

Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki
Instytut Fizyki Teoretycznej

Rozpad beta w uogólnionym modelu jądrowego funkcjonału gęstości

Maciej Konieczka



Praca wykonana pod kierunkiem
prof. dr. hab. Wojciecha Satuły
w Katedrze Modelowania Układów Złożonych

Warszawa, sierpień 2020

Mojej Rodzinie

Streszczenie

Jądra atomowe to znakomite laboratoria do badania fundamentalnych praw przyrody. Rządzą nimi bowiem długozasięgowe oddziaływania coulombowskie, krótkozasięgowe oddziaływania silne wiążące nukleony w jądra atomowe (oddziaływania nukleon-nukleon) oraz oddziaływania słabe determinujące rozpady beta. Dogłębna analiza wszystkich trzech jest niezbędna do prawidłowego opisu nuklidów. Oddziaływania słabe rozpatruje się również z perspektywy Modelu Standardowego fizyki cząstek elementarnych, stawiającemu sobie za cel wyjaśnienie pryncypiów funkcjonowania otaczającego nas świata.

Binarna struktura jądrowa – tj. budowa układu kwantowego składającego się z dwu typów cząstek: protonów i neutronów – powoduje asymetrię oddziaływań w jądrach. Powodem są między innymi oddziaływania elektromagnetyczne wyróżniające protony przed neutronami. Takie zjawisko nazywamy w fizyce naruszeniem symetrii izospinowej. Analiza złamania tej symetrii w tzw. superdozwolonych rozpadach beta otwiera możliwości weryfikacji podstawowych hipotez Modelu Standardowego – przede wszystkim założenia, w którym struktury hadronowe wyrastają z trzech rodzin kwarków. W tym celu badam unitarność macierzy mieszania kwarków Cabibbo-Kobayashiego-Maskawy (Nagorda Nobla 2008 *"for the discovery of the origin of the broken symmetry which predicts the existence of at least three families of quarks in nature"*). Dotychczasowe wyniki badań z użyciem efektywnego potencjału nukleon-nukleon wskazują na wysycenie liczby rodzin kwarków przez trzy generacje. Jednak rachunki z uwzględnieniem bardziej subtelnych (niż coulombowskie) oddziaływań łamiących symetrię izospinową na poziomie mezon-nukleon, czy też mezon-kwark, wskazują na odejście od unitarności macierzy CKM, sugerując jednocześnie istnienie nowych nieznanych cząstek elementarnych.

Przejścia Fermiego nie są jedynym możliwym kanałem rozpadu beta. Niemal równie prawdopodobne są tak zwane przejścia Gamowa-Tellera. Okazuje się, że prawdopodobieństwo takiego rozpadu jest od lat systematycznie przeszacowywane przez obliczenia teoretyczne względem danych doświadczalnych. Efekt tej redukcji nazwano problemem *quenchingu* stałej sprzężenia elektroślabych prądów typu Gamowa-Tellera g_A . Tą stałą można badać zarówno na gruncie fizyki cząstek elementarnych jak i fizyki jądrowej. Wnioski z rachunków wykonanych w ramach doktoratu pozwoliły na odrzucenie głównej hipotezy rozwiązania tej zagadki, mianowicie wad konstrukcji modelu teoretycznego. Analiza porównawcza wskazała na konieczność uwzględnienia elektroślabych prądów wyższego rzędu, co potwierdziły późniejsze rachunki *ab initio*.

Zrozumienie mechanizmu *quenchingu* jest niezwykle istotne z punktu widzenia badań bardzo interesującego fizyków jądrowych oraz naukowców zajmujących się fizyką cząstek elementarnych zjawiska jakim jest proces podwójnego rozpadu beta w kanale bezneutrinowym ($0\nu\beta\beta$). Jest to obecnie jedno z najbardziej poszukiwanych zjawisk fizycznych.

Zaobserwowany proces świadczyłby o istnieniu fizyki poza ugruntowanym Modelem Standardowym. Odkrycie oscylacji neutrin (Nagroda Nobla 2015) zwiększyło wśród fizyków zainteresowanie poszukiwaniem procesu $0\nu\beta\beta$, którego istnienie wymaga niezerowej masy tych cząstek.

Sygnały pochodzące z wielu niezależnych eksperymentów wskazują na konieczność rozszerzenia Modelu Standardowego o nieznane dotąd prawa fizyki. Niezwykle istotne są zatem badania potencjalnie wskazujące na elementy Modelu Standardowego, w których nasze zrozumienie otaczającego świata jest niewystarczające. Narzędzi badawczych dostarczają w tym przypadku wielociałowe metody fizyki jądrowej takie jak rozwijany w niniejszej rozprawie uogólniony funkcjonal gęstości z przywróconymi symetriami: obrotową i izospinową. Wykorzystując ten formalizm w rozprawie zbadano: rozpady beta pod kątem weryfikacji podstawowych hipotez Modelu Standardowego (takich jak istnienie trzech generacji kwarków), zagadkę dotyczącą efektu *quenchingu* stałej g_A oraz przedstawiono badania nad funkcją odpowiedzi Gamowa-Tellera dla kilku reprezentatywnych przypadków. Zbadano również regułę sum Ikedy celem weryfikacji zupełności przestrzeni konfiguracyjnej w modelu.

Abstract

Title in English: Beta decay in nuclear energy density functional and beyond

Atomic nuclei form an excellent playground to investigate the primary building blocks of nature in the context of fundamental interactions between particles. Long-range electromagnetic Coulomb interaction, short-range strong interaction which binds nucleons into atomic nuclei (nucleon-nucleon interaction), and weak interaction responsible for beta decay pose a serious challenge in theoretical description of the nuclear chart where a deep understanding of all of them is a must. The field of study is highly interdisciplinary as the understanding of fundamental interactions have been the main goal of the Standard Model of particle physics - the theory which pretends to account for the fundamental laws of nature.

Binary structure of atomic nucleus - the quantum system composed of two types of particles protons and neutrons – causes the asymmetry of the nucleon-nucleon interaction due to, for instance, electromagnetic interaction which acts only between protons. The analysis of breaking of the isospin symmetry in the so-called superallowed Fermi beta decay provides a unique opportunity to verify the basic assumption of the Standard Model, where hadronic structure is built upon three generations of quarks. For that reason one of the key point of the thesis was to focus on the research of unitarity of the Cabbibo-Kobayashi-Maskawa (CKM) quark mixing matrix (Nobel prize 2008 "for the discovery of the origin of the broken symmetry which predicts the existence of at least three families of quarks in nature"). So far, the calculation of nuclear beta decay with an effective nucleon-nucleon interaction does not contradict with this assumption. Therefore either, we live indeed in the three-generation-quark world or quarks of next generation are so massive that we need much more precise calculation to reach the required level of accuracy of the unitarity of CKM matrix.

The Fermi beta decay is by no means the only channel of beta transition. With nearly the same probability the nucleus may decay in the Gamow-Teller channel where the spin change is involved. Many years ago it turned out that the transition probability is systematically overestimated by the theory with respect to experimental data. The observed reduction is responsible for coining the term *quenching* for the reduction effect related to the coupling constant of Gamow-Teller type of electroweak currents. The coupling constant has been studied within both nuclear and particle physics. The conclusion that has been made within this work allowed to reject the main hypothesis behind the quenching. Instead of suspecting the drawbacks of the theoretical approach itself it turned out that the solution of the puzzle of the quenching was most probably related to many-body currents, which had been not included at any point in the calculation. Only very recently this statement has been confirmed by the ab initio calculations in several examples of the Gamow-Teller beta decay.

Furthermore, the Gamow-Teller transitions are crucial to settle up the research on neutrinoless double beta decay. It is one of the most sought-after process in physics as if measured, would indicate the existence of new physics beyond the Standard Model with neutrino being its own antiparticle with the non-zero mass. The discovery of the neutrino oscillation (Nobel prize 2015) made the subject even more vivid among scientists. It meant that neutrinos are massive. It is therefore obligatory for nuclear theory to perform extremely precise calculation indicating possible isotopes that may decay in that exciting neutrinoless double decay channel. The model that has been widely tested and explored within the thesis, especially in the context of Gamow-Teller transitions, is now almost ready for the calculation of the $0\nu\beta\beta$ channel.

Chciałbym serdecznie podziękować mojemu promotorowi, profesorowi Wojciechowi Sattule, za wnikliwą korektę niniejszej rozprawy. Dziękuję za opiekę naukową oraz bardzo życzliwą atmosferę pracy przez wszystkie lata poczynszu od studiów magisterskich.

Dziękuję profesorowi Jackowi Dobaczewskiemu za wieloletnią współpracę oraz za życzliwą pomoc w trakcie stażów naukowych odbywanych na Uniwersytecie w Jyväskylä i na Uniwersytecie w Yorku.

Pragnę bardzo podziękować dr. Pawłowi Bączykowi za owocną współpracę, częstą pomoc, wielogodzinne dyskusje oraz wspólne wyjazdy naukowe, a przede wszystkim za przyjaźń.

Dziękuję pracownikom naukowym Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego za niesamowitą postawę w stosunku do całej społeczności akademickiej Wydziału.

Spis treści

Streszczenie	v
Abstract	vii
Słowo wstępne i zarys pracy	xiii
1 Podstawowe symetrie w fizyce jądrowej	1
§1 Grupy symetrii i jej reprezentacje	1
§2 Symetrie oddziaływania silnego	3
2 Fizyka rozpadu beta	11
§1 Teoria Fermiego rozpadu beta	11
§2 Zarys teorii elektrosłabej Glashowa, Salama i Weinberga	14
§3 Stałe sprzężenia oddziaływań elektrosłabych	18
§4 Macierz Cabibbo–Kobayashiego–Maskawy	19
§5 Metody jądrowe wyznaczania elementu macierzowego V_{ud}	23
§6 Parametry korelacji w rozpadzie beta	25
3 Metoda jądrowego funkcjonału gęstości z przywróconymi symetriami	27
§1 Model pola średniego w ujęciu Hartree’ego–Focka	27
§2 Oddziaływanie nukleon–nukleon w jądrze atomowym	31
§3 Teoria jądrowego funkcjonału gęstości	35
§4 Oddziaływania Skyrme’a niezależne od gęstości.	42
§5 Symetria obrotowa w izoprzestrzeni	44
§6 Przywracanie symetrii rotacyjnej metodą rzutowania	46
§7 Przywracanie symetrii izospinowej metodą rzutowania	54
§8 Model mieszania konfiguracji DFT-NCCI	59
8.1 Formalizm oraz przestrzeń konfiguracyjna w modelu DFT-NCCI	60
8.2 Własności modelu DFT-NCCI	63
4 Rozpad beta typu Fermiego	71
§1 Superdozwolone rozpady beta Fermiego	71
§2 Rozpady beta Fermiego w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$	76
2.1 Dopasowanie parametrów izowektorowego kanału oddziaływania Skyrme’a do obliczeń z rzutowaniem	76
2.2 Wpływ rzutowania na izospin na wartość poprawki izospinowej	78
2.3 Wpływ orientacji prądu cząstek walencyjnych w rozwiązaniach średniopolowych na wartość poprawki izospinowej.	78
2.4 Wpływ klasy III na wartość poprawki izospinowej	80

2.5	Wpływ struktury jądrowej na poprawkę izospinową	81
2.6	Analiza błędu poprawki izospinowej	84
2.7	Analiza unitarności macierzy Cabbibo-Kobayashiego-Maskawy	87
5	Rozpad beta typu Gamowa-Tellera	93
§1	Element macierzowy Gamowa-Tellera	93
§2	Efekt <i>quenchingu</i> w modelu MR DFT	98
§3	Funkcja odpowiedzi na wymuszenie spinowo-izospinowe	102
3.1	Niskoenergetyczna struktura jądrowa oraz rozkład nasilenia rozpadu Gamowa-Tellera w jądrach o liczbie masowej $A = 8$	104
3.2	Funkcja odpowiedzi Gamowa-Tellera w jądrze ^{24}Mg	113
3.3	Superdozwolony rozpad Gamowa-Tellera w jądrze ^{100}Sn	119
6	Podsumowanie	123
	Spis rysunków	129
	Spis tabel	131
	Bibliografia	133

Słowo wstępne i zarys pracy

Jądro atomowe to samowiążący się układ nukleonów, które, w przeciwieństwie do elektronów w atomie, nie poruszają się w studni zewnętrznego potencjału. W teorii funkcjonału gęstości (DFT) opis jądra musi być zatem dokonany w języku gęstości wewnętrznych, co z kolei prowadzi do spontanicznego naruszenia symetrii reprezentującego stan jądra wyznacznika Slatera zbudowanego z orbitali Kohna-Shama. To zawęża stosowalność jądrowej metody funkcjonału gęstości (EDF) do obliczania tzw. objętościowych obserwabli jak masy, promienie czy momenty kwadrupolowe.

Przywrócenie naruszonych symetrii, czyli konstrukcja stanów o dobrych liczbach kwantowych, jest kluczowa do opisu struktury jądrowej, a w szczególności do wyznaczenia elementów macierzowych przejść rozpadów beta i gamma. Można to osiągnąć poprzez zastosowanie technik rzutowych. Z formalnego punktu widzenia prowadzi to do przeformułowania jądrowej metody funkcjonału gęstości w języku tzw. gęstości przejściowych liczonych pomiędzy różnymi wyznacznikami Slatera. Takie rozszerzenie metody DFT nosi nazwę wieloreferencyjnej metody DFT (MR DFT). Metoda MR DFT jest narzędziem uniwersalnym, której podstawową zaletą jest możliwość wykonywania rachunków strukturalnych – zarezerwowanych dotychczas dla modelu powłokowego – dla dowolnego jądra z tablicy nuklidów.

Olbrzymi potencjał metody przyciągnął wiele grup badawczych do pracy nad zastosowaniami oraz dalszymi rozszerzeniami modelu MR DFT. Warszawska grupa fizyków zajmujących się teorią struktury jądra atomowego jako jedna z pierwszych na świecie połączyła koncepcję mieszania konfiguracji (CI) z podejściem funkcyjnym w ramach MR DFT, konstruując model DFT-NCCI (DFT-rooted No-Core Configuration-Interaction). Pierwsze testy modelu DFT-NCCI zaprezentowane w postaci kilku artykułów naukowych okazały się być nadzwyczaj zachęcające i zainspirowały do jej dalszego doskonalenia i rozszerzenia palety zastosowań do różnorodnych problemów fizycznych, w szczególności tych związanych z rozpadem beta czego dotyczy niniejsza rozprawa doktorska.

Kluczowym pojęciem metody MR DFT i jej rozszerzeń stosowanych w niniejszej rozprawie jest pojęcie symetrii układu oraz mechanizmów jej naruszenia i sposobów przywracania. Te zagadnienia porusza rozdział pierwszy, w którym wprowadzimy stosowny aparat matematyczny w ramach teorii algebr Liego dający podstawy matematyczne do konstrukcji operatorów rzutowych służących do przywracania spontanicznie naruszanych symetrii ciągłych takich jak symetria obrotowa i izospinowa. W tym rozdziale przedyskutujemy także podstawowe symetrie hamiltonianu jądrowego.

Rozdział drugi w całości poświęcony jest teorii rozpadu beta. Zaczniemy od przypomnienia teorii Fermiego, którą następnie rozszerzymy do opisu w języku naładowa-

nych prądów elektrosłabych w ramach teorii unifikacji Glashowa-Salama-Weinberga. W kolejnych paragrafach omówimy hipotezę zachowania prądu wektorowego (CVC) oraz częściowego zachowania prądu osiowo-wektorowego (PCAC), wiążąc je, odpowiednio, ze sposobami wyznaczania elementu macierzowego V_{ud} macierzy mieszania kwarków oraz z efektem redukcji elementu macierzowego Gamowa-Tellera w ośrodku jądrowym. W paragrafie czwartym omówimy macierz mieszania kwarków Cabbibo-Kobayashiego-Maskawy (CKM). W paragrafie piątym skoncentrujemy się na metodach jądrowych wyznaczania wiodącego elementu macierzowego V_{ud} macierzy CKM. Przedyskutujemy szczegółowo zarówno metodę wykorzystującą rozpady superdozwolone $0^+ \rightarrow 0^+$ jak i metodę wykorzystującą rozpady Fermiego pomiędzy jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$. W paragrafie szóstym omówimy w skrócie parametry korelacji w rozpadzie beta niezbędne do wyznaczenia elementu macierzowego V_{ud} w metodzie przejść między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$.

W rozdziale trzecim skoncentrujemy się na opisie formalizmów teoretycznych, których będziemy używać do opisu wielociałowego stanu kwantowego. Zaczniemy od modelu pola średniego w ujęciu Hartree’ego–Focka. W kolejnych paragrafach przedstawimy opis oddziaływania nukleon-nukleon oraz wprowadzimy efektywne oddziaływanie Skyrme’a, a następnie przedyskutujemy niezależną od gęstości parametryzację oddziaływania Skyrme’a SV używaną w obliczeniach. W paragrafie piątym rozszerzymy oddziaływanie Skyrme’a o człony izowektorowe, które okażą się niezwykle istotne przy opisie poprawek izospinowych do rozpadów beta typu Fermiego. W kolejnych paragrafach omówimy metody przywracania symetrii rotacyjnej i izospinowej w ramach teorii MR DFT. Zaś w ostatnim paragrafie skoncentrujemy się na metodzie DFT-NCCI, omawiając jej ideę jak również jej zalety i wady.

Zastosowania formalizmu DFT-NCCI do badania rozpadów Fermiego i Gamowa-Tellera przedstawiono w rozdziałach czwartym i piątym. Model DFT-NCCI z powodzeniem zastosowano do opisu podstawowych procesów elektrosłabych w kontekście struktury materii jądrowej. Pierwsze rachunki dotyczyły wpływu łamania symetrii izospinowej na współczynnik zmieszania izospinowego oraz na element macierzowy superdozwolonych rozpadów beta typu Fermiego w tryplecie izospinowym $T = 1$ oraz rozpadów beta w jądram zwierciadlanych $T = 1/2$. Rozpady superdozwolone stanowią najdokładniejszy test weryfikujący hipotezę Modelu Standardowego dotyczącą zachowania wektorowych prądów elektrosłabych, a w konsekwencji hipotezę istnienia trzech generacji kwarków. Dotychczasowe wyniki uzyskane zarówno w modelu powłokowym jak i w podejściu wypracowanym przez naszą grupę wskazują na unitarność macierzy mieszania kwarków CKM. Rachunki w metodzie RPA, gdzie wykorzystywany lagranżjan uwzględnia oddziaływania nukleon-mezon, wskazują jednak na delikatne odstępstwo od unitarności macierzy CKM, poddając w wątpliwość wysycenie zupełności stanów kwarkowych tylko przez trzy generacje. Stąd tak istotne jest przeprowadzanie możliwie jak największej ilości testów weryfikujących unitarność macierzy CKM. Alternatywnym podejściem umożliwiającym wyznaczenie elementu macierzowego V_{ud} jest analiza przejść Fermiego w jądram zwierciadlanych. Rozdział czwarty przedstawia wyniki obliczeń poprawek izospinowych zarówno do przejść superdozwolonych (paragraf pierwszy) jak i przejść w jądram zwierciadlanych $T = 1/2$ (paragraf drugi). Przedstawiono w nim szeroką dyskusję pojawiających się problemów związanych ze strukturą poziomów jednocząstkowych wyznaczonych przy użyciu parametryzacji SV wraz z oszacowaniem niepewności teoretycznych dla obliczonych po-

prawek izospinowych. Bardzo ciekawym wynikiem przedstawionym w tym rozdziale jest pionierska analiza wpływu kontaktowych efektywnych oddziaływań silnych klasy III (izowektorowych) na poprawki izospinowe do przejść Fermiego i ich znaczenie w kontekście testów sektora elektrosłabego Modelu Standardowego.

