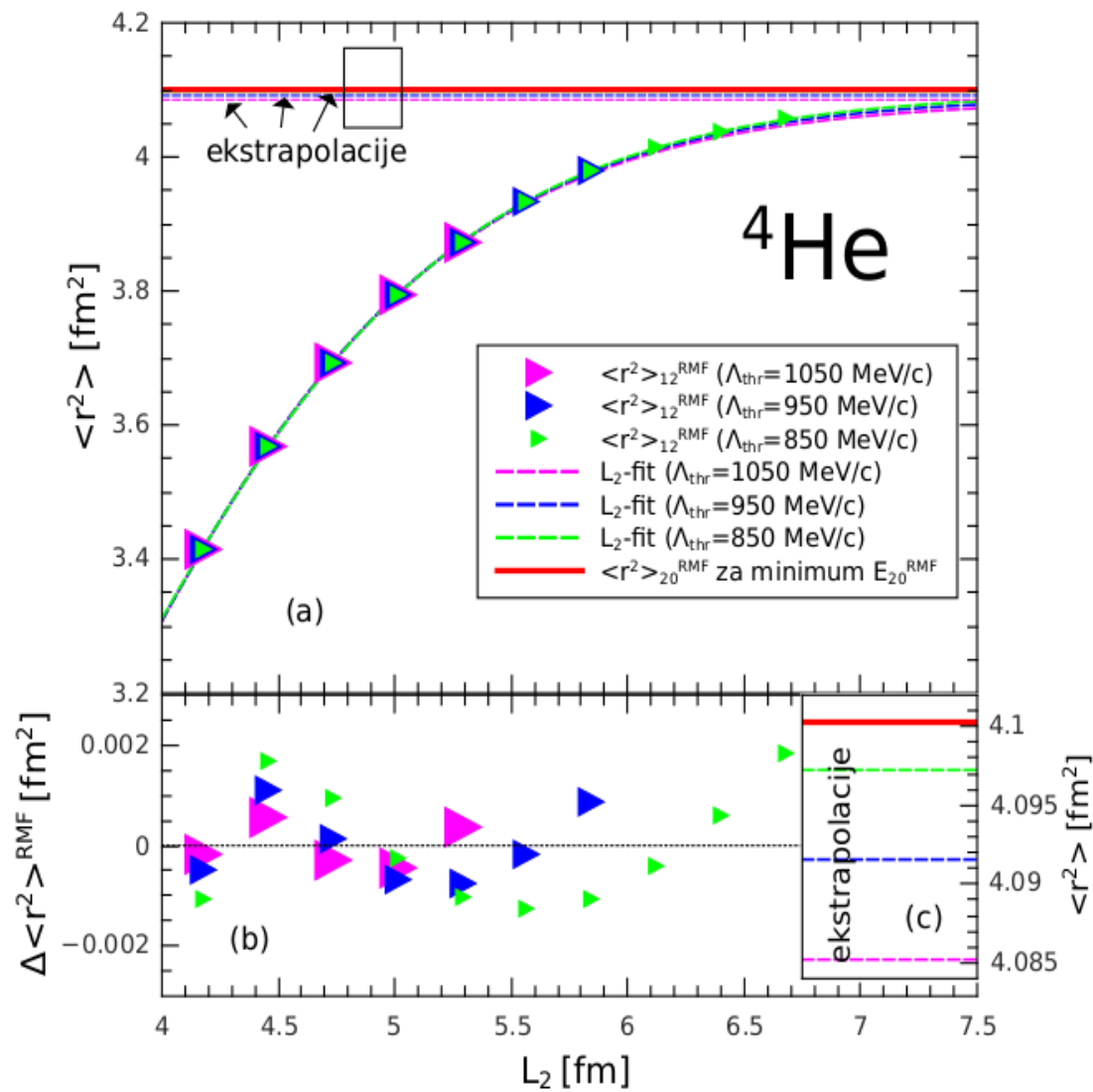
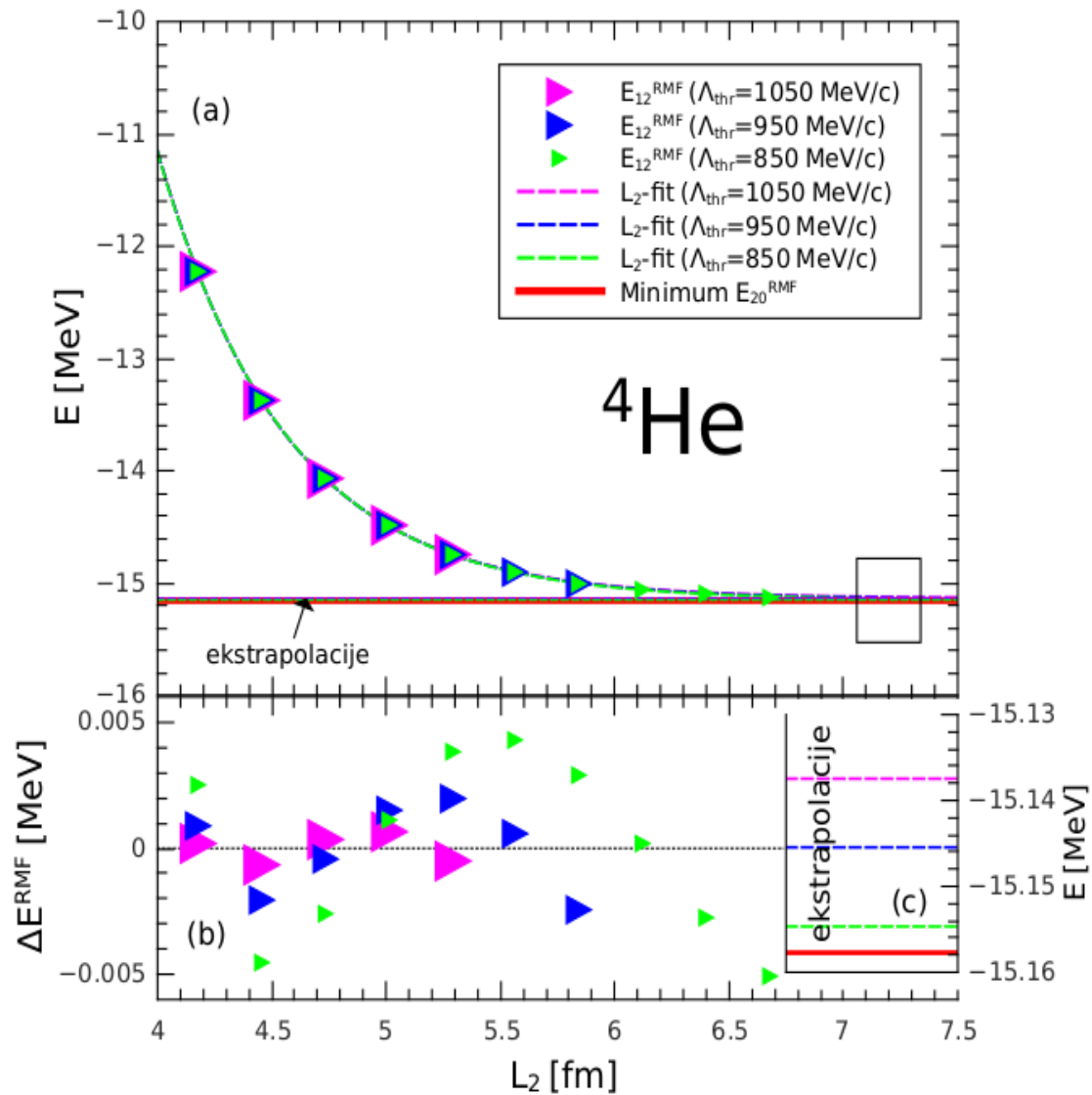
$$N_{max} = 2n_{max} + l_i$$