Rozdział piąty koncentruje się na wynikach badań dla przejść beta typu Gamowa-Tellera (GT). Badania przejść GT były jak dotąd domeną modelu powłokowego. Użytkiwane wyniki były jednak systematycznie przeszacowywane w porównaniu do danych doświadczalnych, co wiązano ze skończonym rozmiarem przestrzeni walencyjnej oraz przybliżeniem rdzenia stosowanym w modelu powłokowym. W niniejszej rozprawie przedstawiamy pierwszą systematyczną analizę elementów macierzowych GT wykonaną przy użyciu modeli MR DFT i DFT-NCCI. Pokażemy, że nasze obliczenia są w pełni konsistentne z obliczeniami klasycznego modelu powłokowego co, ze względu na fundamentalne różnice między modelami, wskazuje na inne źródła redukcji (*quenchingu*) elementu macierzowego GT niż wspomniane wyżej. Wyjaśnienie zjawiska *quenchingu* stałej g_A (elementu macierzowego GT) ma charakter fundamentalny, dotyczy bowiem sprzężenia prądów odpowiedzialnych za najczęściej występujące rozpady beta w jądrach atomowych.

W pierwszym paragrafie rozdziału piątego, podamy wyrażenie na element macierzowy GT w modelu MR DFT i opiszemy wyniki testów numerycznych jego implementacji. W kolejnym paragrafie przedstawimy obliczenia elementu macierzowego GT pomiędzy stanami podstawowymi w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ wzdłuż linii $N = Z$, które przedyskutujemy w kontekście *quenchingu* stałej sprzężenia prądów osiowo-wektorowych. W kolejnych paragrafach przedstawimy analizę elementów macierzowych GT ze stanu podstawowego w jądrze matki do stanów wzbudzonych w jądrze córki, zwracając szczególną uwagę na saturację reguły sum Ikedy. Rachunki dotyczące funkcji odpowiedzi GT przeprowadzimy dla bardzo lekkiego jądra ${}^8\text{Li}$ oraz jądra ze środka powłoki $sd - {}^{24}\text{Mg}$ i przeanalizujemy, po raz pierwszy, w języku stanów (konfiguracji) Nilssona. W ostatnim paragrafie tego rozdziału przedstawimy rachunki dotyczące superdozwolonego rozpadu Gamowa-Tellera ${}^{100}\text{Sn} \rightarrow {}^{100}\text{In}$.

Wszystkie obliczenia zaprezentowane w niniejszej pracy wykonano przy użyciu lokalnych funkcjonałów gęstości generowanych niezależną od gęstości siłą Skyrme'a SV. Rachunki dotyczące przejść superdozwolonych przeprowadzono przy użyciu standardowej siły SV z włączonym członem tensorowym w funkcjonale gęstości, SV_T . Pozostałe obliczenia bazują na sile $SV_{T;SO}$, która ma o 20% silniejsze oddziaływanie spin-orbita w stosunku do SV_T . Tą siłę wzbogacono następnie o kontaktowe człony łamiące symetrię izospinową w kanale izowektorowym w wiodącym rzędzie $SV_{T;SO}^{ISB,LO}$ oraz w rzędzie uwzględniającym człony powierzchniowe $SV_{T;SO}^{ISB,NLO}$. Właściwe uchwycenie źródeł fizycznego (jawnego) naruszania symetrii izospinowej ma kolosalne znaczenie dla testów Modelu Standardowego wykorzystujących analizę rozpadów beta jąder atomowych. Wszystkie prezentowane obliczenia wykonano przy pomocy kodu numerycznego HFODD systematycznie rozwijanego przez naszą grupę badawczą.

Publikacje

Badania zaprezentowane w niniejszej rozprawie zostały przedstawione w publikacjach:

- M. Konieczka, P. Bączyk, W. Satuła,
Precision calculation of isospin-symmetry-breaking corrections to $T = \frac{1}{2}$ mirror decays using charge-dependent multi-reference DFT,
w recenzji, arXiv:1909.09350 [1];
- M. Konieczka, M. Kortelainen, and W. Satuła,
Gamow-Teller response in the configuration space of a density-functional-theory-rooted no-core configuration-interaction model,
Phys. Rev. C **97**, 034310 (2018) [2];
- M. Konieczka, P. Bączyk, W. Satuła,
 β -decay study within multireference density functional theory and beyond,
Phys. Rev. C **93**, 042501 (2016) [3];
- M. Konieczka, W. Satuła,
Nuclear Structure Calculations in ^{20}Ne with No-Core Configuration-Interaction Model,
Acta Phys. Pol. B **48**, 293 (2017) [4];
- N. Schunck, J. Dobaczewski, W. Satuła, P. Bączyk, J. Dudek, Y. Gao, M. Konieczka, K. Sato, Y. Shi, X.B. Wang, T.R. Werner,
Solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogolyubov equations in the Cartesian deformed harmonic-oscillator basis. (VIII) HFODD (v2.73y): A new version of the program,
Comp. Phys. Comm. **216**, 145 (2017) [5];
- W. Satuła, P. Bączyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka,
No-core configuration-interaction model for the isospin- and angular-momentum-projected states,
Phys. Rev. C **94**, 024306 (2016) [6];
- W. Satuła, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Nazarewicz,
Isospin Mixing Within the Symmetry Restored Density Functional Theory and Beyond,
Acta Phys. Pol. B **45**, 167 (2014) [7];

W pracy doktorskiej przedstawiono również zagadnienia poruszane w pracach:

- P. Bączyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Satuła,
Isobaric multiplet mass equation within nuclear density functional theory,
J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **46**, 03LT01 (2019) [8];
- P. Bączyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Satuła, T. Nakatsukasa, K. Sato,
Isospin-symmetry breaking in masses of $N \simeq Z$ nuclei,
Phys. Lett. B **778**, 178 (2018) [9];
- P. Bączyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Satuła, T. Nakatsukasa, K. Sato,
Mirror and Triplet Displacement Energies within nuclear DFT: numerical stability,
Acta Phys. Pol. B **48**, 259 (2017) [10];

- P. Bączyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Satuła,
Strong-interaction isospin-symmetry breaking within the Density Functional Theory,
Acta Phys. Pol. B Proc. Suppl. **8**, 539 (2015) [11];
- M. Vilén, A. Kankainen, P. Bączyk, L. Canete, J. Dobaczewski, T. Eronen,
S. Geldhof, A. Jokinen, M. Konieczka, J. Kostensalo, I.D. Moore, D.A. Nesterenko,
H. Penttilä, I. Pohjalainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, A. de Roubin, W. Satuła,
J. Suhonen, J. Äystö,
*High-precision mass measurements and production of neutron-deficient isotopes
using heavy-ion beams at IGISOL*,
Phys. Rev. C **100**, 054333 (2019) [12].

Rozdział 1

Podstawowe symetrie w fizyce jądrowej

§1. Grupy symetrii i jej reprezentacje

Niech grupa G będzie grupą ciągłą tj. taką, dla której dowolny element $g \in G$ można sparametryzować przy użyciu lokalnego układu n współrzędnych, a jego element odwrotny jest pewną ciągłą funkcją f tych parametrów względem działania w obrębie grupy G . Jeżeli grupa G jest skończenie wymiarową gładką mnogością (f są funkcjami analitycznymi), dla której definiuje się operacje różniczkowania i całkowania to wówczas grupę G nazywamy *grupą Liego*. Jeżeli dodatkowo działanie jest przemienne to wówczas grupę Liego nazywamy abelową.

Rozważmy infitezymalnie małe otoczenie, dla uproszczenia punktu $\vartheta = 0$. Wówczas element grupy $g \in G$ możemy przedstawić w postaci rozwinięcia:

$$g(\vartheta) \equiv g(\vartheta_1, \dots, \vartheta_n) = 1 + i \sum_{j=1}^n \vartheta_j X_j + \dots, \quad (1.1)$$

gdzie element X_j —*generator grupy* wyraża się jako:

$$X_j = -i \frac{\partial g}{\partial \vartheta_j} \Big|_{\vartheta=0}. \quad (1.2)$$

Element odwrotny w grupie G możemy przedstawić w postaci:

$$g^{-1}(\vartheta) = 1 - i \sum_{i=1}^n \vartheta_i X_i + \mathcal{O}(\vartheta^2) \quad (1.3)$$

Strukturę działania w obrębie grupy Liego możemy zdefiniować za pomocą jej algebry. Aby wprowadzić algebrę Liego należy określić postać komutatora grupy G (inaczej pochodną grupy — G'). Rozważając obiekt:

$$g(\xi) = g(\varphi) \star g(\vartheta) \star g(\varphi)^{-1} \star g(\vartheta)^{-1} \quad (1.4)$$

możemy ustalić postać dowolnego komutatora (dowolny element G'). Element $g(\xi)$ należy do grupy G , wobec czego jest analityczną funkcją parametrów φ oraz ϑ . Rozwijając tę funkcję w szereg Taylora wokół $\varphi = 0, \vartheta = 0$ oraz narzucając warunki brzegowe:

$$\varphi = 0 \vee \vartheta = 0 \quad \Rightarrow \quad \xi = 0 \quad (1.5)$$

otrzymujemy, że parametr ξ zależy jedynie od wyrazów mieszanych i w pierwszym rzędzie jest równy $\xi_l = C_{ljk}\theta_j\phi_k$, gdzie współczynnik proporcjonalności C_{ljk} nazywamy stałą struktury grupy. Wówczas:

$$g(\xi) = 1 + i \sum_{l=1}^n \xi_l X_l + \dots \quad (1.6)$$

Z drugiej strony wstawiając (1.1) i (1.3) do (1.4) i porównując z (1.6) otrzymujemy postać dowolnego elementu komutatora G' :

$$[X_j, X_k] = i \sum_{l=1}^n C_{ljk} X_l, \quad (1.7)$$

który definiuje algebrę Liego w grupie G z bazą złożoną z generatorów (1.2) tejże grupy. Komutator jest antysymetryczny a ponadto spełnia tożsamość Jacobiego. Ta z kolei wyznacza relację, którą spełniają stałe struktury grupy C_{ljk} :

$$C_{mjk}C_{nlm} + C_{mlj}C_{nkm} + C_{mkl}C_{njm} = 0 \quad (1.8)$$

Każdą algebrę Liego można przedstawić za pomocą reprezentacji zbioru macierzy kwadratowych. To znaczy, że istnieje homomorfizm grupy Liego G do pewnej przestrzeni liniowej odwracalnych operatorów liniowych V : $g_i \in G \longrightarrow D(g_i)$ czyli, że

$$g_i \star g_j = g_k \quad \implies \quad D(g_i)D(g_j) = D(g_k). \quad (1.9)$$

Jeżeli macierz reprezentacji $D(g)$ grupy G można przedstawić w postaci blokowo diagonalnej, to wówczas $D(g)$ nazywamy reprezentacją przywiedlną lub produktową:

$$D(g) = \bigoplus_{i=1}^k D_i(g). \quad (1.10)$$

W przeciwnym przypadku reprezentację nazywamy nieprzywiedlną.

Macierz reprezentacji $D(g)$ można utożsamiać z liniową transformacją pewnego zbioru wektorów. Wówczas wymiar przestrzeni wektorowej, na którą działa transformacja, jest wymiarem tej reprezentacji. W przypadku reprezentacji produktowej dowolny podzbiór wektorów jest rozłączny z resztą wektorów. Gdy przestrzeń jest wyposażona w iloczyn skalarny, ten warunek oznacza ortogonalność wektorów w danym zbiorze. Natomiast w przypadku reprezentacji nieprzywiedlnej wektory danego zbioru są powiązane ze sobą pewną transformacją działającą w obrębie grupy.

Fundamentem teorii reprezentacji jest lemat Schura, który mówi, że jedyną macierzą przemianą z dowolną macierzą reprezentacji nieprzywiedlnej grupy G jest macierz będąca krotnością identyczności. Bezpośrednim wnioskiem płynącym z tego lematu jest następujące twierdzenie o ortogonalności dwu reprezentacji nieprzywiedlnych [13, 14]:

Dla reprezentantów dwu nieprzywiedlnych reprezentacji (μ, ν) grupy G oznaczonych macierzami $D^\mu(g)$ oraz $D^\nu(g)$ zachodzi tożsamość:

$$\sum_{g \in G} D_{ij}^{\mu*}(g) D_{kl}^\nu(g) = \frac{|G|}{\dim V} \delta_{\mu\nu} \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (1.11)$$

gdzie suma przebiega po wszystkich elementach grupy G , $|G|$ jest rzędem tej grupy a $\dim V$ jest wymiarem przekształcenia liniowego między przestrzeniami liniowymi reprezentacji (μ, ν) .

Obrotem wektora $|\Psi^\mu\rangle$ w reprezentacji μ w grupie G nazwiemy operację:

$$\hat{\mathcal{R}}(g) |\Psi_j^\mu\rangle = \sum_i D_{ij}^\mu(g) |\Psi_i^\mu\rangle, \quad (1.12)$$

dla której $\hat{\mathcal{R}}(g)$ jest operatorem obrotu sparametryzowanym elementem $g \in G$, a D^μ jest ciągłą reprezentacją nieprzywiedlną grupy G . Mnożąc tę tożsamość obustronnie przez sprzężenie zespolone reprezentanty $D_{kl}^{\nu*}(g)$, sumując obustronnie po wszystkich elementach grupy oraz korzystając z twierdzenia o ortogonalności (1.11) otrzymujemy, że:

$$\hat{P}_{ij}^\mu |\Psi_k^\nu\rangle = \delta_{\mu\nu} \delta_{jk} |\Psi_i^\mu\rangle, \quad (1.13)$$

gdzie operator $\hat{P}^\mu$ jest operatorem rzutowym nieprzywiedlnej reprezentacji μ i wyraża się wzorem:

$$\hat{P}_{ij}^\mu = \frac{\dim V}{|G|} \sum_{g \in G} D_{ij}^{\mu*}(g) \hat{\mathcal{R}}(g). \quad (1.14)$$

Ponadto, dla operatora $\hat{P}^\mu$ zachodzą tożsamości:

$$\hat{P}_{ij}^\mu \hat{P}_{kl}^\nu = \delta_{\mu\nu} \delta_{jk} \hat{P}_{il}^\mu \quad (1.15)$$

oraz:

$$(\hat{P}_{ij}^\mu)^\dagger = \hat{P}_{ji}^\mu \quad (1.16)$$

co oznacza, że operator $\hat{P}^\mu$ nie jest idempotentny, a zatem nie jest operatorem rzutowym w sensie matematycznym.

Przedstawione powyżej własności matematyczne grup Liego, ich reprezentacje oraz operatory rzutowe (1.14) będą niezbędne do opisu układu kwantowego przy wykorzystaniu podstawowych symetrii oraz później w procedurze rzutowania na określone liczby kwantowe.

§2. Symetrie oddziaływania silnego

W poprzednim podrozdziale omówiliśmy pokrótce strukturę matematyczną skończonych grup Liego - niezwykle istotnych ze względu na interpretację badanych zjawisk fizycznych. Grupy Liego należą do grup ciągłych. Równie istotna okazuje się być analiza symetrii dyskretnych takich jak: symetria parzystości, odwrócenia w czasie, czy symetrie punktowe jak sygnatura i sympleks. Te ostatnie wydają się być niezwykle istotne ze

względów czysto pragmatycznych. Pozwalają bowiem na znaczne uproszczenie wykorzystywanych narzędzi obliczeniowych. Nierzadko narzucenie symetrii na układ kwantowy skraca czas obliczeniowy, a czasem nawet wręcz umożliwia rozwiązanie problemu, który przy zrelaksowanych symetriach punktowych nie jest możliwy do rozwiązania [15]. Grupy opisujące symetrie punktowe to grupy diedralne D_n .

Do symetrii punktowych należy tzw. symetria sygnatury, którą opisuje grupa D_2 rozpięta przez operator identyczności oraz trzy unitarne operatory sygnatury postaci:

$$\hat{R}_k = \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}\hat{I}_k), \quad (1.17)$$

gdzie $\hat{I}_k$ jest operatorem rzutu całkowitego momentu pędu na oś k . Przy czym dla jąder parzystych $\hat{R}_k$ jest operatorem hermitowskim, zaś dla nieparzystych antyhermitowskim. Wobec powyższego, dla jąder nieparzystych, grupę D_2 rozszerza się do podwójnej 8 elementowej grupy D_2^D . Interpretacja fizyczna sprowadza się do geometrii układu kwantowego. Dla jąder parzystych obrót o kąt π ¹ nie zmienia układu kwantowego. Natomiast ten sam obrót w przypadku jądra nieparzystego zmienia kierunek prądu nieparzystej cząstki walencyjnej.

Jeżeli układ kwantowy zachowuje zarówno symetrię sygnatury oraz symetrię parzystości, to wówczas grupy punktowe D_2 i D_2^D rozszerza się odpowiednio do 8 i 16 elementowych przez dodanie operatora parzystości, tworząc operatory sympleksu [15]:

$$\hat{\mathcal{S}}_k = \hat{P}\hat{R}_k \quad (1.18)$$

będące operatorami zwierciadlanego odbicia względem płaszczyzn $y-z$, $z-x$ oraz $x-y$ odpowiednio dla $k = x, y, z$. Wreszcie, uwzględniając antyliniowy operator odwrócenia w czasie:

$$T_k = \exp\left(-\frac{i\pi}{\hbar}\hat{S}_k\right)\hat{K}, \quad (1.19)$$

gdzie $\hat{S}_k$ jest operatorem składowej y całkowitego spinu, a $\hat{K}$ jest operatorem sprzężenia zespolonego, tworzymy 16 i 32 elementowe grupy.

Operator T_k jest antyunitarny, a zatem jego wartości własne nie są mierzalne. Ten fakt powoduje, że symetria odwrócenia w czasie jest najmniej intuicyjna spośród reszty dyskutowanych symetrii. Dyskusja własności operatora T_k jest szczególnie istotna w przypadku teorii pola średniego uwzględniającej korelacje par. W przypadku zaś modelu Hartree’ego-Focka wykorzystywanego w tej pracy istotną konsekwencją jest tzw. degeneracja Kramersa. W stanie podstawowym jąder parzysto-parzystych liczba nukleonów jest jednoznacznie określona. Natomiast w przypadku jąder nieparzystych lub nieparzysto-nieparzystych stan podstawowy można opisać przy użyciu dwu ortogonalnych wielocząstkowych stanów $|\Psi\rangle$ oraz $\hat{T}|\Psi\rangle$ o tej samej energii.

Operator odwrócenia w czasie $\hat{T}_k$ komutuje z operatorem sympleksu $\hat{\mathcal{S}}_k$. Wobec czego, jeżeli układ kwantowy zachowuje symetrię sympleksu to istnieje baza stanów jednocząstkowych spełniających obie te symetrie jednocześnie. Dodatkowo, w przypadku zachowania

¹Przy założeniu osiowej deformacji jądra.

symetrii parzystości operator $\hat{T}_k$ komutuje również z operatorem sygnatury $\hat{R}_k$. Wówczas sygnatura układu kwantowego opisuje *de facto* kierunek prądu cząstki walencyjnej – znak rzutu momentu pędu na oś kwantyzacji. W niniejszej pracy symetrie sygnatury, parzystości oraz odwrócenia w czasie są zachowane, wobec czego, ze względu na intuicyjną interpretację fizyczną, stany kwantowe opisujemy przy użyciu sygnaturowej liczby kwantowej i zapisujemy je odpowiednio $|+\rangle, |-\rangle$ dla wartości własnych $\{i, -i\}$ operatora $\hat{R}_g$. Szczegółowe rozważania czytelnik znajdzie w książce [16].

Symetrie zachowane przez oddziaływanie silne możemy sklasyfikować ze względu na przemienność grup skończonych opisujących te symetrie. I tak: do grup abelowych należą symetria translacyjna, symetria cechowania związana z liczbą cząstek $U(1)$ oraz punktowa symetria parzystości a także jednowymiarowe podgrupy grup obrotów $SU(2)$, natomiast do grup nieabelowych zaliczamy pełne grupy obrotów $SU(2)$. Taki podział jest istotny ze względu na konstrukcję i charakterystykę operatora rzutowego danej grupy.

Dokładna analiza symetrii jakim podlega hamiltonian układu jądrowego jest niezwykle istotna w zrozumieniu przybliżeń czynionych przez przyjęcie modelu pola średniego w ujęciu Hartree’ego–Focka, na którym opiera się przedstawiony w niniejszej pracy model teoretyczny. Ponadto, konstrukcja oddziaływania jądrowego opiera się na założeniu spełnienia przezeń odpowiednich symetrii. I tak hamiltonian jądra atomowego jest niezmienniczy ze względu na:

- translację tego układu w przestrzeni opisywaną przez ciągłą symetrię przesunięcia,
- rotację tego układu w przestrzeni opisywaną przez ciągłą symetrię obrotową,
- rotację tego układu w izoprzestrzeni opisywaną przez ciągłą symetrię izospinową (lub izobaryczną) ²,
- całkowitą liczbę cząstek opisywaną przez ciągłą symetrię liczby cząstek,
- inwersję przestrzenną opisywaną przez dyskretną symetrię parzystości przestrzennej,
- inwersję czasową opisywaną przez dyskretną symetrię odwrócenia w czasie,
- transformację Galileusza ³.

Symetrie dyskretne zostały już pokrótce sklasyfikowane. Teraz bardziej szczegółowo zostaną opisane symetrie ciągłe, których opisu dostarczają grupy Liego. Zatem zgodnie z (1.1), skalując parametr ϑ przez $\frac{-1}{\hbar}$, ciągłe symetrie możemy przedstawić przy pomocy ich unitarnej reprezentacji postaci:

$$\hat{U} = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\vartheta\hat{S}\right), \quad (1.20)$$

gdzie operator symetrii $\hat{S}$ jest generatorem grupy, natomiast ϑ ciągłym, w ogólności wektorowym, parametrem parametryzującym elementy tejże grupy.

²Symetria izospinowa jest symetrią przybliżoną.

³W niniejszej pracy stosujemy opis nierelatywistyczny.

Symetria translacyjna

Założenie jednorodności przestrzeni, w której znajduje się układ kwantowy, prowadzi do narzucenia symetrii translacyjnej tj. takiej, w której opis układu kwantowego jest niezależny od położenia w przestrzeni. Wówczas wektorowy operator całkowitego pędu

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{i=1}^A \hat{\mathbf{p}}_i \quad (1.21)$$

pełni rolę generatora grupy przesunięć, natomiast ϑ_r jest wektorem przesunięcia $\mathbf{r}_0$. Procedura przywracania złamanej symetrii translacyjnej nie wymaga skomplikowanych narzędzi odwołujących się do teorii grup [17, 18]

Symetria rotacyjna

Pod nieobecność pola zewnętrznego żaden kierunek w przestrzeni nie jest wyróżniony, wobec czego można założyć, że przestrzeń jest izotropowa. A zatem oddziaływanie jądrowe oraz podległy mu układ kwantowy powinny być niezmiennicze ze względu na obrót w przestrzeni. Naturalnie, symetria obrotowa jest ciągła, a generatorem odpowiadającej jej grupy jest całkowity moment pędu układu

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_{i=1}^A \hat{\mathbf{j}}_i. \quad (1.22)$$

Ciągłym parametrem ϑ_n są kąty obrotu $|\alpha_0|$ wokół osi obrotu $\frac{\alpha_0}{|\alpha_0|}$. Przywrócenie złamanej symetrii rotacyjnej nie jest trywialne. Wymaga zastosowania metod rzutowych teorii grup tudzież skorzystania z metod przybliżonych. W niniejszej rozprawie wszystkie przedstawione rachunki wykorzystują dokładny opis przywracania złamanych symetrii.

Symetrię obrotową w przestrzeni opisujemy w ramach konstrukcji grupy $SO(3)$. Zgodnie z twierdzeniem Eulera każdy element grupy $SO(3)$ jest obrotem dookoła pewnej osi [13]. W reprezentacji macierzowej dowolny obrót można wyrazić jako [19]:

$$A = B_\alpha C_\beta B_\gamma, \quad (1.23)$$

gdzie macierze B i C są obrotami, odpowiednio, dookoła osi z i y , a kąty $\alpha \in [0; 2\pi)$, $\beta \in [0; \pi]$ oraz $\gamma \in [0; 2\pi)$ są kątami Eulera. Natomiast dużo wygodniejszą grupą jest specjalna unitarna grupa $SU(2)$, dla której łatwiej o wyznaczenie nieprzywiedlnych reprezentacji oraz wprowadzenie operatorów rzutowych. Dowolność wyboru między grupami $SO(3)$ i $SU(2)$ jest zapewniona przez izomorfizm $\Psi : SO(3) \rightarrow SU(2)/\mathbb{Z}_2$, który mówi tyle, że dowolna reprezentacja grupy $SO(3)$ jest reprezentacją grupy $SU(2)$, a każdy obrót z $SO(3)$ odpowiada dokładnie dwu przekształceniom unitarnym g oraz $-g$ należącym do $SU(2)$.

Generatorami grupy $SU(2)$, z dokładnością do czynnika $\frac{\hbar}{2}$, są hermitowskie macierze Pauliego, które w bazie położeniowej przyjmują postać:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

dla których ślad $\text{tr} \sigma_i = 0$. Na mocy (1.8) oraz własności macierzy Pauliego stała struktury grupy (1.7) jest antysymetrycznym tensorem Levi'ego-Civity.

Kwadrat całkowitego momentu pędu w obrębie grupy $SU(2)$ jest operatorem Casimira. Wobec czego na mocy lematu Schura w reprezentacji nieprzywiedlnej J^2 jest operatorem diagonalnym. Ponadto wśród $N^2 - 1$ generatorów grupy $SU(N)$ ⁴ $N - 1$ jest diagonalnych. Wobec powyższego istnieje baza reprezentacji nieprzywiedlnej, dla której stan kwantowy zachowujący symetrię rotacyjną – a zatem będący elementem grupy $SU(2)$ – jest określony przez dwie liczby kwantowe – całkowity moment pędu J oraz jego rzut na z -ową oś M : $|JM\rangle$. Wówczas:

$$\hat{J}^2 |JM\rangle = J(J+1) |JM\rangle \quad \hat{J}_z |JM\rangle = M |JM\rangle \quad (1.25)$$

W reprezentacji produktowej natomiast stan kwantowy opisujemy przy użyciu momentów pędu oraz ich rzutów na z -ową oś wszystkich cząstek: $|j_1 m_1 j_2 m_2 \dots j_A m_A\rangle$.

Obie reprezentacje rozpinają tę samą przestrzeń wektorową, wobec czego istnieje liniowa transformacja przekształcająca wektory jednej bazy w drugą. W przypadku układu dwufermionowego współczynnikami rozwinięcia wektora bazy nieprzywiedlnej w bazie produktowej są współczynniki Clebscha-Gordana:

$$|JM\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \quad (1.26)$$

Powyższa analiza dotyczyła operatora całkowitego momentu pędu rozłożonego w bazie kartezjańskiej. Opis zarówno obrotu stanów kwantowych jak i obrotu samych operatorów w obrębie grupy $SU(2)$ jest znacznie bardziej przejrzysty w bazie sferycznej. Wzór (1.12) opisuje obrót układu kwantowego w obrębie pewnej grupy Liego. Aplikując go do grupy $SU(2)$ obrócony stan kwantowy:

$$\hat{\mathcal{R}}(\Omega) |JM\rangle = \sum_{M'=-J}^J D_{M'M}^J(\Omega) |JM'\rangle \quad (1.27)$$

rozkłada się w bazie nieprzywiedlnej reprezentacji J ze współczynnikami, będącymi funkcjami D-Wignera. Natomiast obrót samych operatorów $O = \mathcal{R}O'\mathcal{R}^\dagger$ da się wyrazić w równie prosty sposób:

$$\hat{\mathcal{R}}(\Omega) T_{LM} \hat{\mathcal{R}}^\dagger(\Omega) = \sum_{M'=-L}^L T_{LM'} D_{M'M}^L(\Omega) \quad (1.28)$$

pod warunkiem, że T_{LM} jest tensorem sferycznym rzędu L . Powyższa reguła transformacyjna stanowi jedną z definicji tensora sferycznego tzn. jeżeli operator obraca się zgodnie z (1.28), to nazywamy go tensorem sferycznym.

Tensorem sferycznym jest wektor położenia $\mathbf{r}$, który w bazie kartezjańskiej przyjmuje postać:

$$\mathbf{r}_\pm = \frac{\mp 1}{\sqrt{2}}(x \pm iy) \quad r_0 = z. \quad (1.29)$$

Podobnie, z dokładnością do czynnika $\frac{\mp 1}{\sqrt{2}}$, wygląda sferyczna reprezentacja operatora momentu pędu. Mianowicie składa się ona z tzw. operatorów drabinkowych:

$$J_\pm = J_x \pm iJ_y \quad J_0 = J_z, \quad (1.30)$$

⁴ $N^2 - 1$ jest wymiarem grupy $SU(N)$, a $N - 1$ jej rzędem

które w działaniu na stan kwantowy $|JM\rangle$ zwiększają lub odpowiednio zmniejszają magnetyczną liczbę kwantową M :

$$J_{\pm} |JM\rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} |JM \pm 1\rangle. \quad (1.31)$$

Operatory $J_{\pm}, J_z$ są generatorami grupy obrotów. Wobec tego wszystkie operatory spełniające relację (1.28) tzn. wszystkie tensory sferyczne spełniają bardzo istotne związki komutacyjne:

$$[J_z, T_{JM}] = \hbar M T_{JM} \quad [J_{\pm}, T_{JM}] = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} T_{JM \pm 1}. \quad (1.32)$$

Ponadto dla tensorów sferycznych zachodzi niezwykle użyteczne twierdzenie Wignera-Eckarta pozwalające na geometryczne wyznaczanie elementów macierzowych tensorów sferycznych.

Symetria izobaryczna

Oddziaływanie silne pomiędzy nukleonami w bardzo dobrym przybliżeniu zachowuje symetrię izobaryczną. To znaczy, że nie wyróżnia neutronów i protonów i traktuje je jak identyczne nukleony. Wówczas o nukleonie możemy myśleć jako o dubletowym stanie kwantowym o izospinie $t = 1/2$. W fizyce jądrowej stan $|t = 1/2, t_z = 1/2\rangle$ przypisujemy neutronowi, a $|t = 1/2, t_z = -1/2\rangle$ protonowi⁵. Naturalnie w środowisku jądrowym niebagatelne znaczenie ma oddziaływanie Coulomba działające pomiędzy naładowanymi protonami. Jednak skala oddziaływania *coulombowskiego* względem silnego pozwala na potraktowanie oddziaływania elektromagnetycznego w sposób perturbacyjny z niezaburzonymi funkcjami falowymi o dobrym izospinie. W taki sposób oddziaływanie Coulomba uwzględniane jest choćby w modelu powłokowym [20, 21].

Symetrię izobaryczną możemy potraktować jako symetrię rotacyjną w tzw. izoprzestrzeni, w której całkowity izospin T jest odpowiednikiem całkowitego momentu pędu. Zatem $\hat{\mathbf{T}}$ jest generatorem tej symetrii:

$$\hat{\mathbf{T}} = \sum_{i=1}^A \mathbf{t}_i \quad (1.33)$$

sparametryzowanej przez ϑ_m będące kątami obrotu $\boldsymbol{\alpha}_0$ wokół osi obrotu $\frac{\boldsymbol{\alpha}_0}{|\boldsymbol{\alpha}_0|}$ w izoprzestrzeni.

Wobec powyższego cała dyskusja dotycząca symetrii rotacyjnej w przestrzeni przenosi się na symetrię izospinową. Generator symetrii izobarycznej jest bowiem generatorem grupy $SU(2)$. Izospin posiada zatem wszystkie dyskutowane wcześniej własności tej grupy w szczególności:

- grupa generowana jest przez macierze Pauliego (1.24), które oznaczamy symbolem τ . Z tą różnicą, że w przypadku przestrzeni izospinowej macierzy τ nie mnoży się przez $\hbar$.

⁵Ze względów praktycznych, konwencja jądrowa jest odwrotna względem tej używanej w fizyce cząstek elementarnych.

- stan kwantowy niezmienniczy ze względu na obrót w izoprzestrzeni ma dwie dobrze zdefiniowane liczby kwantowe: całkowity izospin T oraz jego rzut na z -ową oś $T_z = \frac{N-Z}{2}$.
- reprezentację nieprzywiedlną nazywamy reprezentacją izospinową a reprezentację produktową protonowo-neutronową. Podobnie współczynniki rozwinięcia wektora jednej reprezentacji w bazie drugiej nazywamy współczynnikami Clebscha-Gordana.

Obrót w izoprzestrzeni rozumiemy jako mieszanie protonów z neutronami. Wyjątek stanowi obrót dookoła z -owej osi, gdyż ten generowany jest przez diagonalny operator $\hat{T}_z$. Pod nieobecność oddziaływania coulombowskiego niezmienniczość oddziaływania względem obrotu w izoprzestrzeni oznacza:

- zachowanie niezależności ładunkowej. Wówczas

$$V_{nn} = V_{pp} \quad [\hat{H}, \hat{\mathbf{T}}] = 0 \quad (1.34)$$

- zachowanie niezmienniczości ładunkowej. Wówczas

$$V_{np} = \frac{1}{2}(V_{nn} + V_{pp}) \quad [\hat{H}, \hat{\mathbf{T}}^2] = 0. \quad (1.35)$$

Grupy $SU(2)$ dla symetrii rotacyjnej i izospinowej są rozłączne. Wobec czego, generatory tychże symetrii komutują ze sobą. Jeżeli dwa operatory ze sobą komutują, to istnieje wspólna dla tych operatorów baza stanów własnych. Wobec tego, stan kwantowy niezmienniczy ze względu na obrót w przestrzeni i izoprzestrzeni możemy zapisać jako iloczyn tensorowy:

$$|IM; TT_z\rangle \quad (1.36)$$

Ponadto, hamiltonian jest symetryczny względem pewnego operatora wtedy i tylko wtedy, gdy jest przemienny z generatorem symetrii. Wobec tego, w przypadku zachowania symetrii rotacyjnej i izospinowej przez oddziaływanie jądrowe, stan (1.36) jest również stanem własnym hamiltonianu.

Przybliżone rozwiązanie kwantowego układu wielu ciał w postaci wyznacznika Slatera najczęściej jest pewną kombinacją liniową stanów (1.36). Wówczas liczby kwantowe: moment pędu I , jego rzut na z -ową oś w tzw. układzie laboratoryjnym ⁶ M izospin T nie są zachowane i należy je przywrócić np. stosując techniki rzutowe. Przywracanie symetrii metodami rzutowymi stanowi trzon tej pracy.

Symetria liczby cząstek

O symetrii liczby cząstek nikt nawet by nie wspomniał, gdyby nie fakt, iż realizacja przybliżenia pola średniego w obecności korelacji nadprzewodnikowych w hamiltonianie,

⁶Układ, w którym moment pędu oraz jego rzut są mierzalnymi liczbami kwantowymi. Inaczej: układ z przywróconymi symetriami.

prowadzi do funkcji falowej, w której liczba cząstek nie jest dobrze określona. Symetria jest generowana przez operator liczby cząstek:

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^A \hat{N}_i, \quad (1.37)$$

gdzie operator $\hat{N}_i$ jest operatorem liczby cząstek działającym na i -ty stan jednocząstkowy, a parametr ϑ_ϕ jest kątem cechowania ϕ_0 . Symetria liczby cząstek opisywana jest również przy użyciu grupy Liego izomorficznej do grupy obrotów $SO(2)$: $U(1) = \{\exp(i\phi); \phi \in [0; 2\pi)\}$, a zatem parametryzowana za pomocą jednego kąta obrotu ϕ_0 .⁷

Transformacja Galileusza

W nierelatywistycznym przybliżeniu, jakiego najczęściej dokonujemy do opisu układów jądrowych, oddziaływanie powinno być niezmiennicze ze względu na transformację Galileusza, a w przypadku relatywistycznym ze względu na transformację Lorentza. Grupy Galileusza i Lorentza również są różnicami Liego. Generatorem transformacji Galileusza jest operator całkowitego położenia:

$$\hat{\mathbf{R}} = \sum_{i=1}^A \mathbf{r}_i \quad (1.38)$$

a parametrem $\vartheta_v = \frac{m\mathbf{v}_0}{\hbar}$, gdzie $\mathbf{v}_0$ jest zmianą prędkości układu. Jednociałowa funkcja falowa ϕ poddana transformacji Galileusza zmienia fazę w sposób następujący:

$$\phi(\mathbf{r}, \sigma) \longrightarrow \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, \sigma). \quad (1.39)$$

Zmiana tej fazy wprowadza do funkcjonału gęstości dodatkowe człony, tak aby zachowywał on transformację Galileusza.

Przedstawione w niniejszym rozdziale symetrie stanowią znaczące uproszczenie teoretycznego opisu materii jądrowej. Cała niniejsza praca oparta jest na zjawisku spontanicznego łamania symetrii, będącego konsekwencją przybliżenia pola średniego, a ściślej opisu układu kwantowego w tymże przybliżeniu. Następnie, przy użyciu metod rzutowych, w teorii wieloreferencyjnej, przywraca się te symetrie tak, aby układ kwantowy przedstawić w układzie laboratoryjnym. W ten sposób całościowa konstrukcja modelu od metody pola średniego do metod rzutowych zbudowana jest w oparciu o fundamentalne symetrie. Wreszcie, badania nad fizycznym łamaniem jednej z nich, tj. symetrii izospinowej w rozpadach beta typu Fermiego dostarczają informacji na temat podstawowych założeń Modelu Standardowego, w tym przypadku hipotezy zachowania prądów wektorowych oraz istnienia trzech generacji kwarków.

⁷Warto przy okazji wspomnieć, że jest to ta sama grupa, która opisuje lokalną symetrię elektrodynamiki kwantowej.

Rozdział 2

Fizyka rozpadu beta

Analiza rozpadu beta w modelu uogólnionego funkcjonału gęstości stanowi trzon tej pracy. Narzędzie teoretyczne jakim jest teoria funkcjonału gęstości, czy też jej rozszerzenia zostanie omówiona w następnym rozdziale. Rozdział drugi przedstawia zarys teorii rozpadu beta poczynając od sformułowania jej przez Enrico Fermiego w latach 30 aż po unifikację oddziaływań elektromagnetycznych ze słabymi w teorii Glashowa-Salam-Weinberga.

§1. Teoria Fermiego dozwolonego rozpadu beta

Teoretyczny opis oddziaływań słabych nie byłby możliwy, gdyby nie obserwacja fundamentalnego dla tych oddziaływań zjawiska rozpadu beta. Zaledwie kilka lat od odkrycia promieniotwórczości Rutherford w 1899r. wyodrębnia rozpad alfa i beta, kierując się kryterium przenikalności. Rok później w doświadczeniu mierzącym stosunek masy do ładunku Becquerel udowadnia, że emitowana podczas rozpadu beta cząstka to elektron. Zaś w 1901r. Rutherford pokazuje, że za promieniotwórczością typu beta stoi przemiana pierwiastka chemicznego¹:

$${}^A_ZX_N \rightarrow {}^A_{Z+1}Y_{N-1} + e^- + \bar{\nu}_e \quad (2.1)$$

Naturalnie, nikt nie przypuszczał wówczas, że w rozpadzie produkowane jest neutrino. Z czasem o rozpadzie beta zaczęto myśleć jako o przemianie nie całego pierwiastka, lecz pojedynczego nukleonu:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \quad (2.2)$$

a od momentu odkrycia jego wewnętrznej struktury, wiemy, że rozpad beta zachodzi w obecności bozonu $W^\pm$ pośredniczącego między przemieniającymi się kwarkami:

$$d \rightarrow u + e^- + \bar{\nu}_e \quad (2.3)$$

W 1934r. Enrico Fermi, korzystając z dobrze już usytuowanego opisu mechaniki kwantowej, zaproponował pierwszy teoretyczny opis rozpadu beta [22, 23].²

¹Dopiero w 1913r. udaje się zidentyfikować pierwiastek, będący produktem przemiany.

²W zasadzie praca została wysłana do brytyjskiego dziennika *Nature* w 1932r. Pomimo odpowiedzi teorii na podejrzenie łamania zasady zachowania energii w rozpadzie beta oraz bardzo dobrej zgodności z danymi doświadczalnymi, edytor odrzucił artykuł, krytykując założenia teorii rozpadu beta jakoby były *too remote from physical reality to be of interest to readers*.