$$\tilde{N}_{max} = 2\tilde{n}_{max} + \tilde{l}_i$$

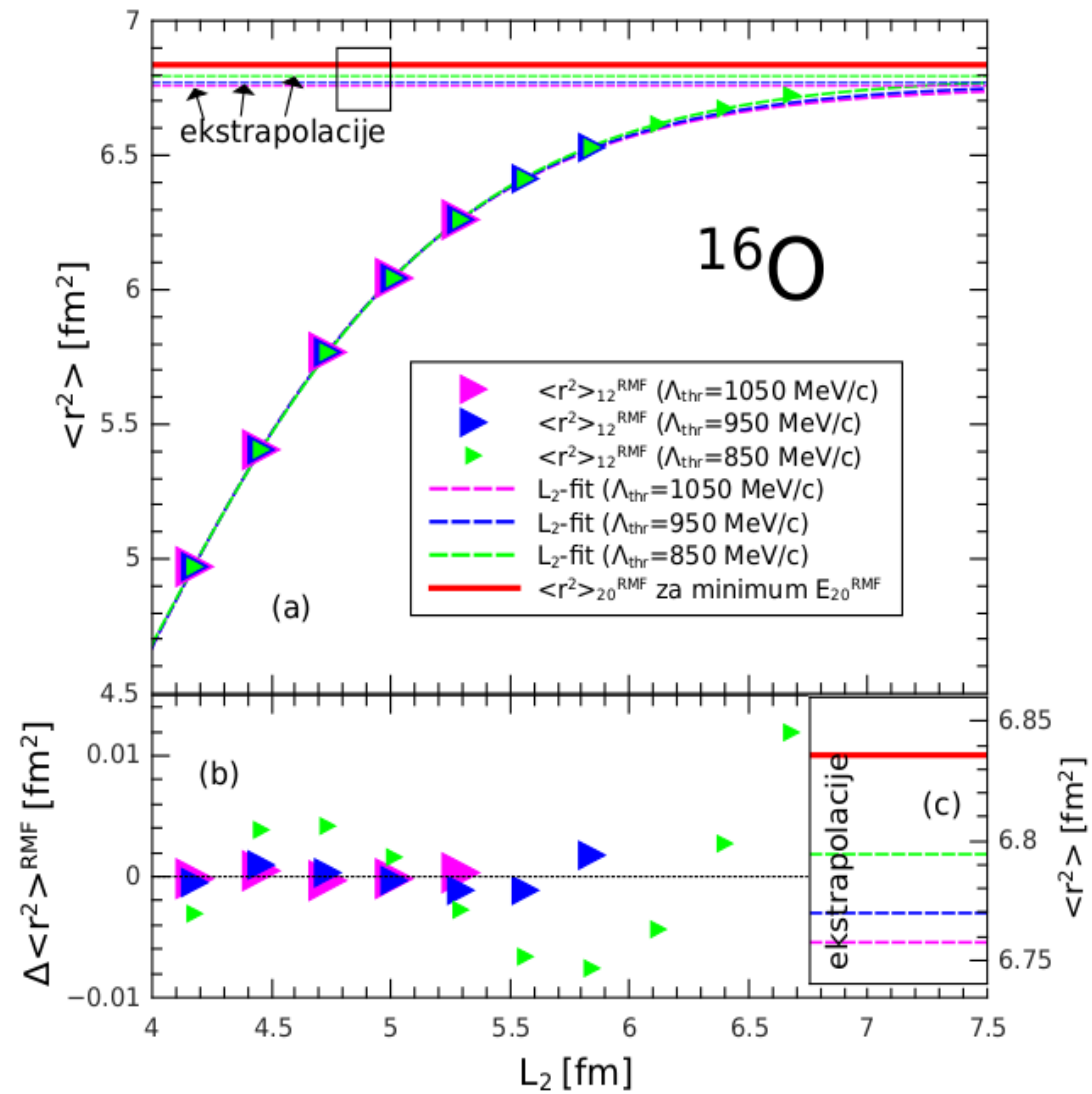
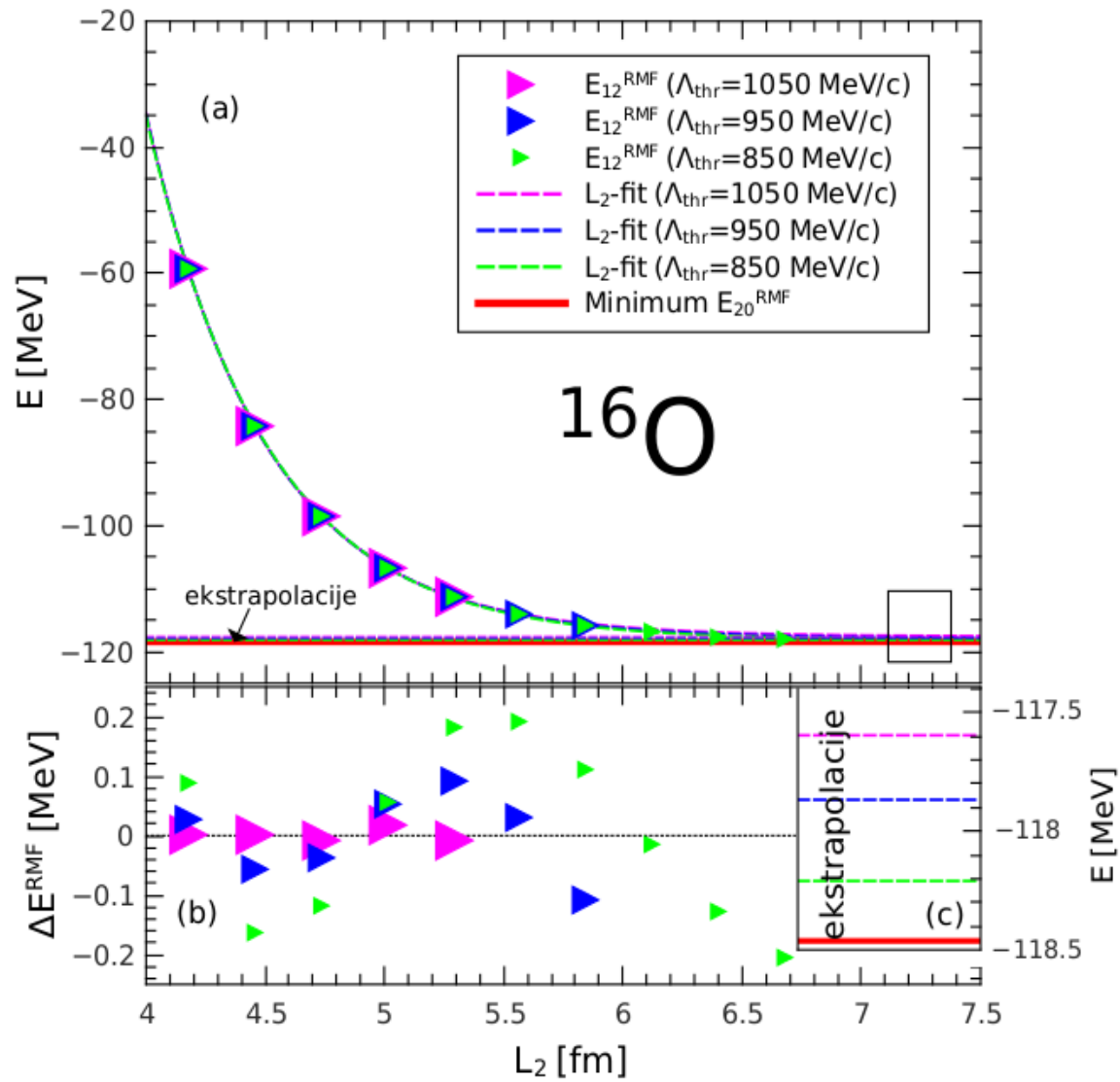
- problem nastaje rezanjem baze zbog čega se miješaju rješenja pozitivnih i negativnih energija
- u razvojima za koje vrijedi pronalaze “spuriozna” stanja s velikim brojem čvorova u blizini Fermijeve površine
- ovaj problem javlja se samo u UV području

NUMERIČKA IMPLEMENTACIJA MODELA PRIMJENA U REALISTIČNIM RAČUNIMA

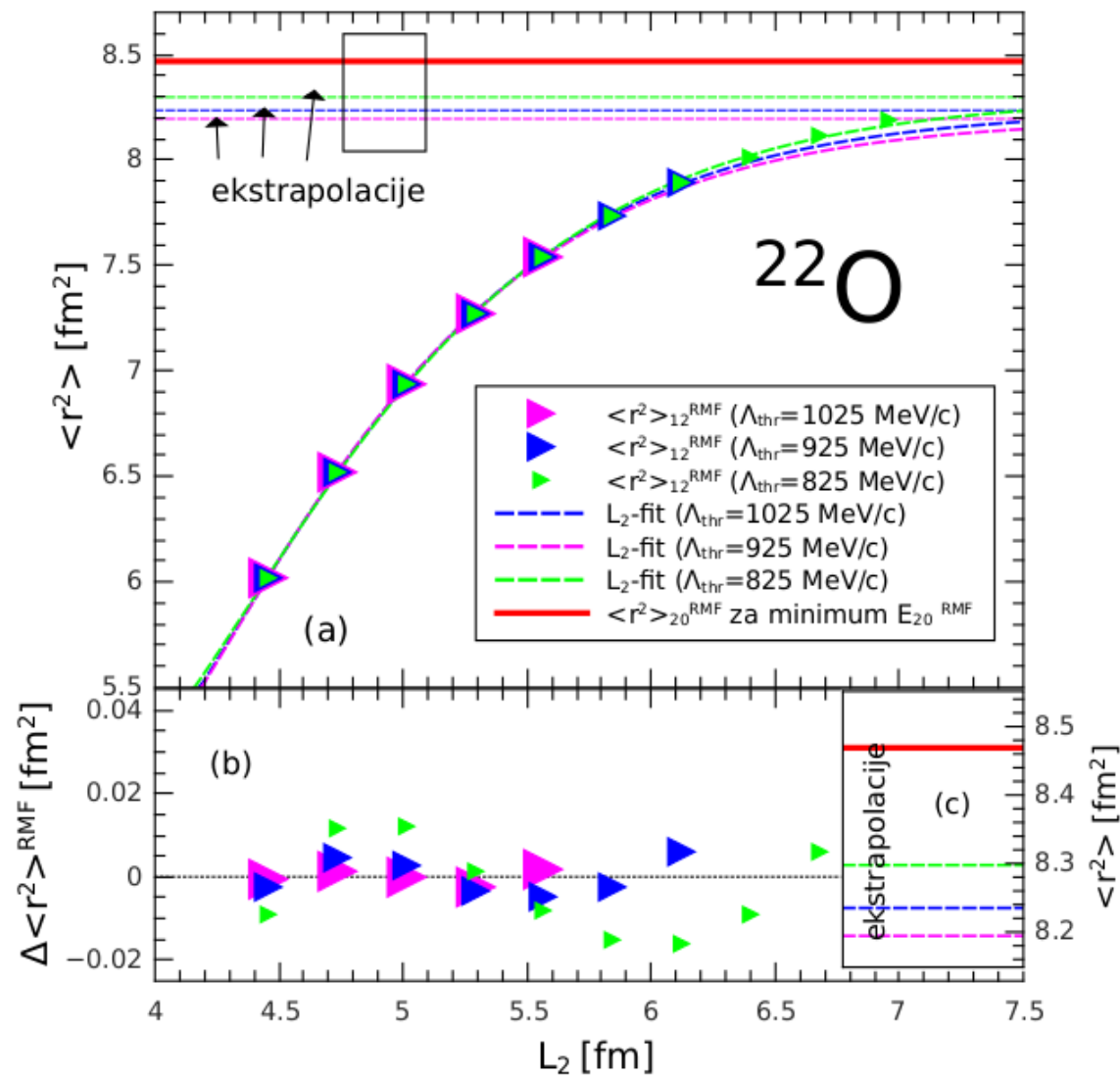
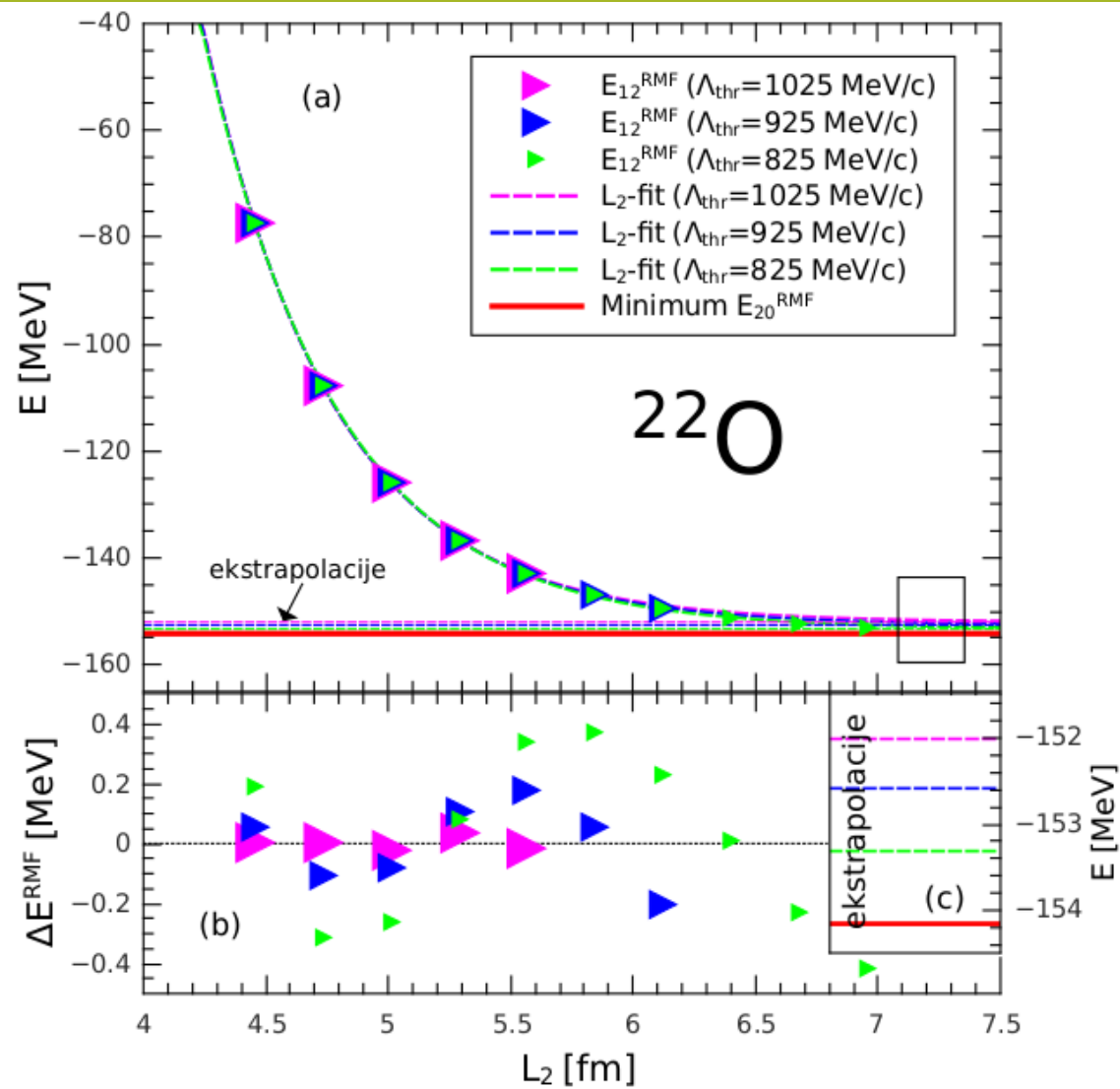
- testirana primjena modela u računu energija osnovnih stanja i pripadajućih radijusa za jezgre ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{22}\text{O}$, ali i teže jezgre poput ${}^{40}\text{Ca}$, ${}^{48}\text{Ca}$, ${}^{100}\text{Sn}$, ${}^{132}\text{Sn}$
- korišteni programski paket računa svojstva osnovnog stanja atomskih jezgara u okviru relativističkih samosuglasnih modela srednjeg polja