Ciągły rozkład elektronów emitowanych przez jądra atomowe wydawał się łamać fundamentalne zasady fizyki jak zachowanie energii, czy pędu. Ówczesny brak wiedzy na temat oddziaływania odpowiedzialnego za proces rozpadu czynił go tym bardziej interesującym. Podstawowym założeniem Fermiego, było dodanie do obserwowanych w rozpadzie neutronu, protonu i elektronu nieoddziałującej elektromagnetycznie cząstki o połówkowym spinie. Cząstka ta, nazwana przez Fermiego *neutrinem*, wprowadzała do układu energię i pęd, opisując rozpad w zgodzie z zasadami zachowania jednocześnie zachowując kształt widma energetycznego β emiterów³. Nieznaczną zmianę obserwuje się tuż przy maksymalnej dostępnej energii. Ta zmiana stanowiła przez wiele lat najbardziej dokładny pomiar eksperymentalny masy neutrino. Już w teorii Fermiego można było oszacować, że neutrino albo masy nie ma wcale, albo że jest znacznie lżejsze od elektronu. Ze względu na brak ładunku i zerową lub bardzo niewielką masę eksperymentalne potwierdzenie istnienia neutrino było bardzo trudne. Dopiero ponad 20 lat później neutrino zostaje odkryte w doświadczeniu Cowana-Reinesa z 1956r. [24].

Teoria Fermiego rozpadu beta wyznacza prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu. Wykorzystując nierelatywistyczny rachunek zaburzeń zależny od czasu, Fermi wprowadził do mechaniki kwantowej tzw. Złotą Regułę Fermiego [25]:

$$T_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{i \rightarrow f}|^2 \varrho_f(E), \quad (2.4)$$

wedle której prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu $T_{i \rightarrow f}$ jest proporcjonalne do elementu macierzowego przejścia $H'_{i \rightarrow f}$:

$$H'_{i \rightarrow f} = \langle \Psi_f | \hat{H}' | \Psi_i \rangle \quad (2.5)$$

oraz do gęstości energii stanów końcowych $\varrho_f(E) = \frac{dN}{dE_0}$.

Na podstawie analizy zasad zachowania energii i pędu, przy założeniu istnienia neutrino o zerowej masie oraz zaniedbywalnej energii kinetycznej powstałego w rozpadzie nukleonu można pokazać, że:

$$\varrho_f(E) = \frac{1}{4\pi^4 \hbar^6 c^3} p_e^2 (E_0 - E_e)^2, \quad (2.6)$$

gdzie p_e jest pędem a E_e energią powstałego w wyniku rozpadu elektronu, a E_0 dostępną energią układu kwantowego w stanie końcowym. Wówczas widmo energii elektronu przedstawia się wzorem:

$$P(E_e) dE_e = \frac{1}{2\pi^3 \hbar^7 c^5} |H'_{i \rightarrow f}|^2 p_e E_e (E_0 - E_e)^2 dE_e. \quad (2.7)$$

Tak zapisane widmo nie uwzględnia jednak efektów elektromagnetycznych różniących się dodatkowo w trzech dostępnych kanałach rozpadu. Mianowicie przemiana między nukleonami może zachodzić:

³Jego istnienie zostało po raz pierwszy przewidziane teoretycznie przez Wolfganga Pauliego w 1930 r. na podstawie analizy rozkładu energii elektronów powstających w rozpadzie beta.

- w kanale negatonowym, w którym przemianie ulega kwark górny u , produktem są kwark dolny d , elektron i antyneutrino elektronowe, a bozonem pośredniczącym jest W^- . Taki rozpad nie wymaga dodatkowej energii początkowej, dzięki czemu możliwy jest rozpad swobodnego neutronu;
- w taki sposób, że przemianie ulega kwark dolny d , produktem są kwark górny u , pozyton i neutrino elektronowe. Taki rozpad nie zachodzi dla swobodnego protonu ze względu na zasadę zachowania energii. Zatem rozpad β^+ jest możliwy dzięki energii wiązania ulegającego przemianie jądra atomowego;
- podobnie jak powyżej, tyle że w procesie wychwytu elektronu (*electron capture* - EC) przez jądro atomowe

Nieopisane wcześniej efekty elektromagnetyczne wprowadza się za pomocą funkcji Fermiego $F_0(\pm Z_f, W)$, które opisują zniekształcenie funkcji falowej elektronu w obecności punktowego ładunku jądra atomowego po przemianie [22]. Znak przy Z_f jest zależny od kanału przemiany + dla β^+ i EC, natomiast - dla rozpadu β^- . Uwzględniając, że $W = E/m_e c^2$ prawdopodobieństwo zajścia reakcji na jednostkę czasu wynosi:

$$T_{i \rightarrow f} = \frac{m_e^5 c^4}{2\pi^3 \hbar^7} |H'_{i \rightarrow f}|^2 \int_1^{W_0} p W (W_0 - W)^2 F_0(\pm Z_f, W) S(\pm Z_f, W) dW, \quad (2.8)$$

gdzie $p^2 = W^2 - 1$, a $W_0 = E_0/m_e c^2$. Funkcja $S(\pm Z_f, W)$ jest funkcją uwzględniającą poprawkę kształtu. W przybliżeniu rozpadów dozwolonych ma wartość 1 [26]. Jednak różni się nieznacznie od jedności, gdy dopuścić możliwość rozpadów wzbronionych. Wówczas czas połowicznego rozpadu wynosi:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{T_{i \rightarrow f}} = \frac{\kappa}{f_0 |H'_{i \rightarrow f}|^2}, \quad (2.9)$$

gdzie $\kappa = \frac{2\pi^3 \hbar^7 \ln 2}{m_e^5 c^4 G_F^2} = 6147s$. Stała Fermiego [27]

$$\frac{G_F}{(\hbar c)^3} = 1.1663787(6) \times 10^{-5} \text{GeV}^{-2} \quad (2.10)$$

wydzielona z elementu macierzowego to stała sprzężenia oddziaływań słabych. f_0 natomiast jest tzw. czynnikiem przestrzenno-fazowym *phase-space factor* obliczanym przy użyciu całki:

$$f_0^\mp = \int_1^{W_0} p W (W_0 - W)^2 F_0(\pm Z_f, W) S(\pm Z_f, W) dW. \quad (2.11)$$

Należy pamiętać, że przemiana, w której produktem końcowym jest jądro o zwiększonej liczbie protonów może zachodzić w dwóch niezależnych kanałach - w rozpadzie β^+ oraz w wychycie elektronu. Wówczas:

$$T_{i \rightarrow f} = T_{i \rightarrow f}^+ + T_{i \rightarrow f}^{EC} \implies f_0 = f_0^+ + f_0^{EC} \quad (2.12)$$

Czas życia t jest wielkością zależną nie tylko od elementu macierzowego przejścia, ale również od energii przejścia, jak i pola kulombowskiego wygenerowanego między wyprodukowanym leptonem a jądrem. Z tego względu w celu dokonania analizy systematycznej rozpadów rozważa się raczej liczbę $f_0 t_{1/2}$, którą nazywamy zredukowanym czasem życia i oznaczamy dalej przez ft . Wartość ta jest całkowicie zależna od struktury jądrowej i doskonale nadaje się do klasyfikacji rozpadów beta. Ze względu na jej wysoką wartość przy opisach rozpadów wprowadza się wartość $\log ft$. Im większa wartość $\log ft$ tym niższe prawdopodobieństwo przejścia – niższa „dozwoloność” rozpadu. Rozpad beta nazywamy dozwolonym, jeżeli wyprodukowane leptony znajdują się w stanie kwantowym o zerowym orbitalnym momencie pędu. W przeciwnym przypadku rozpad nazywamy wzbronionym, choć wzbronione są jedynie z nazwy. Dozwolone przejścia beta charakteryzują się najniższymi wartościami $\log ft$.

Rozpady dozwolone dalej klasyfikuje się ze względu na generowany prąd elektroślabych powodujący, że spiny wyemitowanych leptonów są antyuszeregowane i tworzą stan singletowy ($S=0$) lub są uszeregowane w stanie trypletowym ($S=1$). Pierwszy przypadek generują prądy wektorowe (ewentualnie prądy skalarne) a stowarzyszone z nimi przejścia nazywamy rozpadami typu Fermiego, natomiast w drugim za rozpad beta odpowiadają prądy osiowo-wektorowe (ewentualnie tensorowe) a sam rozpad nazywamy przejściem typu Gamowa-Tellera. Zgodnie z zasadą zachowania momentu pędu w przypadku przejść Fermiego jądro atomowe zachowuje całkowity moment pędu $\Delta J = 0$. Natomiast w rozpadach Gamowa-Tellera dozwolona jest zmiana całkowitego momentu pędu jądra $\Delta J = 0, \pm 1$ poza przypadkiem, kiedy równocześnie $J_i = 0$ oraz $J_f = 0$. Przypadek rozpadu $0^+ \rightarrow 0^+$ jest czystym rozpadem typu Fermiego przyjmującym najniższe wartości $\log ft$. Z tego względu takie przejścia nazywamy rozpadami superdozwolonymi. Przejścia superdozwolone zachodzą w szczególności pomiędzy izospinowymi stanami analogowymi $T = 1$ w jądrach o $N \approx Z$. W ogólności, dla jąder leżących wzdłuż linii $N = Z$ różnica w poziomach Fermiego jest najmniejsza, a zatem całka przekrycia – czyli *de facto* element macierzowy przejścia – jest największa.

§2. Zarys teorii elektrośłabej Glashowa, Salama i Weinberga

Nowa cząstka elementarna zaproponowana przez Pauliego wyjaśniająca zagadkę ciągłego widma elektronów pochodzących z rozpadu beta okazała się być kluczem do głębszego zrozumienia oddziaływań słabych. Obserwacje neutronów z końca lat 50 tych – w szczególności eksperyment wychwyty elektronu przez jądro ^{152}Eu wskazały na istnienie tej cząstki w bardzo konkretnym stanie kwantowym określonym przez skrętność – rzut spinu cząstki na kierunek jej pędu. Operator skrętności:

$$\hat{\lambda} = \mathbf{e}_p \hat{\mathbf{S}} = \frac{\mathbf{p} \hat{\sigma}}{2|\mathbf{p}|} \quad (2.13)$$

komutuje z hamiltonianem Diraca dla cząstki bezmasowej, przez co skrętność jest dobrą liczbą kwantową. Eksperyment potwierdził wówczas, że neutrina są cząstkami lewoskrętnymi a antyneutrina są prawoskrętne [28]. Taka charakterystyka oznacza łamanie fundamentalnych dla oddziaływań silnych i elektromagnetycznych symetrii ładunkowej (C) oraz symetrii parzystości (P). Złamanie tej drugiej przez oddziaływanie słabe zauważono na

podstawie systematyk związanych z rozpadem beta już na początku lat 50. a potwierdzono następnie w eksperymencie Wu *et al.* [29]. Doświadczenie polegało na obserwacji rozkładu kąтового natężenia strumienia elektronów powstających w wyniku rozpadu $^{60}\text{Co} \rightarrow ^{60}\text{Ni} + e^- + \bar{\nu}_e$. Przy zachowanej parzystości wyemitowane elektrony poruszałyby się z równym prawdopodobieństwem pod kątem nachylenia θ i $\pi - \theta$ do kierunku spinu jądra ^{60}Co , co doświadczenie całkowicie wykluczyło. Przeciwnie, wykazano wówczas maksymalne naruszenie parzystości. Amplitudy z ujemną i dodatnią parzystością były niemal identyczne a rozkład kątowy elektronów spełniał wzór:

$$W(\theta) = 1 + a \frac{\mathbf{p} \cdot \hat{\sigma}}{E} \quad (2.14)$$

z eksperymentalnie wyznaczonym parametrem $a = -1$.

Fermiony obdarzone masą nie mają określonej skrętności. Pozostając zatem w reprezentacji, dla której skrętność jest dobrą liczbą kwantową definiuje się operator rzutujący na określoną skrętność:

$$P_{L/R} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} \mp \gamma^5), \quad (2.15)$$

gdzie w notacji Pauliego-Diraca operator $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ nazywamy operatorem chiralności.

W poprzednim podrozdziale dokonaliśmy podziału dozwolonego rozpadu beta ze względu na generujące go prądy wektorowe oraz osiowo-wektorowe. Niezmienniczość oddziaływania ze względu na transformację Lorentza dopuszcza jednak 5 możliwych typów operatorów i są to:

- operatory skalarne (S) postaci $\hat{O}^S = \gamma_0$,
- operatory wektorowe (V) postaci $\hat{O}_\mu^V = \gamma_0\gamma_\mu$,
- operatory osiowo-wektorowe (A) postaci $\hat{O}_\mu^A = \gamma_0\gamma_5\gamma_\mu$. Są to obiekty powstałe z iloczynu wektorowego wektorów typu V . Wektory A odróżnia się od V ze względu na inne zachowanie się względem symetrii parzystości.
- operatory pseudoskalarne (P) postaci $\hat{O}^P = \gamma_0\gamma_5$. Są to obiekty powstałe z iloczynu skalarnego wektora typu V i A . Skalary P odróżnia się od S ze względu na inne zachowanie się względem symetrii parzystości.
- operatory tensorowe (T) postaci $\hat{O}_{\mu\nu}^T = \gamma_0(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)$.

Eksperymentalnie potwierdzona lewoskrętność neutrina i prawoskrętność antyneutrina, a w konsekwencji zachowanie symetrii CP ⁴ przez oddziaływanie słabe tj. symetrii ładunkowej i parzystości występujących jednocześnie, wykluczają skalarny, pseudoskalarny oraz tensorowy charakter prądu leptonowego. Wobec czego oddziaływanie słabe opisywane jest

⁴W rzeczywistości również symetria CP jest w niewielkim stopniu złamana. Na łamanie symetrii CP wskazują rozpady obojętnych kaonów na naładowane piony.

przez tzw. teorię $V - A$, dla której prąd w analogii do elektrodynamiki kwantowej zapisujemy:

$$j^\mu = \bar{\psi}_{L/R} \gamma^\mu \psi_{L/R} = \frac{1}{2} \bar{\psi} \gamma^\mu (1 - \gamma^5) \psi. \quad (2.16)$$

Pierwszy składnik odpowiada za prądy wektorowe, zaś drugi za osiowo-wektorowe. Dla uproszczenia przyjęto $\bar{\psi} = \psi^* \gamma_0$, gdzie ψ jest funkcją falową oddziałującego kwarku. Ze względu na potwierdzoną zasadę maksymalnego złamania parzystości część osiowo-wektorowa prądu elektrosłabego w powyższym równaniu ma znak minus.

Słuszność wzoru (2.16) można udowodnić, wyprowadzając prąd Noether z części lagranżjanu ($\mathcal{L}_{CC}$) teorii unifikacji $SU(2)_L \times U(1)_Y$ Glashowa-Salama-Weinberga [30, 31, 32] odpowiadającej naładowanym prądom elektrosłabym (*charge currents, CC*):⁵

$$\mathcal{L}_{CC} = \sum_{p=1,2,3} \bar{q}_{up}^p W_\mu^\dagger \left[\frac{g}{2\sqrt{2}} \gamma^\mu (1 - \gamma^5) \right] q'_{low}^p + \bar{\nu}_p W_\mu^\dagger \left[\frac{g}{2\sqrt{2}} \gamma^\mu (1 - \gamma^5) \right] l_p, \quad (2.17)$$

gdzie sumowanie odbywa się po wszystkich zapachach p , W_μ to pole wektorowe generowane przez pośredniczący bozon, g jest ładunkiem słabym a q_{up} , q'_{low} , ν i l reprezentują odpowiednio wektory złożone z kwarków górnych i dolnych w obrębie dubletu danej generacji oraz neutron i leptonów o określonym zapachu p . Wektor q'_{low} reprezentuje stan, w którym kwarki zostały zmieszane w wyniku oddziaływania z polem W_μ :

$$q'_{low}^p = \sum_r V_{CKM}^{pr} q_{low}^r. \quad (2.18)$$

Macierz V_{CKM} jest macierzą mieszania kwarków Cabibbo-Kobayashiego-Maskawy (macierz CKM), o której szerzej opowiada paragraf 4. tego rozdziału. Grupa $SU(2)_L$ jest trójwymiarową grupą obrotów w lewoskrętnej reprezentacji, a $U(1)_Y$ jest unitarną grupą z unifikowanym hyperładunkiem $Y = Q - I_3$ łączącym elektromagnetyczny ładunek Q z rzutem na trzecią oś słabego izospinu I_3 .

Gęstość hamiltonianu przejścia wyraża się przez słaby prąd między kwarkami oraz prąd leptonowy:

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\tau}^\pm j_q^{\dagger\mu} j_\mu^{\text{lep}} + \text{h.c.} \quad (2.19)$$

gdzie operator $\tau^\pm$ jest operatorem drabinkowym w przestrzeni izospinowej. Powyższy wzór nie zawiera stałej sprzężenia Fermiego G_F (2.10), ponieważ w stosowanej tu notacji, została ona wyciągnięta z elementu macierzowego przejścia i znajduje się w definicji stałej κ danej wzorem (2.9).

Z perspektywy rachunków przeprowadzanych w niniejszej rozprawie, ale i w większości modeli jądrowych, gęstość hamiltonianu należałoby przeformułować z języka kwarków na

⁵Unifikacja oddziaływań słabych i elektromagnetycznych z 1973r. bardzo szybko została nagrodzona Nagrodą Nobla – 1979r. Teoria stanowi fundament Modelu Standardowego tj. modelu lokalnej symetrii cechowania w obrębie grupy $SU(2)_L \times U(1)_Y \times SU(3)_C$.

język nukleonów. Ze względu na efekty renormalizacji oddziaływań silnych nie jest to trywialne zadanie. Jednak przy założeniu, że proces rozpadu jest niskoenergetyczny, a zatem przekaz pędu jest niewielki, możemy założyć, że $j_q^\mu = j_{\text{had}}^\mu$, gdzie j_{had}^μ jest słabym prądem hadronowym [33].

W teorii Fermiego założono, że oddziaływanie odpowiedzialne za rozpad beta jest kontaktowe. W przypadku niewielkiej wymiany pędu jest to bardzo dobre przybliżenie, często stosowane w rachunkach dotyczących rozpadów beta. W niniejszej pracy we wszystkich obliczeniach przyjmuje się to właśnie przybliżenie. Natomiast natura oddziaływań słabych ujawnia się dla wyższych energii ok. 80 GeV, gdzie wymiana pędu jest rzędu wielkości mas naładowanych bozonów pośredniczących $W^\pm$. Wówczas, naturalnie, założenia, że oddziaływanie jest kontaktowe oraz że $j_q^\mu = j_{\text{had}}^\mu$ nie są słuszne [34].

Mając na uwadze wzory (2.16) i (2.19) oraz możliwość różnych stałych sprzężenia oddziaływań wektorowych i osiowo-wektorowych gęstość hamiltonianu w rozpadzie β dla układu czterech fermionów możemy zapisać następująco:

$$\mathcal{H}'_{V-A} = \frac{V_{\text{ud}}}{\sqrt{2}} [g_V \bar{p}\tau^\pm \gamma_\mu n \bar{e}\gamma_\mu \nu - g_A \bar{p}\tau^\pm \gamma_\mu \gamma_5 n \bar{e}\gamma_\mu \gamma_5 \nu] + \text{h.c.} \quad (2.20)$$

gdzie V_{ud} jest wiodącym elementem macierzowym macierzy CKM. Pojawienie się dwu *a priori* różnych stałych sprzężenia prądów wektorowych g_V i osiowowektorowych g_A spowodowane jest renormalizacją prądu do poziomu nukleonowych stopni swobody [35]. Aby teraz obliczyć element macierzowy przejścia

$$H'_{i \rightarrow f} = \int \langle \psi_f | \mathcal{H}'_{V-A} | \psi_i \rangle dV \quad (2.21)$$

pojawiający się we wzorze na czas połowicznego rozpadu (2.9) można skorzystać z dwóch przybliżeń definiujących przejścia dozwolone. Mianowicie, leptonowe funkcje falowe w obrębie jądra można uznać za stałe a funkcje jądrowe potraktować w przybliżeniu nierelatywistycznym.⁶ Ponadto, uwzględniając niemierzalne składowe takie jak magnetyczna liczba kwantowa stanu końcowego m_f , otrzymujemy:

$$|H'_{i \rightarrow f}|^2 = \frac{G_V^2}{2I_i + 1} M_F^2 + \frac{G_A^2}{2I_i + 1} M_{GT}^2, \quad (2.22)$$

gdzie

$$G_V = V_{\text{ud}} g_V \quad G_A = V_{\text{ud}} g_A, \quad (2.23)$$

zaś I_i jest całkowitym momentem pędu jądra przed rozpadem. M_F i M_{GT} oznaczają odpowiednio elementy macierzowe Fermiego i Gamowa-Tellera:

⁶W przypadku przejść wzbronionych, dla których wyemitowane leptony niosą moment pędu $l > 0$ takie założenia nie są spełnione. Przejścia wzbronione nie są rozpatrywane w niniejszej rozprawie.

$$|M_F|^2 = \sum_{m_f} |\langle \psi_f | T^\pm | \psi_i \rangle|^2 \quad (2.24)$$

$$|M_{GT}|^2 = \sum_{m_f} \sum_n |\langle \psi_f | \sum_k t_k^\pm \sigma_n^k | \psi_i \rangle|^2 \quad (2.25)$$

gdzie sumowania występują po k , który jest indeksem numerującym wszystkie nukleony w jądrze ulegającym rozpadowi, po n składowych operatora spinu σ oraz po wszystkich dostępnych magnetycznych liczbach kwantowych m_f stanu końcowego. Operator $T^\pm$ jest operatorem drabinkowym całego układu jądrowego: $T^\pm = \sum_k \tau_k^\pm$. Na podstawie powyższych wzorów opisane we wcześniejszym paragrafie reguły wyboru dla przejść dozwolonych można uzupełnić o brak zmiany parzystości układu kwantowego $\Delta\pi = 0$. Ponadto, w przypadku przemiany Fermiego stan kwantowy pozostaje w obrębie tego samego multipletu izospinowego tj. $\Delta T = 0$.