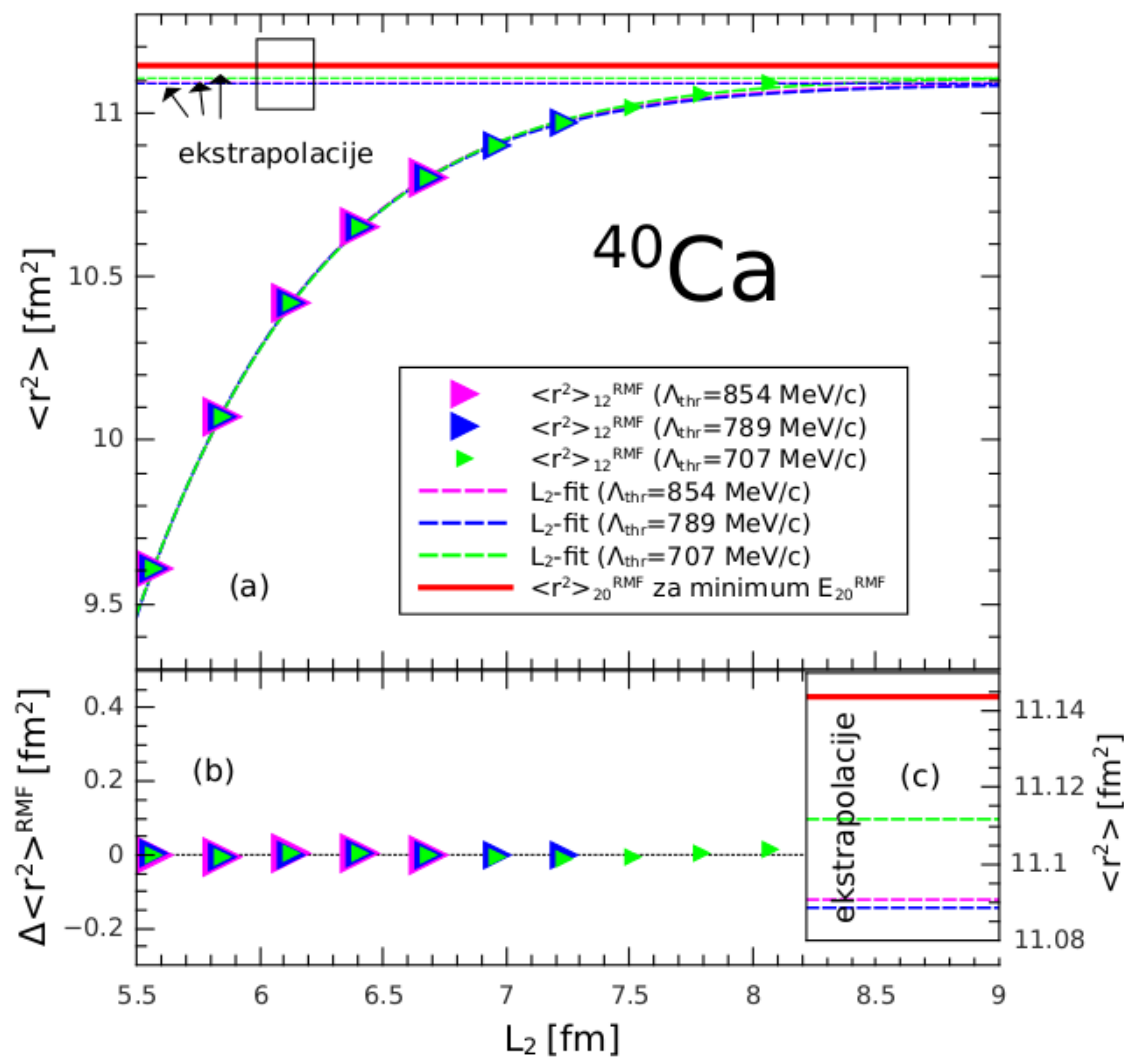
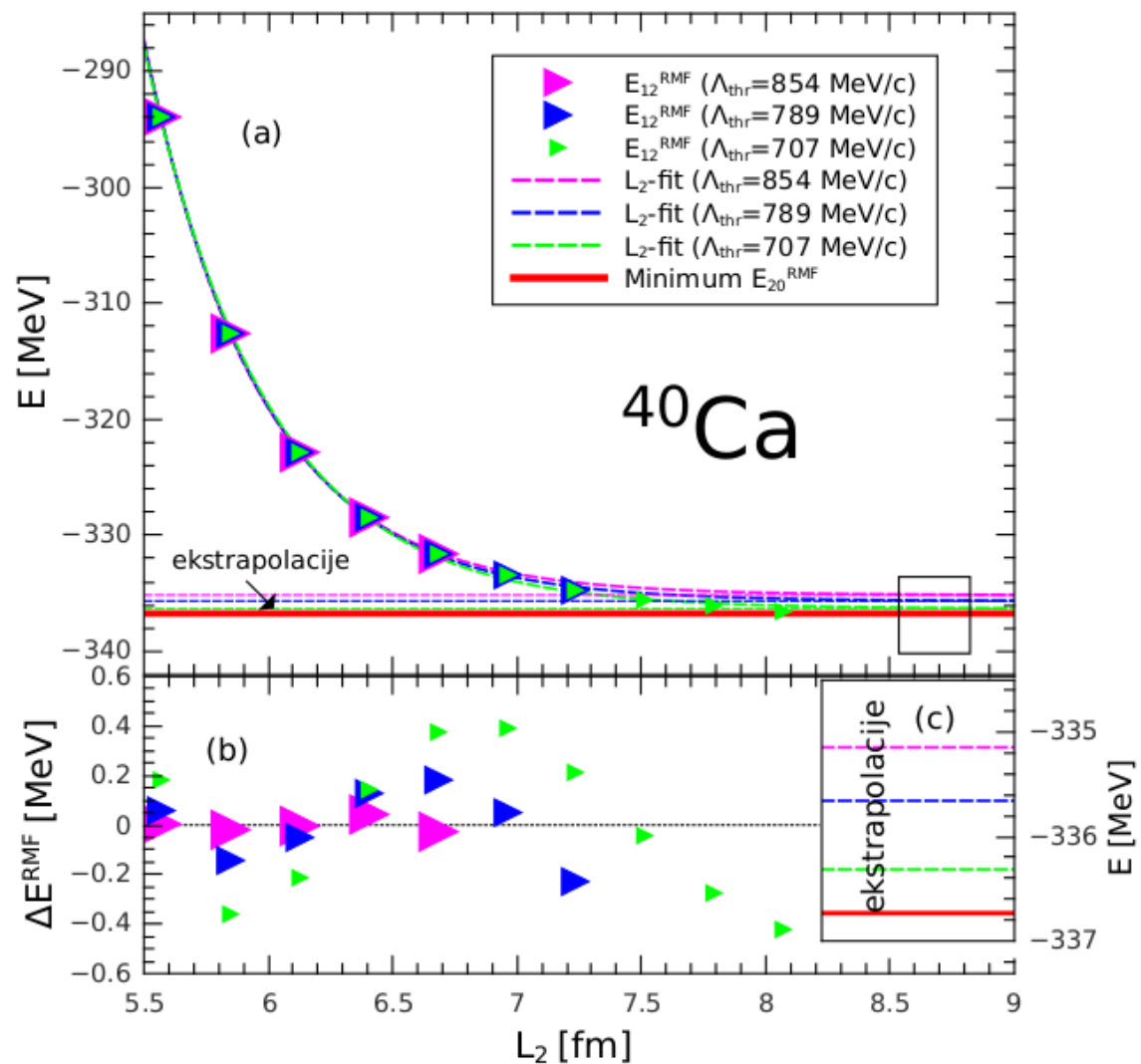
Slika 6: Rezultati računa energije i kvadrata radijusa osnovnog stanja jezgre ${}^4\text{He}$.



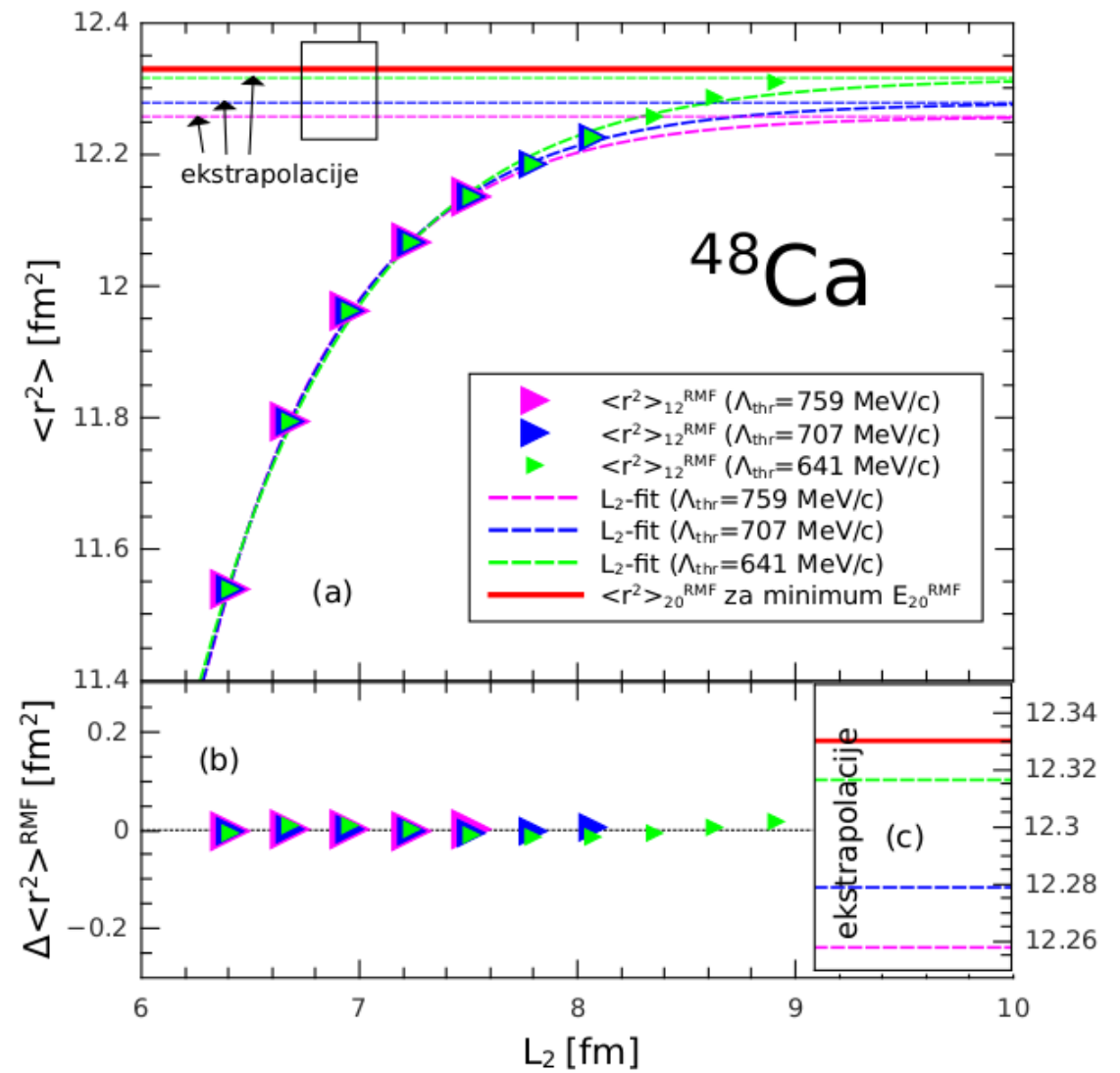
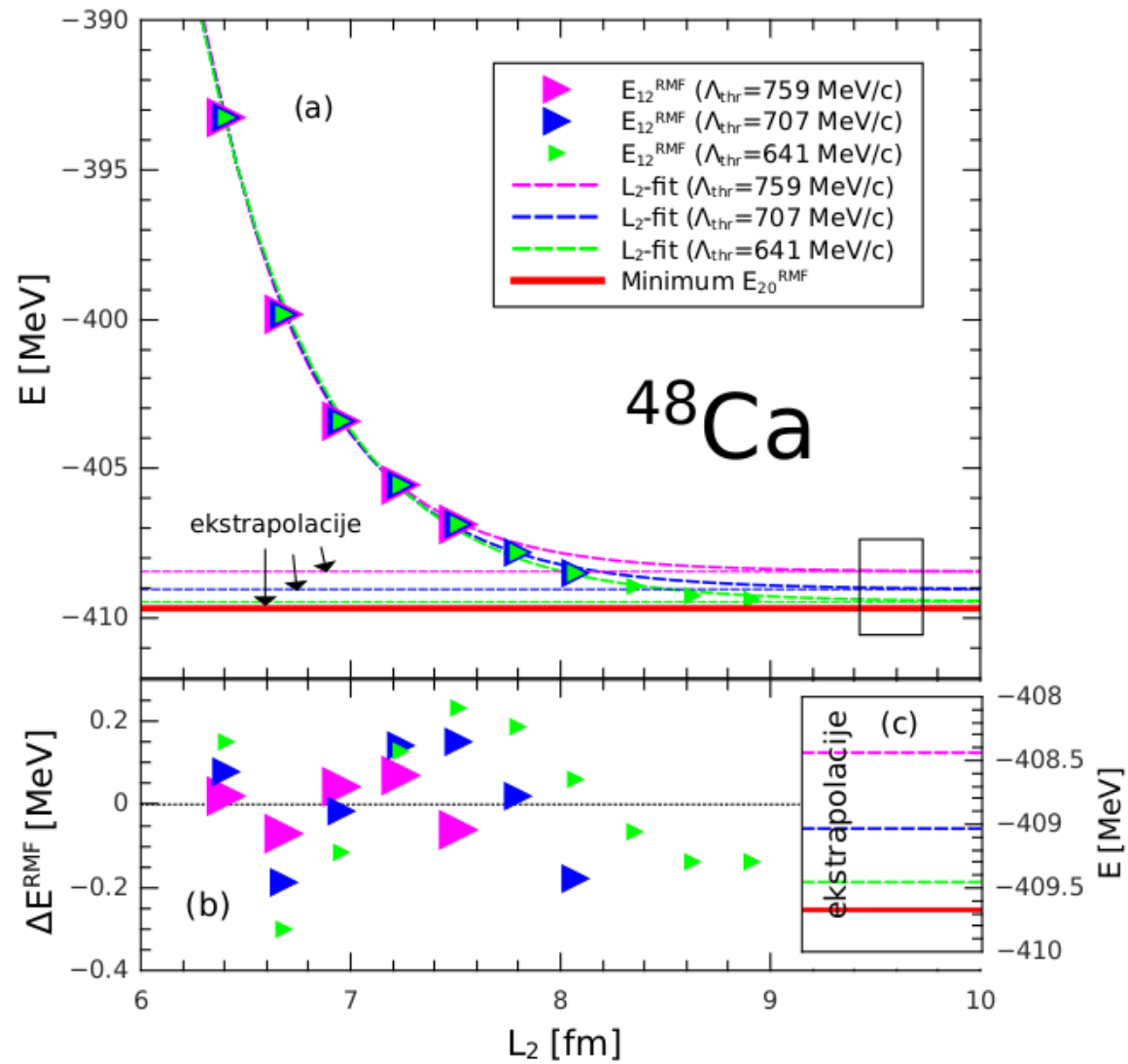
Slika 7: Rezultati računa energije i kvadrata radijusa osnovnog stanja jezgre ^{16}O .