Wzór (2.22) można przepisać w języku zredukowanych prawdopodobieństw przejść i wówczas:

$$|H'_{i \rightarrow f}|^2 = B_F + B_{GT}. \quad (2.26)$$

Zatem finalnie, zgodnie ze wzorem (2.9), zredukowany czas życia ft zapisujemy jako:

$$ft = \frac{\kappa}{B_F + B_{GT}}. \quad (2.27)$$

§3. Stałe sprzężenia oddziaływań elektroślabych

W przypadku oddziaływań słabych zachodzących jedynie pomiędzy leptonami zachodzi równość stałych sprzężenia prądów wektorowych i osiowo-wektorowych $g_A = g_V$ [34]. W przeciwieństwie do leptonów hadrony posiadają wewnętrzną strukturę. I tak w przypadku półleptonowego rozpadu beta prąd słaby okazuje się być zachowany jedynie w kanale wektorowym, o czym mówi tzw. hipoteza zachowania prądu wektorowego (CVC - *Conserved Vector Current*) [36]. Wówczas:

$$g_V = 1. \quad (2.28)$$

Zachowanie prądów wektorowych w obecności oddziaływania słabego jest niezwykle istotne przy wyznaczaniu wiodącego elementu macierzowego V_{ud} macierzy mieszania kwarków (2.18), a więc również unitarności tejże macierzy. Na podstawie (2.20) można powiązać element V_{ud} z obliczanym zredukowanym czasem życia.

W przypadku prądów osiowo-wektorowych stała sprzężenia różni się w zależności od hadronów biorących udział w rozpadzie [34]. Prąd osiowo-wektorowy nie jest zachowany. Mówi się o częściowym zachowaniu tego prądu - hipoteza PCAC (*Partially Conserved Axial Current*) [37]. Dywergencja prądu osiowo-wektorowego ma własności pseudoskalarne. Takie pole zaś generowane jest przez piony, które oddziałują silnie z nukleonami w jądrze. Wobec czego stałą sprzężenia g_A można powiązać ze stałą rozpadu pionu F_π

oraz ze stałą sprzężenia pion-nukleon $g_{\pi N}$. Taką zależność opisuje relacja Goldbergera-Triemana [38, 39]. W uproszczonej wersji:

$$g_A = \frac{F_\pi g_{\pi N}}{\sqrt{2}M_N} \quad (2.29)$$

wskazuje, że g_A różni się w zależności od rozpadających się w przemianie beta hadronów. W przypadku rozpadu beta między nukleonami [40]:

$$g_A = -1.2723(23) \quad (2.30)$$

Badanie wartości stałej sprzężenia osiowo-wektorowego prądu w oddziaływaniach słabych jest do dzisiaj jednym z kluczowych zagadnień w obrębie analizy rozpadów beta [41, 42, 43, 44, 45]. Okazuje się bowiem, że w środowisku jądrowym obliczenia dotyczące rozpadów w kanale Gamowa-Tellera (2.25) systematycznie niedoszacowują wartości elementów macierzowych otrzymanych w eksperymencie. Problem zyskał miano tzw. efektu *quenchingu*, dla którego:

$$g_A^{\text{eff}} = qg_A, \quad (2.31)$$

gdzie q jest parametrem renormalizacyjnym zwanym parametrem *quenchingu*. Na wartość efektywnej stałej sprzężenia g_A^{eff} może wpływać wiele czynników:

- Za największy wkład uważa się wprowadzenie prądów uwzględniających wymianę mezonów tzw. prądów wielociałowych [46, 47]. Takie rachunki wychodzą poza powszechnie stosowane przybliżenie impulsu *impulse approximation*, w którym aktywny nukleon przemienia się w wyniku rozpadu beta z biernym udziałem reszty jądra atomowego.
- Uwzględnienie nienukleonowych stopni swobody w funkcji falowej [48, 49]. Przykładem takiego procesu może być rozpad Gamowa-Tellera przez rezonans Δ , będący wzbudzeniem neutronu. Jednak dane eksperymentalne z reakcji (p,n) i (n,p) wskazują, że takie skorelowanie funkcji falowej odpowiada jedynie za nieznaczną część parametru renormalizacji q [50].
- Istotny wkład do parametru *quenchingu* mogą przynosić ograniczenia modeli jądrowych wykorzystywanych do obliczeń rozpadu beta [51, 52, 53]. W przypadku modelu powłokowego jest to przede wszystkim ograniczona przestrzeń walencyjna. Modele z oddziaływaniami dopasowywanymi do pewnej powłoki uniemożliwiają bowiem przeprowadzenie rachunków korelujących niskoenergetyczne stany z wyżej położonymi stanami wzbudzonymi.

§4. Macierz Cabibbo—Kobayashiego—Maskawy

Pomiary rozpadów cząstek dziwnych do nukleonu w porównaniu z rozpadami między nukleonami pokazały, że te pierwsze są znacznie rzadsze. Różnicą między tymi przejściami jest zmiana dziwności $\Delta S = 1$. Rozwiązanie tego zagadnienia zaproponował Cabibbo [54],

wprowadzając pojęcie mieszania kwarków biorących udział w oddziaływaniu słabym. Założył on, że w obecności pola pośredniczącego w oddziaływaniu słabym kwarki nie są dłużej stanami własnymi opisywanymi przez zapach, a stanowią jego superpozycję. W czasach postawienia tej hipotezy doświadczalnie potwierdzono istnienie trzech kwarków: u, d i s , z których dwa z ładunkiem $-\frac{1}{3}$ mogły ulegać zmieszaniu. Wprowadzono zatem tzw. kąt mieszania Cabibbo ϑ_C taki, że:

$$\begin{pmatrix} d' \\ s' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta_C & \sin \vartheta_C \\ -\sin \vartheta_C & \cos \vartheta_C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ s \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

gdzie stany d, s są czystymi stanami kwarkowymi o ładunku elektrycznym $Q = -\frac{1}{3}$, a kwarki d', s' są obróconymi stanami własnymi ze względu na oddziaływanie słabe. Eksperyment wykazał, że kąt Cabibbo $\vartheta_C \approx 12^\circ$ [54].

Wraz z odkryciem trzeciej generacji kwarków okazało się, że mieszanie należy uzupełnić o kwark b . Wówczas unitarną macierz obrotu mieszania kwarków należy rozszerzyć o kolejny wymiar. Taką macierz nazywa się macierzą Cabibbo-Kobayashiego-Maskawy [55]:

$$V_{\text{CKM}} = \begin{pmatrix} V_{ud} & V_{us} & V_{ub} \\ V_{cd} & V_{cs} & V_{cb} \\ V_{td} & V_{ts} & V_{tb} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

i wprowadza się do teorii Glashowa-Weinberga-Salama jak pokazano we wzorze (2.17). Zmieszany stan d' wprowadza zatem element V_{ud} do amplitudy prądu hadronowego (2.18). Zaś wartość $|V_{ij}|^2$ stanowi amplitudę prawdopodobieństwa przejścia kwarku i w j .

Ze względu na założenie, że sprzężenia pomiędzy kwarkami w stanach czystych a kwarkami w stanach obróconych są dane przez tę samą stałą sprzężenia G_F (2.10), macierz CKM musi być macierzą unitarną. Jak dotąd najdokładniej wyznaczanymi elementami macierzowymi są elementy V_{ud} oraz V_{us} . Wobec tego najdokładniejszym testem unitarności macierzy CKM jest sprawdzenie, czy jej pierwszy wiersz spełnia tożsamość:

$$|V_{ud}|^2 + |V_{us}|^2 + |V_{ub}|^2 = 1 \quad (2.34)$$

Element wiodący V_{ud} zależy jedynie od kwarków pierwszej generacji, wobec czego jest wyznaczany najprecyzyjniej spośród pozostałych elementów. Do najdokładniejszych metod wyznaczania tego elementu zaliczają się rozpady beta jąder atomowych. Na podstawie rozpadów superdozwolonych tj. czystych przejść wektorowych $0^+ \rightarrow 0^+$ wiodący element pierwszego wiersza macierzy CKM w modelu powłokowym przyjmuje wartość [56]:

$$|V_{ud}| \equiv |V_{ud}|^{0^+ \rightarrow 0^+} = 0.97420 \pm 0.00021 \quad (2.35)$$

Jest to najdokładniejsza obecnie metoda wyznaczania tego elementu. Rozpady beta jąder zwierciadlanych o izospinie $T = \frac{1}{2}$ stanowią alternatywną, acz mniej dokładną metodę wyznaczania elementu V_{ud} . Najnowsze obliczenia z użyciem modelu powłokowego [57] wskazują, że:

$$|V_{ud}|^{\text{mirror}} = 0.9730 \pm 0.0014 \quad (2.36)$$

Szczegółowa analiza wiążąca strukturę jądra atomowego z badaniem wartości elementu macierzowego V_{ud} będzie przeprowadzona w rozdziale 4.

Element V_{ud} można również otrzymać na podstawie wyznaczania czasu życia swobodnego neutronu. Rozpad neutronu zachodzi pod wpływem oddziaływań zarówno wektorowych jak i osiowo-wektorowych. Metoda ta jest wprawdzie wolna od poprawek związanych z strukturą jądrową, ale obarczona jest dużą niepewnością generowaną przez słabą znajomość stałej sprzężenia prądów osiowowektorowych g_A (2.30). Wyznaczenie elementu V_{ud} wymaga w takim przypadku pomiaru dwu obserwabli: czasu życia $\tau_n = 885.7(8)$ [58] oraz tzw. parametru asymetrii elektronu $A_\beta = -0.1173(13)$ [58]. Parametr korelacji A_β jest bezpośrednio związany ze stałą g_A . Szczegółowa analiza parametrów korelacji będzie przeprowadzona w następnym paragrafie tego rozdziału. Dokładność pomiaru czasu życia przekłada się na mniejszą precyzję elementu V_{ud} [58]:

$$|V_{ud}|^n = 0.9746 \pm 0.0049 \quad (2.37)$$

Kolejną metodą wyznaczania elementu V_{ud} jest pomiar rozpadu beta naładowanego pionu $\pi^\pm \rightarrow \pi^0 e^\pm \nu_e$. Jest to czysto wektorowy rozpad wolny od konieczności wprowadzania poprawek jądrowych. Jednak wyzwaniem tej metody jest bardzo niewielki współczynnik rozgałęzienia 10^{-8} kanału rozpadu beta. Przez co i w tym przypadku dokładność jest mniejsza niż w metodach jądrowych. Element V_{ud} wynosi bowiem [59]:

$$|V_{ud}|^\pi = 0.9728 \pm 0.0030 \quad (2.38)$$

Element V_{us} wyznacza się przede wszystkim z rozpadu nienaładowanych kaonów w 5 różnych kanałach [60], czy też rozpadów beta hiperjader [61, 62] tj. jader, posiadających związany hiperon – cząstkę, której budulcem jest kwark dziwny. Najdokładniejszy pomiar stanowią pierwsze z przedstawionych rozpadów. Wykluczyć można wówczas poprawkę izospinową związaną z mieszaniami mezonów π^0 oraz η . Uśrednienie wyznaczonego ze wszystkich eksperymentów współczynnika rozgałęzienia wraz z rachunkami QCD prowadzonymi na sieci dają [63]

$$|V_{us}| = 0.2243 \pm 0.0005 \quad (2.39)$$

Najmniej dokładny pomiar wśród elementów pierwszego wiersza macierzy CKM stanowi element V_{ub} . Jego wyznaczenie jest skomplikowane ze względu na duże tło w analizowanym rozpadzie: $B \rightarrow \pi l \bar{\nu}$. Eksperymentalny współczynnik rozgałęzienia oraz rachunki QCD na sieci [64] prowadzą do wyniku [63]:

$$|V_{ub}| = (3.94 \pm 0.36) \times 10^{-3} \quad (2.40)$$

Mając na uwadze wartości (2.35), (2.39) oraz (2.40) tożsamość unitarności macierzy CKM przedstawia się następująco:

$$|V_{ud}|^2 + |V_{us}|^2 + |V_{ub}|^2 = 0.99939 \pm 0.00045 \quad (2.41)$$

Zatem z dokładnością do 2σ macierz CKM jest unitarna. Należy w tym miejscu podkreślić, że wkład $|V_{ub}|^2$ jest marginalny i mieści się w błędzie, wkład $|V_{us}|^2$ stanowi 5% testu unitarności a 95% pochodzi od wiodącego elementu V_{ud} . Stąd dokładność wyznaczenia tego elementu jest kluczowa w badaniu unitarności macierzy CKM. Odstępstwo od unitarności macierzy CKM oznaczałoby istnienie kolejnych generacji kwarków lub nieznannej fizyki poza Modelem Standardowym jak istnienie prawoskrętnych prądów, równoznacznie wkładów wychodzących poza prądy $V - A$ w teorii elektrosłabej. Naturalnie hipotetyczna 4 generacja wprowadzałaby do modelu tak ciężkie kwarki, że ich zmieszanie z pozostałymi byłoby nie do wykrycia na poziomie obecnej precyzji.

Macierz CKM jest macierzą obrotu, zatem zgodnie z (1.23) można ją rozłożyć na obroty sparametryzowane trzema kątami Eulera ϑ_{12} , ϑ_{23} i ϑ_{13} oraz jedną fazę δ , będącą miarą łamania symetrii odwrócenia w czasie, a więc i łamania symetrii CP w Modelu Standardowym. Wyniki eksperymentów wskazują, że kąty Eulera są shierarchizowane $\vartheta_{13} \ll \vartheta_{23} \ll \vartheta_{12} \ll 1$. Tę hierarchię można przedstawić w wygodnej parametryzacji Wolfensteina macierzy CKM. Wówczas:

$$\lambda = \sin \vartheta_{12} = \frac{|V_{us}|}{\sqrt{|V_{ud}|^2 + |V_{us}|^2}} \quad A\lambda^2 = \sin \vartheta_{23} = \lambda \left| \frac{V_{cb}}{V_{us}} \right| \quad (2.42)$$

$$A\lambda^3(\rho + i\eta) = \sin \vartheta_{13}e^{i\delta} = V_{ub}^* \quad (2.43)$$

a sama macierz przyjmuje postać:

$$V_{\text{CKM}} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\lambda^2}{2} & \lambda & A\lambda^3(\rho - i\eta) \\ -\lambda & 1 - \frac{\lambda^2}{2} & A\lambda^2 \\ A\lambda^3(1 - \rho - i\eta) & -A\lambda^2 & 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad (2.44)$$

Analiza macierzy CKM w tej parametryzacji prowadzi do wniosku, że trzecia generacja ciężkich kwarków t, b nie miesza się z pierwszą i drugą, aż do wyrazów rzędu λ^3 , a kąt ϑ_{12} jest kątem Cabibbo zdefiniowanym w (2.32).

Wynikiem dopasowania parametrów Wolfensteina do wyznaczonych teoretycznie i eksperymentalnie elementów macierzowych jest unitarna macierz złożona ze wszystkich amplitud przejść między kwarkami [63]:

$$V_{\text{CKM}} = \begin{pmatrix} 0.97446 \pm 0.00010 & 0.22452 \pm 0.00044 & 0.00365 \pm 0.00012 \\ 0.22438 \pm 0.00044 & 0.97359^{+0.00010}_{-0.00011} & 0.04214 \pm 0.00076 \\ 0.00896^{+0.00024}_{-0.00023} & 0.04133 \pm 0.00074 & 0.999105 \pm 0.000032 \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

§5. Metody jądrowe wyznaczania elementu macierzowego V_{ud}

Wyznaczenie elementu macierzowego V_{ud} metodami jądrowymi nie jest łatwym zadaniem. Składają się na to dwa aspekty: konieczność uwzględnienia szeregu poprawek związanych ze strukturą jądra oraz fakt, że dozwolony rozpad beta zachodzi w dwu kanałach: Fermiego i Gamowa-Tellera, a stała sprzężenia prądów osiowowektorowych w ośrodku jest obciążona ogromną niepewnością ze względu na efekt *quenchingu* opisany w paragrafie 3 tego rozdziału.

Wspomniane poprawki możemy podzielić na dwie grupy. Mianowicie, poprawki związane z procesami radiacyjnymi (RC) nieuchwytnymi w eksperymencie oraz poprawki izospinowe związane z łamaniem tejże symetrii w środowisku jądrowym [59, 65, 66]. Te pierwsze można dalej podzielić na zależne δ_R [67, 68] oraz niezależne od danego jądra Δ_R [69, 70]:

$$1 + RC = (1 + \delta_R)(1 + \Delta_R) \quad (2.46)$$

Część zależną od jądra dalej dzieli się na poprawkę δ'_R [71, 72, 73, 74] zależną jedynie od liczby protonów w jądrze po przemianie Z_f i dostępnej energii układu w stanie końcowym W_0 oraz na poprawkę δ_{NS} [75, 76] wymagającą szczegółowych obliczeń związanych bezpośrednio ze strukturą jądra. Wówczas:

$$1 + RC = (1 + \delta'_R)(1 + \delta_{NS})(1 + \Delta_R) \quad (2.47)$$

Wartość poprawki δ'_R szacuje się metodami elektrodynamiki kwantowej do rzędu $Z^2\alpha^3$. Jest ona niezależna od rodzaju prądu odpowiedzialnego za rozpad beta w przeciwieństwie do poprawek δ_{NS} i Δ_R , które są różne w zależności, od tego czy rozpad zachodzi w kanale Fermiego, czy w kanale Gamowa-Tellera.