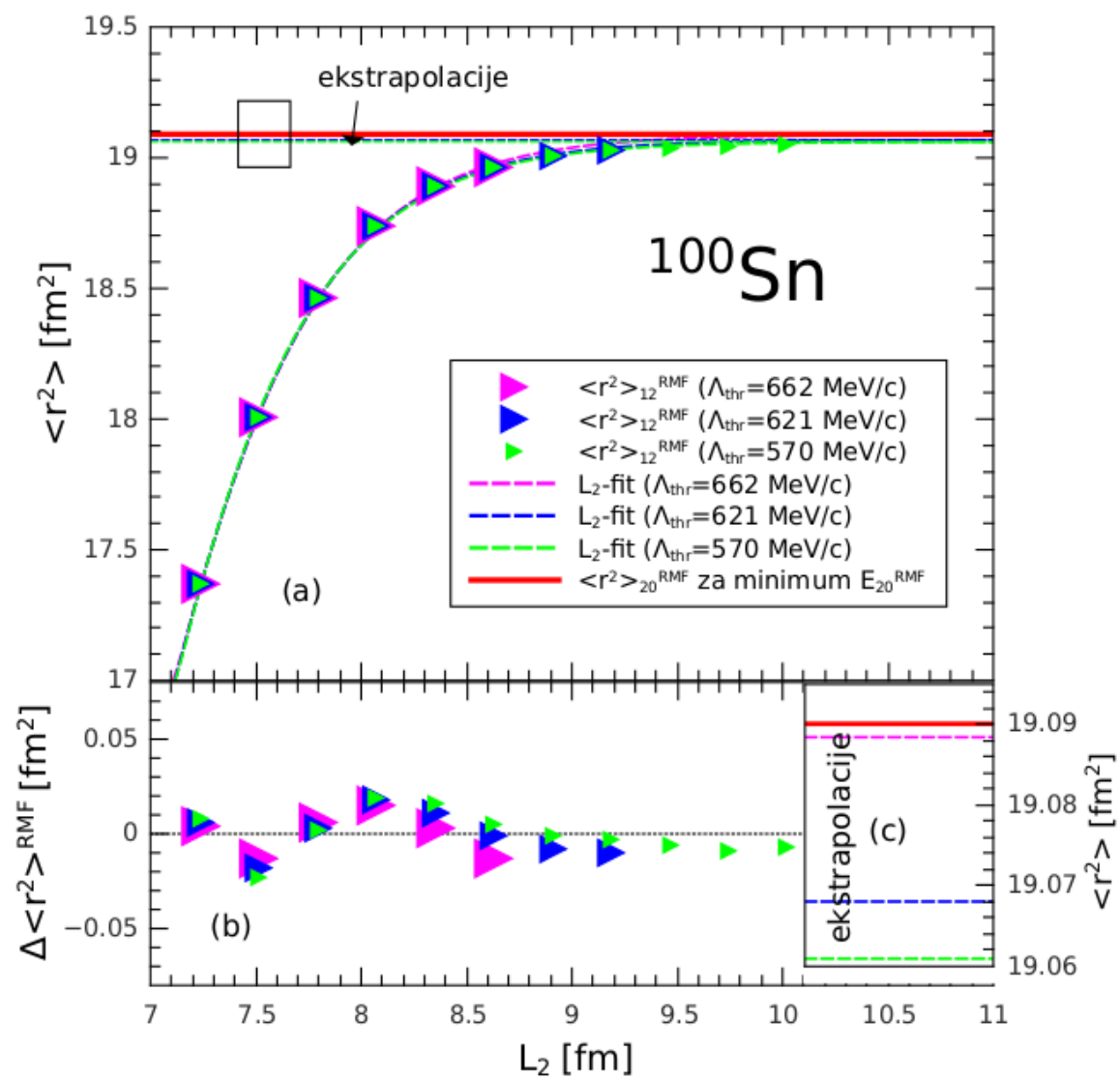
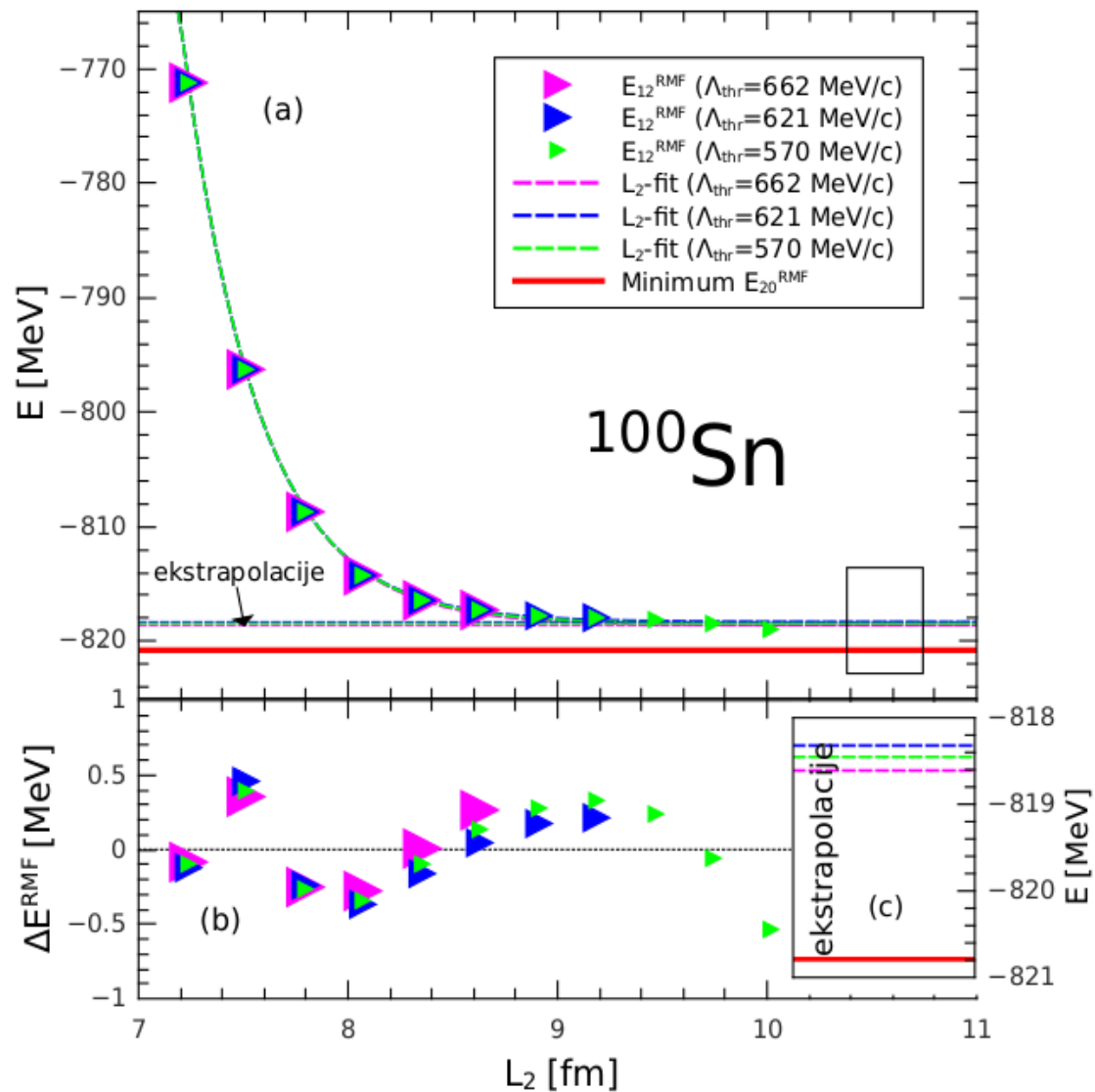
Slika 8: Rezultati računa energije i kvadrata radijusa osnovnog stanja jezgre ^{22}O .