Element macierzowy Fermiego w granicy zachowania symetrii izospinowej $|M_F^0|$ można wyrazić przy użyciu izospinowych współczynników Clebscha-Gordana. Zgodnie ze wzorami (1.31) i (2.24) w przypadku przejść superdozwolonych pomiędzy stanami analogowymi $T = 1$ $|M_F^0|^2 = 2$, natomiast dla rozpadów między jądrami zwierciadlanymi $T = \frac{1}{2}$ $|M_F^0|^2 = 1$. Złamana symetria oddziaływania między protonami i neutronami powoduje konieczność wprowadzenia do tego elementu poprawki izospinowej δ_C [65, 70, 77]. A biorąc po uwagę fakt, że poprawka δ_{NS} jest ściśle związana ze strukturą jądrową, a więc z elementem macierzowym, możemy zapisać, że:

$$|M_F|^2 = |M_F^0|^2(1 + \delta_{NS}^V - \delta_C^V) \quad (2.48)$$

Natomiast w przypadku elementu Gamowa-Tellera (2.25) jego wartość w granicy symetrii izospinowej nie może być wyznaczona jedynie na gruncie własności geometrycznych. Niemniej dla zachowania konsystencji:

$$|M_{GT}|^2 = |M_{GT}^0|^2(1 + \delta_{NS}^A - \delta_C^A) \quad (2.49)$$

Uwzględniając teraz wszystkie poprawki oraz fakt, iż ze względu na funkcję kształtu $S(\pm Z_f, W)$ zdefiniowaną w (2.8) czynnik fazowy f_0 jest różny w zależności od kanału rozpadu, czas połowicznego zaniku wynosi:

$$t = \frac{\kappa}{V_{ud}^2(1 + \delta'_R) \left[f_V g_V^2(1 + \Delta_R^V) |M_F|^2 + f_A g_A^2(1 + \Delta_R^A) |M_{GT}|^2 \right]}. \quad (2.50)$$

Przejścia superdozwolone $0^+ \rightarrow 0^+$ typu Fermiego są czystymi przejściami wektorowymi, dla których $|M_F^0|^2 = 2$ a $|M_{GT}^0|^2 = 0$. Wobec tego:

$$f_V t^{0^+ \rightarrow 0^+} = \frac{\kappa}{2V_{ud}^2(1 + \delta'_R) g_V^2(1 + \Delta_R^V)(1 + \delta_{NS}^V - \delta_C^V)} \quad (2.51)$$

W celu wyznaczenia elementu macierzowego V_{ud} warto przegrupować składowe powyższego wyrażenia, tak aby po prawej stronie pozostały elementy niezależne od jądra. I tak:

$$\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+} \equiv f_V t^{0^+ \rightarrow 0^+} (1 + \delta'_R)(1 + \delta_{NS}^V - \delta_C^V) = \frac{\kappa}{2V_{ud}^2 g_V^2(1 + \Delta_R^V)} \quad (2.52)$$

W ten sposób wartość $\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+}$ jest niezależna od danego przejścia superdozwolonego i *a priori* można wyznaczyć uniwersalną wartość elementu macierzowego V_{ud} . Wyższą precyzję otrzymanego wyniku uzyskuje się, średniując $\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+}$ po wszystkich dostępnych przypadkach rozpadów. Obliczenia teoretyczne poprawek wraz z danymi doświadczalnymi dotyczącymi poszczególnych przejść silnie wskazują bowiem, że $\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+} \approx \text{const}$, co potwierdza hipotezę CVC. Wobec tego otrzymujemy, że:

$$V_{ud}^2 = \frac{\kappa}{2\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+} (1 + \Delta_R^V)}. \quad (2.53)$$

Rozpady superdozwolone stanowią jak dotąd najdokładniejszą metodę wyznaczania elementu macierzowego V_{ud} . Podejściem alternatywnym w obrębie metod jądrowych jest analiza rozpadów beta między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ [78]. W przypadku tych przejść oba kanały rozpadu – typu Fermiego i typu Gamowa-Tellera są dozwolone. Słabym punktem tej metody jest konieczność uwzględnienia efektu *quenchingu* stałej sprzężenia prądów osiowowektorowych, co w zasadzie wykluczałoby tę metodę ze względu na bardzo dużą niepewność, którą obarczony zostałby element macierzowy V_{ud} . W pracy [78] proponowano obejście tego problemu przez wykorzystanie dodatkowej obserwacji mierzonej w eksperymencie.

I tak dla przejść w jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$, w którym oba kanały rozpadu są dozwolone a $|M_F^0|^2 = 1$, wzór (2.50) można przedstawić w następujący sposób:

$$\mathcal{F}t^{\text{mirror}} \equiv f_V t(1 + \delta'_R)(1 + \delta_{NS}^V - \delta_C^V) = \frac{\kappa}{V_{ud}^2 g_V^2(1 + \Delta_R^V) \left(1 + \frac{f_A}{f_V} \varrho^2\right)}, \quad (2.54)$$

gdzie współczynnik mieszania ϱ definiuje się jako:

$$\varrho = \frac{g_A |M_{GT}^0|}{g_V |M_F^0|} \sqrt{\frac{(1 + \delta_{NS}^A - \delta_C^A)}{(1 + \delta_{NS}^V - \delta_C^V)}} \quad (2.55)$$

Wówczas w analogii do wzoru (2.52) i korzystając ze wzoru (2.54) wartość niezależną od jądra definiuje się jako:

$$\mathcal{F}t_0 \equiv \mathcal{F}t^{\text{mirror}} \left(1 + \frac{f_A}{f_V} \varrho^2 \right) = 2\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+} \quad (2.56)$$

Przy użyciu lewej strony powyższej równości, znając współczynnik mieszania ϱ dla danego przejścia, można wyznaczyć element macierzowy V_{ud} . Naturalnie im więcej przypadków jąder, dla których są dostępne dane doświadczalne dotyczące czasu życia t , współczynnika rozgałęzienia oraz współczynnika mieszania ϱ , tym bardziej dokładne oszacowanie elementu V_{ud} . Wobec tego w analogii do wzoru (2.53):

$$V_{ud}^2 = \frac{\kappa}{\mathcal{F}t_0(1 + \Delta_R^V)} \quad (2.57)$$

Przy użyciu prawej strony równości (2.56) i na podstawie znajomości $\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+}$ można wyznaczyć teoretyczne przewidywanie współczynnika mieszania ϱ a w konsekwencji parametr renormalizacji q stałej sprzężenia prądów osiowowektorowych, jak również, co szerzej opisuje następny paragraf, parametry korelacji w rozpadzie beta.

§6. Parametry korelacji w rozpadzie beta

Współczynnik mieszania ϱ nie jest bezpośrednio obserwowany w doświadczeniu. Jego wyznaczenie wymaga zmierzenia współczynników korelacji, z których najczęściej mierzonymi są parametr korelacji kątowej między elektronem i neutrinem $a_{\beta\nu}$, parametr asymetrii elektronu A_β oraz parametr asymetrii neutrina B_ν . Rozkład (2.7) w kierunku pędu elektronu i neutrina oraz w energii elektronu od spolaryzowanego jądra przyjmuje postać [57]:

$$\begin{aligned} \omega(\langle \mathbf{J} \rangle | E_e d\Omega_e d\Omega_\nu) &= \frac{F(\pm Z_f, E_e)}{(2\pi)^5} p_e E_e (E_0 - E_e)^2 dE_e d\Omega_e d\Omega_\nu \\ &\times \frac{1}{2} \xi \left\{ 1 + a_{\beta\nu} \frac{\mathbf{p}_e \mathbf{p}_\nu}{E_e E_\nu} + b \frac{m_e}{E_e} + \frac{\langle \mathbf{J} \rangle}{J} \left[A_\beta \frac{\mathbf{p}_e}{E_e} + B_\nu \frac{\mathbf{p}_\nu}{E_\nu} + D \frac{\mathbf{p}_e \times \mathbf{p}_\nu}{E_e E_\nu} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

gdzie

$$\xi = 2(g_V^2 |M_F|^2 + g_A^2 |M_{GT}|^2), \quad (2.59)$$

natomiast b jest współczynnikiem Fierza, $\langle J \rangle$ opisuje polaryzację jądra w stanie podstawowym o momencie pędu J , a D jest współczynnikiem korelacji czułym ze względu na fazę pomiędzy prądami wektorowymi i osiowo-wektorowymi. Współczynnik D opisuje łamanie symetrii CP .

W Modelu Standardowym, w którym teoria elektroslaba sformułowana jest w języku prądów $V - A$ wyrażenia obserwabli tj. współczynników $a_{\beta\nu}$, A_β oraz B_ν przyjmują postać [78]:

$$a_{\beta\nu} = \frac{1 - \frac{1}{3}\varrho^2}{1 + \varrho^2} \quad (2.60)$$

$$A_\beta = \frac{\mp\lambda_{J'J}\varrho^2 - 2\delta_{JJ'}\sqrt{\frac{J}{J+1}}\varrho}{1 + \varrho^2} \quad (2.61)$$

$$B_\nu = \frac{\pm\lambda_{J'J}\varrho^2 - 2\delta_{JJ'}\sqrt{\frac{J}{J+1}}\varrho}{1 + \varrho^2} \quad (2.62)$$

Powyższe wzory są słuszne w przybliżeniu zanedbującym efekty związane z odrzutem dające wkład około 1% [78]. Analiza porównawcza powyższych parametrów obliczonych metodami teoretycznymi z danymi eksperymentalnymi wykorzystywana jest do poszukiwań fizyki poza Modelem Standardowym. W szczególności brak zgodności obliczeń teoretycznych z doświadczeniem mógłby wskazywać na niewielką domieszkę prądów skalarnych i tensorowych oddziaływań słabych [57].

Rozdział 3

Metoda jądrowego funkcjonału gęstości z przywróconymi symetriami

§1. Model pola średniego w ujęciu Hartree’ego—Focka

Teoretyczny opis kwantowego układu wielociałowego, tj. obliczenie mierzalnych w eksperymencie obserwacji oraz wyznaczenie funkcji falowej wymaga rozwiązywania równania Schrödingera. Jest to fundamentalne równanie mechaniki kwantowej opisujące stan kwantowy cząstek nierelatywistycznych. Złożoność obliczeniowa problemu wielociałowego nie pozwala jednak na dokładne rozwiązywanie tego równania w przypadku układów o większej liczbie cząstek. Jedną z najbardziej powszechnych przybliżonych metod opisu takiego układu kwantowego jest jego redukcja do problemu jednociłowego, w którym cząstki są niezależne i poruszają się w polu wygenerowanym w sposób samouzgodniony przez pozostałe cząstki układu. Takie jednociłowe przybliżenie zarówno w fizyce elektronowej jak i w fizyce jądrowej nazywane jest modelem pola średniego.

Sukces metody pola średniego wynika nie tylko ze zgodności jej przewidywań z danymi doświadczalnymi, ale również, a może przede wszystkim stąd, że dostarcza ona bardzo intuicyjnych pojęć – orbitali (stanów) jednocząstkowych, które ułatwiają zrozumienie fizyki. W szczególności, koncepcja orbitali jednocząstkowych stanowi fundament przełomowego dla rozwoju fizyki jądrowej modelu powłokowego [79]. Przy jego pomocy wyjaśniono bowiem liczby magiczne - energetyczne szczeliny pomiędzy orbitalami stabilizujące energetycznie pewne jądra zwane właśnie jądrami magicznymi. To odkrycie rozpoczęło szerokie teoretyczne badania nad strukturą jąder atomowych.

Hamiltonian wielociałowego układu kwantowego możemy rozłożyć na części jedno- i dwuciałową ¹:

$$H = \left[T + \sum_{i=1}^A v(\mathbf{r}_i) \right] + \left[V - \sum_{i=1}^A v(\mathbf{r}_i) \right] \equiv H_{\text{MF}} + V_{\text{RES}}, \quad (3.1)$$

gdzie H_{MF} jest hamiltonianem pola średniego, a V_{RES} tzw. *oddziaływaniem resztkowym*. Taki rozkład okazuje się być niesłychanie pomocnym w zrozumieniu zjawisk fizyki wielu ciał. Ograniczenie hamiltonianu jedynie do jego części jednociłowej (średniopolowej)

¹W niniejszej rozprawie ograniczymy się do hamiltonianów dwuciałowych.

sprowadza równanie Schrödingera do równań pola średniego:

$$h_i \varphi_i = e_i \varphi_i. \quad (3.2)$$

Ich rozwiązania $\{e_i, \varphi_i\}_{i=1}^A$ stanowią fundament w zrozumieniu wielociałowego stanu kwantowego. Fizyczna interpretacja odnosi się wówczas do struktury obsadzonych orbitali jednociiałowych wyznaczonych w pewnej zadanej bazie. W programie numerycznym HFODD [5, 80] tą bazą jest baza oscylatora harmonicznego. Hamiltonian pola średniego nie jest pełnym hamiltonianem. Wobec czego wyznaczenie średniopolowych obserwabli odbywa się przy użyciu zasady wariacyjnej bądź wielociałowego rachunku zaburzeń. Użycie tego ostatniego wymaga dobrego punktu startowego w postaci układu niezaburzonego oraz wystarczająco szybkiej zbieżności szeregu perturbacyjnego. W przypadku oddziaływania jądrowego spełnienie tego założenia nie jest trywialne. Metoda wariacyjna zaś wymaga ustalenia klasy funkcji próbnych, w obrębie której dokonuje się minimalizacji energii. Przybliżenie pola średniego stanowiłoby dokładny opis wielociałowego zagadnienia jedynie w przypadku, gdy jego rozwiązania jednocześnie minimalizowałyby elementy macierzowe oddziaływania resztkowego do zera. W przeciwnym przypadku udoskonalenie rozwiązania wymaga skorelowania układu kwantowego poza przybliżeniem pola średniego.

W przypadku liniowego równania Schrödingera znajomość hamiltonianu układu jednoznacznie i precyzyjnie definiuje funkcję falową stanu kwantowego. Natomiast cena, którą należy zapłacić za dokonanie jednociiałowego przybliżenia w obrębie metody wariacyjnej to nieliniowość otrzymanych równań (3.2). Jednociiałowy potencjał pochodzi bowiem od uśrednienia oddziaływania dwuciałowego:

$$v(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \sum_{j \neq i}^A v_{ij}(\mathbf{r}_i(\mathbf{t}'), \mathbf{r}_j(\mathbf{t}')) dt', \quad (3.3)$$

wobec czego zależy od funkcji falowej układu kwantowego.² Zatem, aby zacząć rozwiązywać równania pola średniego należy znać *a priori* jego rozwiązanie. Należy zatem odpowiednio skonstruować funkcję falową, narzucając pewne fundamentalne warunki. I tak: (1) zgodnie z zasadą Pauliego funkcja falowa opisująca stan kwantowy układu fermionów musi być antysymetryczna, ponadto (2) przybliżenie pola średniego nakłada warunek niezależności cząstek, a zatem funkcja falowa powinna być skonstruowana jako iloczyn funkcji jednocząstkowych, a dodatkowo (3) w niniejszej pracy wykorzystuje się model teoretyczny, w którym średniopolowy stan kwantowy zachowuje liczbę cząstek. Niemniej ostatni warunek nie jest konieczny do podjęcia próby rozwiązania równań pola średniego.

Najbardziej ogólną reprezentacją funkcji falowych opisujących wielofermionowy stan kwantowy w modelu pola średniego okazują się być stany iloczynowe [16]. Stanem iloczynowym nazywamy taki wielociałowy stan kwantowy, dla którego zwężenia operatorów kreacji i anihilacji są liczbami. Zgodnie z twierdzeniem Thoulessa [81] takie nieunormowane stany zachowujące liczbę cząstek można zapisać w postaci uogólnionego stanu koherentnego:

$$|\Phi\rangle = \exp\left(\sum_{ph} Z_{ph}^* a_p^\dagger a_h\right) \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle. \quad (3.4)$$

²Uśrednienie po czasie, przy założeniu bardzo krótkiego interwału Δt stanowi jedynie pewną intuicję. Nie jest natomiast używane w praktycznych zastosowaniach.

Indeksy p i h opisują stany cząstkowe i dziurowe względem próżni $\prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle$ zbudowanej przez obsadzenie A orbitali jednocząstkowych. Stanowią one układ zupełny (bazę) w jednocząstkowej przestrzeni Hilberta³. Wspomnianą próżnię natomiast nazywamy wyznacznikiem Slatera. Parametry Z_{ph}^* są zespolonymi elementami macierzowymi pewnej antysymetrycznej macierzy o wymiarach $p \in \{A+1, \dots, M\}$ na $h \in \{1, \dots, A\}$ minimalizującej energię w procedurze wariacyjnej.

Przybliżenie Hartree’ego-Focka jest przybliżeniem pola średniego, dla którego rozwiązanie układu równań (3.2) wyznacza się przy użyciu metody wariacyjnej w obrębie klasy stanów iloczynowych o zachowanej liczbie cząstek (3.4).

W praktyce należy zapewnić jeszcze możliwość wyznaczania wartości średnich operatorów dla danej klasy funkcji próbnych. Dla stanów iloczynowych zachodzi jednak twierdzenie Wicka [82]: wartość średnia iloczynu operatorów kreacji i anihilacji $a_\nu, a_\nu^\dagger$ jest liniową kombinacją wszystkich możliwych zwiężeń tych operatorów. A zatem przy użyciu tego twierdzenia można wyznaczyć wartości średnie wszystkich operatorów w przestrzeni Focka, w szczególności hamiltonianu.

Ogólny hamiltonian jądrowy, zawierający jednociąłową energię kinetyczną oraz oddziaływanie dwuciałowe, można wyrazić jako:

$$\hat{H} = \sum_{\mu\nu} T_{\mu\nu} a_\mu^\dagger a_\nu + \frac{1}{4} \sum_{\mu\lambda\nu\pi} \bar{V}_{\mu\lambda\nu\pi} a_\mu^\dagger a_\lambda^\dagger a_\pi a_\nu. \quad (3.5)$$

Korzystając z twierdzenia Wicka oraz faktu, że kontrakcja operatora kreacji i anihilacji w stanie iloczynowym $|\Phi\rangle$ jest gęstością cząstek w tym stanie:

$$\rho_{\mu\nu} = \overline{a_\nu^\dagger a_\mu} = \langle \Phi | a_\nu^\dagger a_\mu | \Phi \rangle, \quad (3.6)$$

wartość oczekiwaną hamiltonianu możemy wyrazić jako funkcjonal gęstości:

$$E_{HF}[\rho] = \sum_{\mu\nu} T_{\mu\nu} \rho_{\nu\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\lambda\nu\pi} \bar{V}_{\mu\lambda\nu\pi} \rho_{\nu\mu} \rho_{\pi\lambda}. \quad (3.7)$$

Mając na uwadze (3.1), hamiltonian pola średniego możemy wyrazić jako sumę macierzy energii kinetycznej oraz macierzy potencjału jednocząstkowego:

$$h_{\mu\nu} = T_{\mu\nu} + \Gamma_{\mu\nu}, \quad (3.8)$$

gdzie $\Gamma_{\mu\nu}$ zgodnie z (3.3) pochodzi z uśrednienia oddziaływania dwuciałowego:

$$\Gamma_{\mu\nu} = \sum_{\lambda\pi} V_{\mu\lambda\nu\pi} \rho_{\pi\lambda}. \quad (3.9)$$

Wówczas energię hamiltonianu pola średniego w przybliżeniu Hartree’ego-Focka zapisujemy w postaci:

$$\begin{aligned} E_{\text{HF}} &= \text{Tr}(T\rho) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\Gamma\rho) \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}(T\rho) + \frac{1}{2} \text{Tr}(h\rho) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A (T_{ii} + e_i). \end{aligned} \quad (3.10)$$

³Przyjmujemy dla uproszczenia, że baza jednocząstkowa jest skończona, M -wymiarowa.

Ostatnia równość ma miejsce w przypadku opisu gęstości w bazie kanonicznej.

Wariacja wartości oczekiwanej hamiltonianu pola średniego w stanie iloczynowym (3.4) względem elementów macierzowych antysymetrycznej macierzy Z_{ph}^* lub równoznacznie funkcjonału gęstości (3.7) względem gęstości stanu iloczynowego $|\Phi\rangle$ prowadzi do równań Hartree’ego–Focka:

$$[h_0, \rho_0] = 0, \quad (3.11)$$

gdzie gęstość ρ_0 nazywamy samozgodną macierzą gęstości, a indukowaną przez nią macierz h_0 samozgodnym hamiltonianem jednocząstkowym (polem średnim).

Równania Hartree’ego–Focka zaliczają się obecnie do kanonu metod teoretycznych chemii kwantowej, fizyki elektronowej, czy fizyki jądrowej. Pojęcie samozgodności wywodzi się z metody rozwiązywania tych równań. Polega ona w pierwszym kroku na skonstruowaniu średniopolowego hamiltonianu z potencjałem przypominającym potencjał rozwiązywanego zagadnienia fizycznego. Następnie z takim hamiltonianem rozwiązuje się zagadnienie własne. Z otrzymanych A wektorów własnych o najmniejszych wartościach własnych buduje się macierz gęstości, a z niej (3.9) indukowany hamiltonian ⁴. Procedurę powtarza się aż do momentu uzyskania żądanej zgodności macierzy gęstości indukującej hamiltonian w danej iteracji z gęstością powstałą po diagonalizacji tegoż hamiltonianu.

Funkcja falowa opisująca układ wielu nukleonów musi być antysymetryczna. Stany iloczynowe zachowujące liczbę cząstek należą do zbioru tych funkcji. Jednak stanowią jej istotnie ograniczony podzbiór. Rozwiązanie problemu wielociałowego w ogólności nie musi przyjmować formy wyznacznika Slatera. Okazuje się, że jednociałowy hamiltonian można wzbogacić o dodatkowe korelacje nieuwzględniane w formalizmie Hartree’ego–Focka. Mianowicie, idąc za przykładem fizyki elektronowej, modelowany układ kwantowy rozszerza się przez uwzględnienie korelacji par. Wówczas rozszerzamy również klasę funkcji próbnych do stanów iloczynowych łamiących symetrię liczby cząstek. Zatem w procedurze wariacyjnej należałoby wówczas zadbać o to, aby wartość średnia operatora liczby cząstek była odpowiednio zadana liczbą neutronów i protonów. Oddziaływanie odpowiedzialne za energetycznie korzystny proces parowania się nukleonów jest oddziaływaniem dwuciałowym w bazie operatorów kreacji i anihilacji cząstek. Natomiast istnieje unitarna transformacja – zwana transformacją Bogoliubova, teje bazy, która diagonalizując hamiltonian sprowadza wielociałowy problem do zagadnienia pola średniego generowanego przez kwazicząstki – liniową kombinację operatorów kreacji i anihilacji. Formalizmem uwzględniającym łączenie się cząstek w pary Coopera w przybliżeniu pola średniego nazywamy teorię Hartree’ego–Focka–Bogoliubova, dla której klasą funkcji próbnych są najogólniejsze stany iloczynowe.

Wybór klasy funkcji próbnych w postaci stanów iloczynowych może w ogólności prowadzić do łamania przezeń symetrii oddziaływania. Przykładem jest między innymi wspomniane już niezachowanie liczby cząstek w przypadku teorii Hartree’ego-Focka-Bogoliubova niezależnie od faktu, iż całkowity hamiltonian teje symetrii nie łamie. W teoriach średniopolowych spotykamy się jednak z samozgodnymi symetriami, których procedura wariacyjna nie zaburza. Jeżeli całkowity hamiltonian jest niezmienniczy ze względu na działanie

⁴Przepis dotyczy konstrukcji stanu podstawowego.

pewnego operatora symetrii $\hat{S}$, tj. operatory ze sobą komutują, to wówczas na podstawie definicji indukowanego potencjału (3.9):

$$Sh[\rho]S^\dagger = h[S\rho S^\dagger]. \quad (3.12)$$

Powyższe oznacza, że pod warunkiem zachowania pewnej symetrii zarówno przez całkowity hamiltonian, jak i przez gęstość układu tj. $S\rho S^\dagger = \rho$, nieliniowość równań Hartree’ego –Focka nie zaburzy tej symetrii. Ten wniosek znacznie upraszcza rozwiązywanie zagadnienia pola średniego. Naturalnie, jeżeli spodziewamy się, że stan kwantowy może zawierać korelacje związane z łamaniem symetrii np. symetrii parzystości, to wówczas funkcja falowa zachowująca parzystość w procedurze wariacyjnej nigdy nie odtworzy łamiącej parzystości struktury jądrowej.

W używanym do obliczeń programie HFODD przyjmujemy zachowanie symetrii parzystości, sympleksu oraz sygnatury. Procedura wariacyjna jest przyjmowana za zbieżną, jeżeli energia wyznaczona przez odcałkowanie funkcjonału gęstości energii jest równa, co do zadanej wartości (ϵ), sumie (3.10). W przypadku uwzględniania oddziaływania zależnego od gęstości do sumy (3.10) należy doliczyć tzw. człon przeszerogowania (*rearrangement term*).

§2. Oddziaływanie nukleon–nukleon w jądrze atomowym

W przypadku jądra atomowego problem rozwiązania nawet przybliżonego założeniem pola średniego równania Schrödingera jest dalece nietrywialny. W przeciwieństwie do oddziaływania elektromagnetycznego, oddziaływanie silne nie zostało dotychczas przedstawione w jawnej postaci. Próbę opisu oddziaływania pomiędzy nukleonami w latach 30 ubiegłego stulecia podjął Yukawa [83]. Rozwiązując równanie Kleina-Gordona dla masowej cząstki oraz zakładając jej wirtualny charakter, zapostulował istnienie pośredniczącej w oddziaływaniu dwóch nukleonów cząstki. Teoria, przypadkiem, została potwierdzona przez istnienie pionu o spinie 0 i masie 140 MeV [84]. Wówczas jednak zgodnie ze stanem wiedzy nukleony były postrzegane jako cząstki elementarne bez wewnętrznej struktury. Odkrycie związanych kwarków i pośredniczących między nimi gluonów zmieniło postrzeganie oddziaływania silnego. Za fundamentalny opis oddziaływań silnych obecnie odpowiada teoria chromodynamiki kwantowej zbudowana na grupie SU(3). Natomiast teoria Yukawy dotycząca oddziaływania nukleonów przez wymianę pionu (mezonu) stanowi już efektywny opis siły jądrowej. Obliczenia w ramach chromodynamiki kwantowej (tzw. rachunki na sieci) są bardzo skomplikowane nawet dla najlżejszych jąder. Już dla układów zbudowanych z 3 nukleonów redukcja szumu staje się niesłychanie problematyczna [85]. Brak możliwości podjęcia bardziej skomplikowanych rachunków na sieci narzuca konieczność podjęcia prób stworzenia efektywnego oddziaływania w przybliżeniu punktowych nukleonów i mezonów. Przykładem mogą być teorie bazujące czy to na efektywnym lagranżjanie [86] dla oddziałujących nukleonów i mezonów, czy też na efektywnym hamiltonianie oddziałujących nukleonów przez wymianę mezonów $\rho, \omega, \sigma, \pi$ [87](QMC).

W teoretycznym opisie jądrowego oddziaływania efektywnego jego długi zasięgowa część działająca na odległościach większych niż 0.8 fm jest wolna od parametrów bowiem

pochodzi od oddziaływania Coulomba oraz od wymiany nukleonu z pionem ze stałą sprzężenia pion-nukleon $f_{\pi N}$. Zaś część krótkozasięgową opisuje oddziaływanie efektywne. Badania nad rozpraszaniem nukleonów ujawniły, że te na odległościach mniejszych niż 0.4 fm silnie się odpychają. Takie odpychanie nazywamy twardym rdzeniem. Średnia energia potencjalna obliczona w stanie, w którym funkcje falowe dwóch nukleonów przekrywają się w obszarze *twardego rdzenia*, jest bardzo duża lub wręcz nieskończona. Wówczas dokonanie przybliżenia pola średniego całkowicie traci sens, a próby rozwiązania wielociałowego rachunku zaburzeń są niebywale trudne ze względu na bardzo wolną zbieżność szeregu.

Konstrukcję oddziaływania nukleon-nukleon zawęża się przez nałożenie nań warunków symetrii względem przesunięć, parzystości, odwrócenia w czasie, obrotów w przestrzeni i izoprzestrzeni. Ponadto w teorii nierelatywistycznej oddziaływanie musi być niezmiennicze ze względu na transformację Galileusza. Niezmienniczość oddziaływania względem transformacji Lorentza należy narzucić w przypadku rozwiązywania relatywistycznych równań Diraca. Wszystkie te symetrie zostały pokrótce opisane w rozdziale pierwszym. I tak, aby oddziaływanie nukleon-nukleon spełniało zasady zachowania, może składać się jedynie z pewnych określonych skalarów w przestrzeni kartezjańskiej: $\mathbf{r}^2, \mathbf{p}^2, (\mathbf{r}\mathbf{p} + \mathbf{p}\mathbf{r})^2$, spinowej $\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2$, przestrzenno-spinowej: $(\mathbf{r}\boldsymbol{\sigma}_1)(\mathbf{r}\boldsymbol{\sigma}_2)$, $(\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}_1)(\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}_2)$ oraz $(\mathbf{L}\boldsymbol{\sigma}_1)(\mathbf{L}\boldsymbol{\sigma}_2) + (\mathbf{L}\boldsymbol{\sigma}_2)(\mathbf{L}\boldsymbol{\sigma}_1)$.

Lokalne oddziaływanie nukleon-nukleon w próżni tj. uwzględniające istnienie *twardego rdzenia* można zapisać w postaci Landaua tj. w rozwinięciu części spinowo-izospinowej. Dowolny operator w przestrzeni (izo)spinowej będący symetrycznym względem przesunięć można rozłożyć w bazie macierzy Pauliego $\{\sigma_0, \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)\}$ [88]:

$$V_{(12)} = V_0(r) + V_\sigma(r)\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2 + V_\tau(r)\boldsymbol{\tau}_1\boldsymbol{\tau}_2 + V_{\sigma\tau}(r)\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\tau}_1\boldsymbol{\tau}_2 \quad (3.13)$$

Do oddziaływań lokalnych¹ tj. niezależnych od prędkości należy dopisać jeszcze oddziaływanie tensorowe:

$$V_{(12)}^T = \left(V_{T_0}(r) + V_{T_\tau}(r)\boldsymbol{\tau}_1\boldsymbol{\tau}_2 \right) \left(\frac{3}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{r}) - \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2 \right) \quad (3.14)$$

Opis jąder atomowych, szczególnie zjawiska występowania szczelin energetycznych w tzw. jądrach magicznych wymaga wprowadzenia nielokalnego oddziaływania niezmienniczego względem symetrii obrotów i jednocześnie zachowującego parzystość. W najniższym rzędzie jedynym takim skalarom jest dwuciałowe oddziaływanie spin-orbita:

$$V_{(12)}^{LS} = V_{LS}(r)\mathbf{L}\mathbf{S}. \quad (3.15)$$

Wewnętrzna struktura nukleonu doprowadza do komplikacji w sformułowaniu oddziaływania między dwoma nukleonami w szczególności w sytuacji, kiedy obiekt kwantowy składa się z większej liczby cząstek. Wówczas krótkozasięgowe oddziaływanie nukleon-nukleon możemy zasymulować przy użyciu dopasowywanych do danych doświadczalnych parametrów zapostulowanego oddziaływania efektywnego. Okazuje się, że efektywny opis oddziaływania nukleon-nukleon przyniósł ogromny sukces w odtwarzaniu energii wiązania, promieni, energii wzbudzeń, czy w rozpadach jąder [89, 90]. Efektywny potencjał wolny jest od problemu twardego rdzenia, wobec czego może być wykorzystywany w średniopoloowych rachunkach Hartree’ego–Focka. Wówczas o zachowanie zasady Pauliego dba

¹Lokalny charakter oddziaływania tensorowego wprowadza się przez dodanie iloczynu $\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2$.

wyznacznik Slatera.

Idea zastąpienia realistycznego oddziaływania nukleon-nukleon przez jądrowy potencjał fenomenologiczny przysłużyła się do rozwoju dwu wiodących teorii jądra atomowego: modelu powłokowego oraz jądrowego funkcjonału gęstości. W obu przypadkach parametry oddziaływania dopasowywane do doświadczenia są silnie zależne od modelu. W przypadku modelu powłokowego rachunki wykonywane są przy użyciu oddziaływania resztkowego, które działa między nukleonami walencyjnymi. Efektywne parametry otrzymywane są z dopasowywania elementów macierzowych w obrębie jednej powłoki o określonej parzystości. Oznacza, to że efektywne oddziaływanie nukleon-nukleon nie jest uniwersalne i silnie zależy od obszaru w tablicy nuklidów. Zaletą takiego oddziaływania niewątpliwie jest precyzja teoretycznych przewidywań [91]. W przypadku modeli pola średniego, w tym jądrowego funkcjonału gęstości efektywne parametry dopasowywane są standardowo do jąder podwójnie magicznych lub w najnowszych parametryzacjach do jąder magicznych z otwartymi powłokami neutronowymi lub protonowymi [92]. Tak dopasowane oddziaływanie będzie z pewnością uniwersalne jednak obliczenia prowadzone w różnych obszarach tablicy nuklidów mniej precyzyjne. Ponadto ze względu na wybór przestrzeni modelowej oraz stosowności oddziaływania efektywnego zastosowania obu modeli różnią się znacząco. W modelu powłokowym konstruuje się konfiguracje, nakładając nań warunek spełnienia symetrii obrotowej. Taki opis pozwala na teoretyczne przewidywania stanów wzbudzonych oraz na obliczenia elementów macierzowych rozpadów jąder. Model nie jest jednak najefektywniejszym w opisie własności stanów podstawowych. Model funkcjonału gęstości ma niejako odwrotne zastosowania. Świetnie radzi sobie z opisem własności stanów podstawowych, niemniej rachunki związane ze stanami wzbudzonymi, ze względu na naruszone symetrie są znacznie bardziej skomplikowane. W niniejszej pracy przedstawiamy model, który w założeniu stara się łączyć oba podejścia.

W 1958 r. Tony Skyrme [93] zaproponował efektywne oddziaływanie nukleon-nukleon po raz pierwszy bazujące na części radialnej typu zerowego zasięgu. Otóż o oddziaływaniu dwuciałowym można myśleć jako o oddziaływaniu kontaktowym a wówczas funkcja δ -Diraca nie tylko spełnia to założenie, ale przy okazji jest niezwykle użyteczna w zaawansowanych rachunkach teoretycznych. Fundamentalnym założeniem Skyrme'a w rozważaniach o potencjale efektywnym było przyjęcie przybliżenia Borna, dla którego wkłady do funkcji falowej od dużego przekazu pędu są pomijalne. Ponadto przyjął on założenie, że dla zamkniętych powłok nukleony zachowują się jak w modelu gazu Fermiego. I tak oddziaływanie NN otrzymuje człon centralny zwany *objętościowym* reprezentujący rozproszenie jedynie do stanów kwantowych w stanie s - tzw. *fala S*. Jednak aby podjąć próbę właściwego opisu skończonej materii jądrowej oddziaływanie jądrowe potrzebuje członów skończonego zasięgu tzw. członów *powierzchniowych*. Skończony zasięg oddziaływania nukleon-nukleon można zasymulować przez zależność od przekazu pędu. I tak, mając na uwadze przybliżenie Borna, pierwszy rząd rozwinięcia będzie zawierał człon związany z przekazem energii oraz człon dający wkład od kąta rozproszenia. Człon skończonego zasięgu wzbogacają funkcję falową o możliwość rozproszenia do stanów kwantowych w stanie p - tzw. *fala P*. Na podstawie danych z rozpraszania NN Skyrme uznał również, że warto uwzględnić w oddziaływaniu rozpraszanie do fali *D* - tj. kolejnego rzędu rozwinięcia w przestrzeni pędów. Dane rozproszeniowe wykazały również istnienie silnego nielokalnego oddziaływania - oddziaływania spin-orbita oraz konieczności uzupełnienia części centralnej o oddziaływanie tensorowe. W ten sposób powstaje efektywne oddziaływanie dwuciałowe.

Początkowo oddziaływanie Skyrme’a miało służyć do obliczeń w modelu powłokowym. Okazało się jednak, że jest ono bardziej użyteczne w modelu pola średniego. Pokazali to w 1972 r. Vautherin i Brink publikując obszerny artykuł dotyczący zastosowania oddziaływania Skyrme’a uzupełnionego o potrzebny do saturacji siły jądrowej człon zależny od gęstości [94] w metodzie Hartree’ego-Focka. Początek lat 70 zaowocował w istocie w trzy modele efektywnej siły jądrowej do dzisiaj powszechnie używane w obliczeniach pola średniego. Rok po wspomnianej wyżej pracy Vautherina i Brinka powstała siła skończonego zasięgu, której część radialna opisywana jest funkcjami Gaussa z wyjątkiem części oddziaływania zależnej od gęstości, który to człon ma charakter kontaktowy analogicznie do siły Skyrme’a. Siłę tą, od nazwiska jej autora, nazywa się siłą Gogny’ego [95]. W 1974 r. natomiast powstał relatywistyczny odpowiednik siły Skyrme’a zaproponowany przez Walecką *et al.* [96].

Wymienione wyżej efektywne oddziaływania jądrowe są emanacją zasady leżącej u podstaw teorii efektywnych mówiącej, że niskoenergetyczna fizyka nie zależy od wysokoenergetycznej dynamiki, inaczej mówiąc nie zależy od procesów z dużym przekazem pędu q . Pozwala to rozwinąć oddziaływanie jądrowe w przestrzeni pędów w przekazy pędu:

$$v(\mathbf{q}) = v(q) = v_0 + v_2 q^2 + v_4 q^4 \dots \quad (3.16)$$

Takie rozwinięcie ucina się przy dostatecznie dużej potędze transferu pędu, a efektywne współczynniki v_i dopasowuje się do niskoenergetycznych danych doświadczalnych. Warto podkreślić, że rozwinięcie (3.16) nie jest rozwinięciem taylorowskim. Każdorazowa zmiana rzędu teorii (rzędu obcięcia) wymaga bowiem nowego dopasowania wszystkich współczynników rozwinięcia zwanych niskoenergetycznymi stałymi sprzężenia (*low-energy coupling constants* – *LECs*). Model kontaktowego oddziaływania typu Skyrme’a otrzymuje się przez transformatę Fouriera rozwinięcia typu (3.16) do przestrzeni położeniowej. Za Vautherinem i Brinkiem [94, 97] zapisujemy je w postaci:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{12}^{Sk}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = & t_0(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 \hat{P}_\sigma) \left[\vec{k}^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 \right] \\ & + t_2(1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \vec{k} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ & + i W_0(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) (\vec{k} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}). \end{aligned} \quad (3.17)$$

gdzie w celu zapobieżenia bezpośredniemu działaniu gradientu na deltę Diraca wprowadza się operatory nabła działające na prawo i na lewo w postaci:

$$\vec{\nabla} = \frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2) \quad \vec{\nabla} = -\frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2). \quad (3.18)$$

Pierwsze trzy człony odpowiadają rozwinięciu (3.16), a część wielociałową modeluje się przez oddziaływanie zależne od gęstości w potęgce α . Potęga α ma charakter czysto fenomenologiczny i służy jedynie do zapewnienia odpowiedniej nieściśliwości materii jądrowej. Dopasowania parametrów do najnowszych funkcjonałów energii [92, 98, 99] wskazują wartość tego parametru $\alpha \in (0.15; 0.3)$. Ostatni człon w oddziaływaniu Skyrme’a (3.17)

opisuje dwuciałowe oddziaływanie typu spin-orbita (3.15), patrz [100]. Natomiast w standardowym sformułowaniu pomija się zwykle człon związany z tzw. *falą D* oraz człon tensorowy zerowego zasięgu.

Oddziaływanie Skyrme’a zawiera kanał wymiany spinu opisany przy użyciu operatora Bartletta:

$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2), \quad (3.19)$$

który działa następująco:

$$\hat{P}_\sigma \Phi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2, \tau_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \sigma_2, \tau_1; \mathbf{r}_2, \sigma_1, \tau_2). \quad (3.20)$$

Ze względu na antysymetryczny charakter funkcji falowej pełni on również rolę operatora wymiany izospinu:

$$\hat{P}_\tau = -\hat{P}_r \hat{P}_\sigma. \quad (3.21)$$

Model pola średniego Hartree’ego-Focka z oddziaływaniem Skyrme’a zaproponowany przez Vautherina i Bricka nosi nazwę modelu Skyrme’a–Hartree’ego–Focka (SHF).

§3. Teoria jądrowego funkcjonału gęstości

Wraz z eksplorowaniem tablicy nuklidów w kierunku cięższych pierwiastków układ kwantowy wzbogaca się o kolejne cząstki. Stawia to ogromne wyzwania przed modelami jądrowymi. Modele diagonalizujące hamiltonian, jak model powłokowy, czy obecnie intensywnie rozwijane podejścia modeli *ab initio* napotykają na gigantyczną barierę związaną z ilością wzbudzeń jednocząstkowych rozpinających przestrzeń walencyjną. Ogromnym powodzeniem cieszy się obecnie metoda SRG [101] lub IM SRG (In-Medium Similarity Renormalization Group) [102] modeli *ab initio* znacznie upraszczająca diagonalizację olbrzymich macierzy. Koszt tej procedury jest jednak wysoki. Zastosowanie techniki SRG prowadzi do pojawienia się wielociałowych rozwinięć hamiltonianu, przez co natychmiast sprowadza modele *ab initio* do teorii efektywnych zależnych od pewnego parametru obcięcia.⁵ Niezależnie od tego, czy możliwości obliczeniowe pozwalają lub w przyszłości pozwolą na diagonalizację gigantycznych macierzy, czy nie, to zrozumienie zjawisk fizycznych zachodzących w cięższych pierwiastkach może i tak okazać się niezwykle trudne lub wręcz niemożliwe przy zastosowaniu metod typu mieszania konfiguracji (*configuration-integration* – *CI*) operujących w ogromnych przestrzeniach konfiguracyjnych ze względu na skomplikowaną postać funkcji falowej.