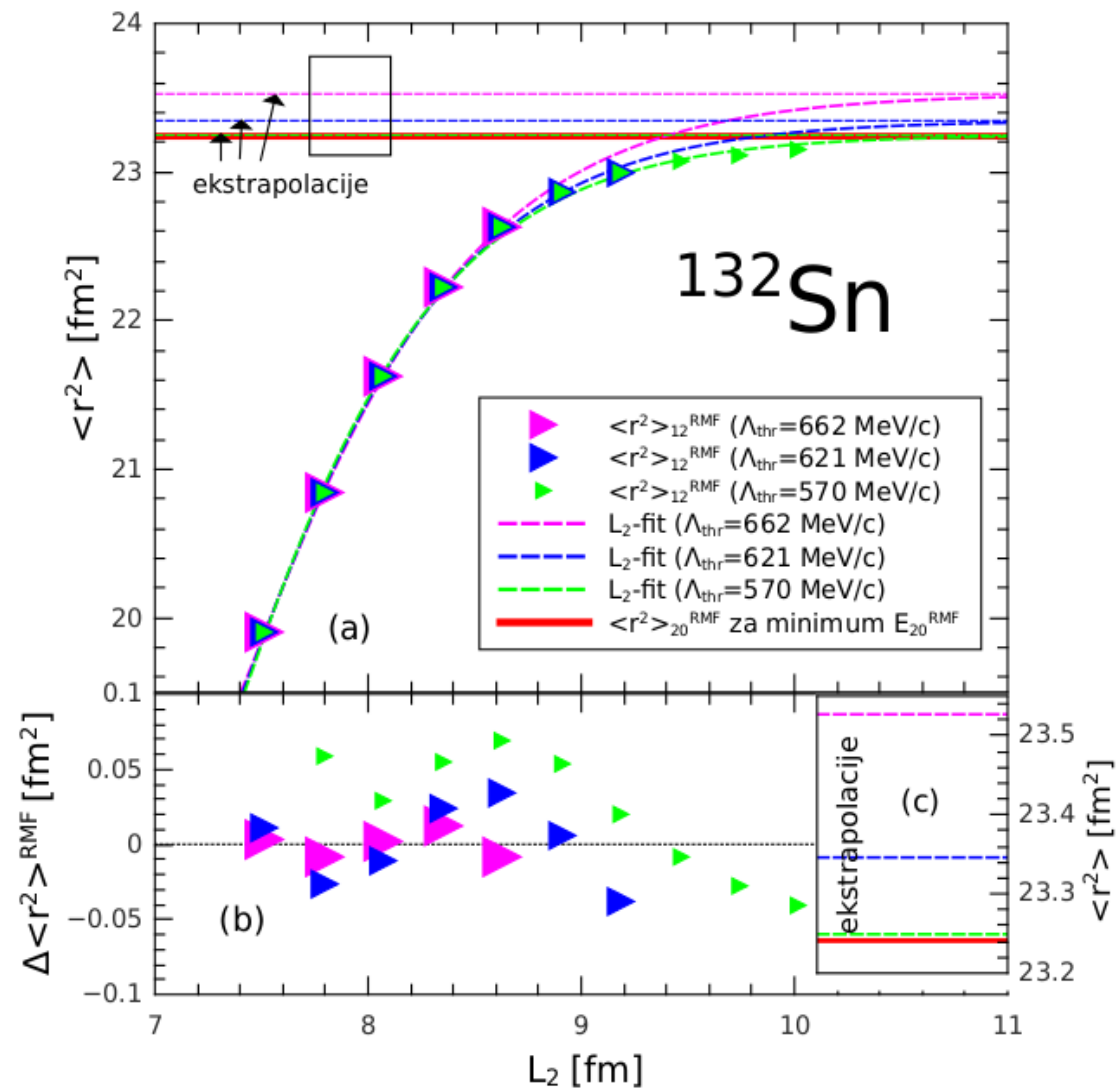
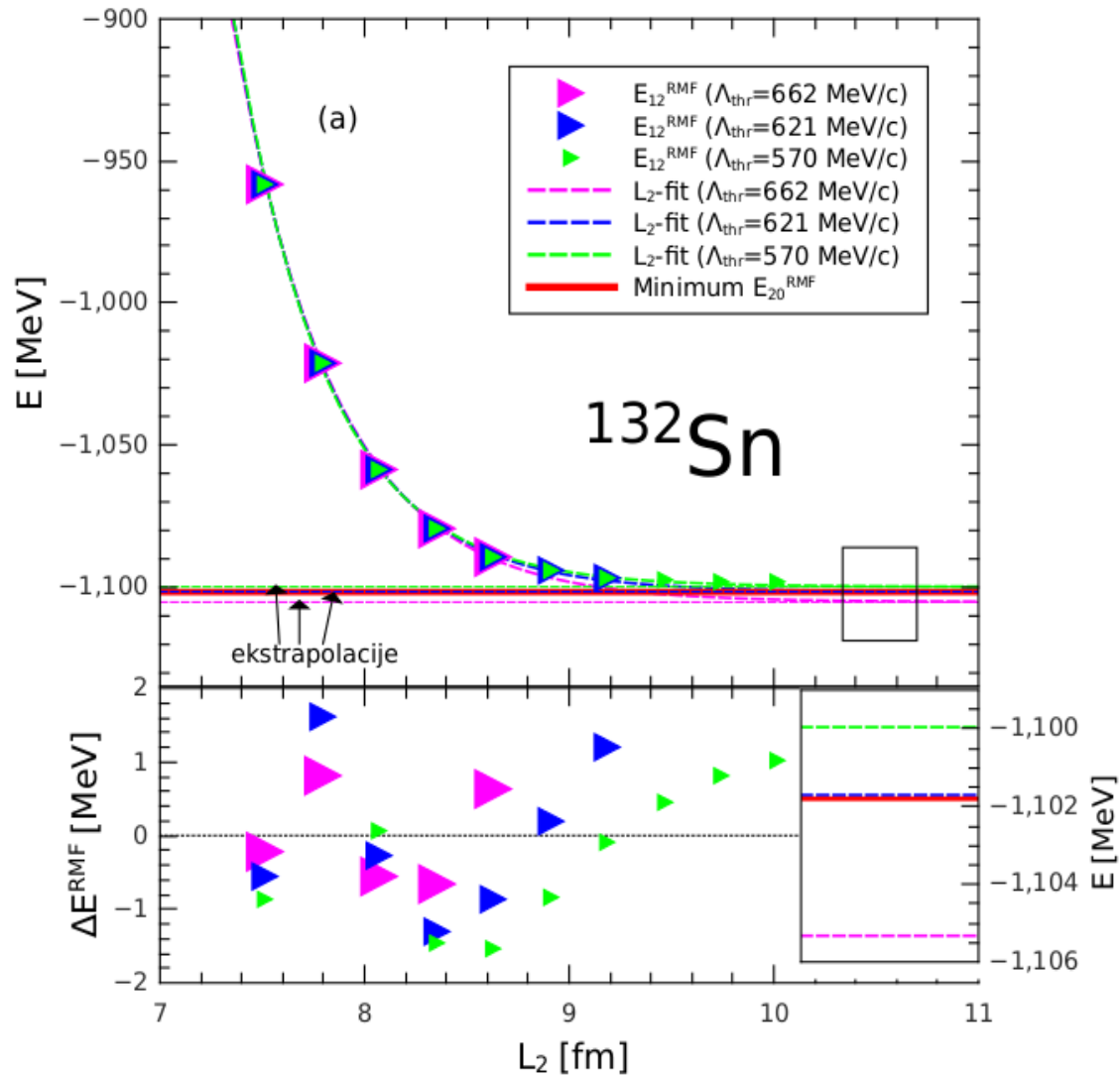
Slika 9: Rezultati računa energije i kvadrata radijusa osnovnog stanja jezgre ^{40}Ca .



Slika 10: Rezultati računa energije i kvadrata radijusa osnovnog stanja jezgre ^{48}Ca .



Slika 11: Rezultati računa energije i kvadrata radijusa osnovnog stanja jezgre ^{100}Sn .



Slika 12: Rezultati računa energije i kvadrata radijusa osnovnog stanja jezgre ^{132}Sn .

- za teže jezgre prilagodbe i dalje dobro prate ovisnost numerički dobivenih vrijednosti, iako su odstupanja ponešto veća
- numerička nestabilnost pri provedbi nelinearnih prilagodbi
- energijski nivoi u blizini Fermijeve plohe
- ako bi se radilo o lakoj jezgri tipa ^{16}O koja ima samo jedan nivo blizu Fermijeve plohe, onda to nije poseban problem jer ćemo kod ekstrapolacije vidjeti samo taj nivo
- ako se radi o težoj jezgri, oko Fermijeve plohe ima više nivoa koji će doprinostiti u ekstrapolaciji

ZAKLJUČAK

- provjere na Schrödingerovoj i Diracovoj jednažbi su bile uspješne potvrdile su rezultate dosadašnjih istraživanja
- u slučaju samosuglasnih računa situacija je kompleksnija
- za jezgre malog masenog broja dobivene ekstrapolacije za energiju osnovnog stanja i pripadni kvadrat radijusa su u dobrom slaganju s rezultatima dobivenim uz $N=20$ oscilatorskih ljusaka
- za srednje teške i teške jezgre model i dalje daje dobro slaganje s rezultatima dobivenim uz $N=20$ ljusaka, ali uz nešto ponešto veća odstupanja u usporedbi s lakim jezgrama
- numerička osjetljivost i utjecaj stanja u blizini Fermijeve plohe - ograničenje ove metode za jezgre velike mase
- najbolji rezultate za lake jezgre - moguća primjena u opisu nekih vrlo lakih halo jezgri

- R. J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, *Corrections to nuclear energies and radii in finite oscillator spaces*, Phys. Rev. C 86, 031301(R) (2012)
- S. N. More, A. Ekström, R. J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, *Universal properties of infrared oscillator basis extrapolations*, Phys. Rev. C 87, 044326 (2013)
- R. J. Furnstahl, S. N. More, T. Papenbrock, *Systematic expansion for infrared oscillator basis extrapolations*, Phys. Rev. C 89, 044301 (2014)
- S. König, S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, S. N. More, T. Papenbrock, *Ultraviolet extrapolations in finite oscillator bases*, Phys. Rev. C 90, 064007 (2014)
- T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, *Relativistic Nuclear Energy Density Functionals: Mean-Field and Beyond*, Prog. Part. Nucl. Phys. 66, 519 (2011)
- T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, P. Ring, *DIRHB—A relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei*, Comput. Phys. Commun. (2014)
- Y. K. Gambhir, P. Ring, A. Thimet, *Annals Of Physics* 198, 132-179 (1990)

ZAHVALE

Zahvaljujem se mentorici izv. prof. dr. sc. Tamaru Nikšić na ukazanoj prilici za rad na predloženoj temi, kao i njenom strpljenju, trudu i savjetima.