Alternatywnym podejściem jest metoda Hartree’ego-Focka. Jak się okazuje jednak i ona napotyka na poważne problemy. Uwzględnianie coraz to liczniejszych korelacji jak choćby odejście od zagadnienia lokalnego (w członach wymiennych) np. w przypadku

⁵Naturalnie, pojęcie teorii *ab initio* jest względne. W chemii kwantowej teorią *ab initio* jest teoria funkcjonału gęstości. W fizyce jądrowej za metody *ab initio* uważa się podejścia wykorzystujące oddziaływania dopasowane bezpośrednio do danych rozproszeniowych. Z punktu widzenia chromodynamiki kwantowej takie podejście z pewnością nie uzyskałoby nazwy *ab initio*.

oddziaływania Coulomba, czy przy uwzględnieniu wymiany pionu rodzi problem numerycznego policzenia coraz to trudniejszych całek. W przypadku oddziaływania Coulomba:

$$V_C = \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r})\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho_p(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (3.22)$$

druga z całek ze względu na nielokalny charakter gęstości protonowej zwiększa czas obliczeń kilkadziesiąt razy [15]. Cały wysiłek, czy to metod CI, czy Hartree'ego-Focka prowadzi do znalezienia funkcji falowej najlepiej opisującej układ kwantowy. Całe zagadnienie można jednak odwrócić, omijając problem uwzględniania wielu konfiguracji, czy wyznaczania skomplikowanych całek, przechodząc do teorii funkcjonału gęstości. Trud wówczas skupia się nie na znalezieniu postaci funkcji falowej, lecz na konstrukcji funkcjonału energii lub generatora tegoż funkcjonału.

Podwalin teorii funkcjonału gęstości można doszukiwać się już w pracach Kelvina i Drude'a [103] postulujących model gazu elektronowego, mający tłumaczyć przewodnictwo elektryczne w metalach. Pracę tę rewelacyjnie wykorzystał Enrico Fermi, wiążąc gęstość energii kinetycznej z lokalną gęstością gazu elektronowego [104]. Milowym krokiem w kierunku powstania teorii funkcjonału gęstości okazała się być praca Johna Slatera [105], który wyznaczył przybliżenie lokalnej gęstości (*Local Density Approximation* – *LDA*) całki wymiennej oddziaływania coulombowskiego (3.22):

$$V_{C_{EXC}}^{LDA} = -\frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \int d\mathbf{r} \rho_p^{\frac{4}{3}}(\mathbf{r}). \quad (3.23)$$

stosowane do dziś zarówno w fizyce elektronowej jak i w fizyce jądrowej. Ułamkowa zależność od gęstości protonowej jest efektem poczynionego przybliżenia i wprowadza do obliczeń element fenomenologiczny, czyli taki, który ma za zadanie zamodelować oddziaływanie elektromagnetyczne między protonami, rezygnując z odtworzenia jego wiernej postaci. W rachunkach przeprowadzanych w tej pracy w zasadzie nie stosuje się przybliżenia Slatera, a całą energię Coulomba całkuje się dokładnie. Takie rachunki przeprowadzamy z dwu względów. W pierwszej kolejności, przy przywracaniu złamanych symetrii metodami rzutowymi stabilność numeryczna rachunków wymaga, aby używany funkcjonał był generowany hamiltonianem. Ponadto, wysoka precyzja rachunków potrzebna do analizy łamania symetrii izospinowej, wyklucza rachunki przybliżone wiodącego oddziaływania łamiącego tę symetrię.⁶

Przełomowe dla rozwoju metod funkcjonału gęstości okazują się być prace Pierre'a Hohenberga oraz Waltera Kohna z 1964 pt. *Inhomogeneous Electron Gas* [106] oraz Waltera Kohna i Lu Shama z 1965 roku pt. *Self-Consistent Equations including Exchange and Correlation Effects* [107] wieszczące rozwiązanie problemu obliczania skomplikowanych całek. Hohenberg i Kohn w pracy z 1964r. dowodzą istnienie pewnego uniwersalnego funkcjonału $E[\rho]$, dającego dokładną energię stanu podstawowego w punkcie gęstości idealnej. Twierdzenie to można udowodnić między innymi przy użyciu dwustopniowej wariacji zaproponowanej przez Levy'ego [108]. Polega ona na 1) minimalizacji funkcjonału energii E z więzem na wartość średnią operatora $\hat{Q}$, 2) minimalizacji funkcji $E(Q)$ względem Q . I tak, w przypadku, gdy $\hat{Q} = \hat{N}$, gdzie $\hat{N}$ to operator liczby cząstek, dwukrotna procedura

⁶Jednak w procedurze iteracyjnej, o której mowa w paragrafie 1, dostarczenie funkcji falowej skorelowanej członem wymiennym w przybliżeniu LDA znacznie przyspiesza późniejsze dokładne wyznaczenie członu Focka oddziaływania Coulomba.

wariacyjna prowadzi do otrzymania dokładnej wartości energii stanu podstawowego oraz dokładnej gęstości wyznaczającej ten stan podstawowy.

Chemia kwantowa i fizyka jądrowa borykają się jednak z zupełnie innymi problemami. W przypadku tej pierwszej zewnętrzny potencjał wiążący elektrony jest znany. Wydawałoby się zatem, że nie ma potrzeby fenomenologicznej konstrukcji nieznanego oddziaływania. Jednak komplikacja budowy molekuly, sieci krystalicznych itp. narzuca konieczność szeregu przybliżeń lub tworzenia tzw. funkcjonałów hybrydowych [17]. Wówczas metoda DFT okazuje się być jedyną możliwością podjęcia próby wyznaczenia podstawowych obserwabli takiego układu.

W fizyce jądrowej oprócz skomplikowanej struktury układu kwantowego pojawia się problem braku zewnętrznego potencjału wiążącego – jądro jest bowiem układem samowiązanym. Konstrukcja efektywnego oddziaływania nukleon-nukleon wprowadza często element fenomenologiczny. Analizując własności nieskończonej materii jądrowej dla oddziaływania w postaci Skyrme’a (3.17) możemy przedstawić fizyczną interpretację każdego z członów, poza jednym – tzw. członem zależnym jawnie od gęstości. Jak już wspomniano, zależność od gęstości w oddziaływaniu Skyrme’a wprowadzono w pracy [94], której autorzy zauważyli, że w jądrach parzysto-parzystych, na poziomie przybliżenia Hrtree’ego-Focka, zachodzi równoważność między trójciałowym członem zerowego zasięgu:

$$v_{123} = t_3 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \quad (3.24)$$

a dwuciałowym oddziaływaniem zależnym od gęstości:

$$v_{12} = \frac{1}{6} t_3 (1 + \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right). \quad (3.25)$$

Otrzymywane wyniki z takim oddziaływaniem - w szczególności parametryzacja SIII [109] były bardzo obiecujące – zgodność energii wiązania oraz promieni z danymi doświadczalnymi była nieporównywalna z wcześniejszymi modelami. Jednak problem stanowiła bardzo istotna własność nieściśliwości materii jądrowej. Dla parametryzacji SIII parametr nieściśliwości wynosi $K_\infty = 356 \text{ MeV}$, a na podstawie danych eksperymentalnych dotyczących energii gigantycznych rezonansów monopolowych (GMR) oszacowano go na $K_\infty = 230 \pm 30 \text{ MeV}$ [110]. Mimo prób uwzględnienia oddziaływań trójciałowych oraz czterociałowych zerowego zasięgu jak dotąd nie udało się odtworzyć tego parametru [111]. Dopiero czysto fenomenologiczne zastąpienie członu ρ we wzorze (3.25) na ρ^α spowodowało obniżenie wartości nieściśliwości materii, odtwarzając jednocześnie E_{GMR} [98, 112].

Unikalną cechą teorii funkcjonału gęstości jest możliwość przeprowadzenia wariacji po wielu obserwablach. I tak, w przypadku jądra atomowego funkcjonał energii możemy skonstruować na bazie dwu niezależnych lokalnych gęstości skalarnych, mianowicie: gęstości cząstkowej ρ oraz gęstości energii kinetycznej τ ⁷.

Lokalną gęstość cząstkową definiujemy następująco [113]:

⁷W przypadku sformułowania teorii w języku gęstości nielokalnych gęstość energii kinetycznej nie jest niezależna od gęstości cząstkowej.

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}, \sigma\tau, \sigma'\tau') &= \frac{1}{4}\rho(\mathbf{r})\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\tau\tau'} + \frac{1}{4}\mathbf{s}(\mathbf{r})\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\sigma\sigma'}\delta_{\tau\tau'} \\ &+ \frac{1}{4}\boldsymbol{\rho}(\mathbf{r})\delta_{\sigma\sigma'} \circ \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\tau\tau'} + \frac{1}{4}\mathbf{s}(\mathbf{r})\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\sigma\sigma'} \circ \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\tau\tau'},\end{aligned}\quad (3.26)$$

gdzie poszczególne człony odpowiadają odpowiednio gęstościom skalarno-izoskalarnym, wektorowo-izoskalarnym, skalarno-izowektorowym oraz wektorowo-izowektorowym. W uproszczeniu:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \stackrel{\text{KS}}{=} \sum_{k\sigma} |\phi_k(\mathbf{r}, \sigma)|^2 \quad (3.27)$$

Natomiast dla operatora energii kinetycznej:

$$\hat{\tau}(\mathbf{r}) \equiv - \sum_{i=1}^A \nabla_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \nabla_i \quad (3.28)$$

jego gęstość (wartość średnia na wyznaczniku Slatera) wynosi:

$$\tau(\mathbf{r}) = [(\nabla\nabla')\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]_{|\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \stackrel{\text{KS}}{=} \sum_{k\sigma} |\nabla\phi_k(\mathbf{r}, \sigma)|^2 \quad (3.29)$$

Przy opisie funkcjonalnym jądra wygodnie jest również wprowadzić wektorową gęstość spinową:

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \mathbf{s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_{|\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \stackrel{\text{KS}}{=} \sum_{k\sigma\sigma'} \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \phi_k(\mathbf{r}, \sigma') \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle \quad (3.30)$$

oraz tensorową gęstość prądu spinowego:

$$\begin{aligned}J_{\mu\nu}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2i} [(\vec{\nabla}_\mu - \vec{\nabla}'_\mu) \mathbf{s}_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]_{|\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\ &\stackrel{\text{KS}}{=} \frac{1}{2i} \sum_{k\sigma\sigma'} [\vec{\nabla}_\mu \phi_k(\mathbf{r}, \sigma) \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma') - \vec{\nabla}_\mu \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \phi_k(\mathbf{r}, \sigma')] \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle.\end{aligned}\quad (3.31)$$

Dywergencja gęstości tensorowej pomnożona przez gęstość cząstek wnosi wkład do gęstości energii z fizyczną interpretacją wkładu od oddziaływania spin-orbita.

Zdefiniowanie gęstości spinowej służy nie tylko wprowadzeniu gęstości tensorowej, ale również jest istotne w opisie stanów podstawowych jąder nieparzystych oraz nieparzysto-nieparzystych, a także dowolnych stanów wzbudzonych. W analogii do gęstości kinetycznej τ , traktując spin jako dodatkowy stopień swobody, definiuje się niezależną od gęstości spinowej $\mathbf{s}$ wektorową gęstość kinetyczną $\mathbf{T}$:

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}) = [(\vec{\nabla}\vec{\nabla}')\mathbf{s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]_{|\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \stackrel{\text{KS}}{=} \sum_{k\sigma\sigma'} \vec{\nabla} \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \vec{\nabla} \phi_k(\mathbf{r}, \sigma') \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle. \quad (3.32)$$

Funkcjonał energii wyrażony przy użyciu powyższych gęstości ma jeszcze jeden mankament. Nie spełnia transformacji Galileusza. Podczas wyznaczania wartości średnich operatorów powyższych gęstości w gęstości hamiltonianu pojawia się bowiem człon proporcjonalny do $\rho\tau$. Wprowadzenie do teorii wektorowej gęstości pędu (prąd):

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2i} [(\vec{\nabla} - \vec{\nabla}')\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \\ &\stackrel{\text{KS}}{=} \frac{1}{2i} \sum_{k\sigma} [\phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \vec{\nabla} \phi_k(\mathbf{r}, \sigma) - \phi_k(\mathbf{r}, \sigma) \vec{\nabla} \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma)]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

powoduje, iż funkcjonal zachowuje transformację Galileusza pod warunkiem narzucenia odpowiednich warunków na stałe sprzężenia występujące przy członach $\rho\tau$ i j^2 oraz sT i J^2 .

Ponadto iloczyn skalarny gęstości spinowej z rotacją gęstości prądu daje dodatkowy wkład do całkowitej energii z fizyczną interpretacją oddziaływania spin-orbita.

Człon sT analogiczny do $\rho\tau$ pojawiający się w funkcjonale gęstości również nie spełnia transformacji Galileusza. Jednak tę można zapewnić przy pomocy wprowadzonej już gęstości tensorowej (3.31).

W powyższych wzorach druga równość oznacza pewną parametryzację wartości średnich operatorów gęstości. Mianowicie są to stany iloczynowe o ustalonej liczbie cząstek zbudowane z A orbitali jednocząstkowych.

Funkcjonał energii Skyrme'a jest trójwymiarową całką

$$\mathcal{E}[\rho, \tau] = \int \mathcal{H}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.34)$$

gdzie gęstość energii

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \tau + \mathcal{H}_{t=0} + \mathcal{H}_{t=1} \quad (3.35)$$

wyraża się przez gęstość energii kinetycznej oraz izoskalarną i izowektorową gęstość oddziaływania. Gęstości cząstkowa i kinetyczna wyrażone w notacji izospinowej spełniają transformację:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \rho_n + \rho_p & \tau_0 &= \tau_n + \tau_p \\ \rho_1 &= \rho_n - \rho_p & \tau_1 &= \tau_n - \tau_p \end{aligned} \quad (3.36)$$

gdzie ρ_n, τ_n i ρ_p, τ_p to odpowiednio gęstości (cząstkowe i kinetyczne) neutronowe i protonowe. Gęstość cząstkowa zdefiniowana w (3.26) zawiera człony, dla których stany protonowe i neutronowe są zmieszane. Jednak w tej pracy nie uwzględnia się mieszania protonowo-neutronowego, wobec czego funkcjonal gęstości można przedstawić w notacji izospinowej, gdzie gęstości izoskalarne (izowektorowe) są sumami (różnicami) gęstości neutronowych i protonowych.

Gęstości wchodzące w skład funkcjonala energii wygodnie dalej przegrupować ze względu na symetrię odwrócenia w czasie. I tak gęstości skalarnie i tensorowe $\rho, \tau, J_{\mu\nu}$ są przemienne z operatorem odwrócenia w czasie $\hat{T}$. Wkłady do energii pochodzące od tych gęstości tworzą tzw. kanał $\mathcal{T}$ —parzysty hamiltonianu. Do kanału $\mathcal{T}$ —nieparzystego należą natomiast pozostałe gęstości wektorowe $\mathbf{s}, \mathbf{T}, \mathbf{j}$, które pod wpływem działania operatora odwrócenia

w czasie zmieniają znak⁸. W takiej klasyfikacji lokalna gęstość hamiltonianu $\mathcal{H}$ przyjmuje postać:

$$\mathcal{H}_t^{even} = C_t^\rho \rho_t^2 + C_t^{\Delta\rho} \rho_t \Delta \rho_t + C_t^\tau \rho_t \tau_t + C_t^J \mathbf{J}_t^2 + C_t^{\nabla J} \rho_t \vec{\nabla} \mathbf{J}_t \quad (3.37)$$

$$\mathcal{H}_t^{odd} = C_t^s \mathbf{s}_t^2 + C_t^{\Delta s} \mathbf{s}_t \Delta \mathbf{s}_t + C_t^T \mathbf{s}_t \mathbf{T}_t + C_t^j \mathbf{j}_t^2 + C_t^{\nabla j} \mathbf{s}_t (\vec{\nabla} \times \mathbf{j}_t), \quad (3.38)$$

gdzie współczynniki C_t wyrażają się przez parametry oddziaływania Skyrme'a (3.17). Ich jawną postać można znaleźć np. w pracy [89]. Należy mieć na uwadze, że kwadrat tensora $\mathbf{J}_t^2 \equiv \sum_{\mu\nu} J_{\mu\nu,t}^2$, a jego wektorowa część $\mathbf{J}_{\lambda,t} \equiv \sum_{m\mu\nu} \epsilon_{\lambda\mu\nu} J_{\mu\nu,t}$.

W tym miejscu należy podkreślić, że lokalny funkcjonal jądrowy (3.37)–(3.38) jest najogólniejszym możliwym funkcjonalem biliniowym w gęstościach lokalnych $\rho, \tau, J_{\mu\nu}$ i $\mathbf{s}_t, \mathbf{j}_t, \mathbf{T}_t$ zgodnym z symetriami oddziaływania jądrowego o ile $C_t^j = -C_t^\tau$, $C_t^J = -C_t^T$ i $C_t^{\nabla J} = C_t^{\nabla j}$ co wynika z niezmienniczości galileuszowskiej. To co różni lokalne funkcjonały jądrowe generowane w ramach równych modeli teoretycznych to zależność od gęstości cząstkowej stałych sprzężenia C_i . Widać to wyraźnie poprzez porównanie funkcjonału Skyrme'a na przykład z funkcjonalem wywiedzionym z modelu QMC (*Quark-Meson Coupling*) w pracy [114], który to model konstruuje się wychodząc z zupełnie innych założeń fizycznych nawiązujących do fenomenologii QCD.

Parametryzacja Kohna-Shama jest prosta w interpretacji, jednak jej koszt jest spory. Dokładny opis gęstości cząstek sparametryzowanych przez wyznacznik Slatera prowadzi do niedokładnego opisu gęstości kinetycznej łamiącej symetrię translacyjną. Symetrię przesunięć można przywrócić przy użyciu metody zbędnych zmiennych wewnętrznych (redundant internal methods) [18]. Wówczas energię kinetyczną należy poprawić ze względu na ruch środka masy:

$$T = \frac{\hbar^2}{2m} \left(1 - \frac{1}{A}\right) \int d\mathbf{r} \tau_0(\mathbf{r}), \quad (3.39)$$

przy czym współczynnik $\left(1 - \frac{1}{A}\right)$ pochodzi od jednociałowego przybliżenia $\mathbf{P}^2 \approx \sum_{i=1}^A \mathbf{p}_i^2$ na ruch środka masy. We wszystkich obliczeniach w niniejszej pracy symetrię translacyjną traktujemy w sposób przybliżony, stosując przybliżenie jednociałowe, zgodnie z protokołem fitowania używanych oddziaływań.

Całkowity funkcjonal energii Skyrme'a-Hartree'ego-Focka uwzględniający energię pochodzącą od oddziaływania coulombowskiego jest sumą wkładów (3.37), (3.38), (3.39) oraz (3.22):

$$\begin{aligned} E_{\text{SHF}}(\rho) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(1 - \frac{1}{A}\right) \int d\mathbf{r} \tau_0(\mathbf{r}) + \sum_{t=0,1} \int d\mathbf{r} [\mathcal{H}_t^{even}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_t^{odd}(\mathbf{r})] \\ &+ \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_p(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (3.40)$$

⁸Całkowity hamiltonian jest parzysty względem działania operatora odwrócenia w czasie. Terminologia pochodzi jedynie od gęstości, które mogą być parzyste lub nieparzyste względem symetrii odwrócenia w czasie. Gęstość energii jest biliniowa w gęstościach i zawsze $\mathcal{T}$ -parzysta

Równania Kohna-Shama uzyskuje się, wariując gęstości (orbitale jednocząstkowe). Hamiltonian pola średniego przedstawia się wówczas:

$$h_t = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \Gamma_t^{even} + \Gamma_t^{odd} + U_t^{Cou}, \quad (3.41)$$

gdzie, U_t^{Cou} jest potencjałem pochodzącym od oddziaływania Coulomba – obecnym jedynie w polu protonowym, a Γ_t^{even} to potencjały odpowiednio $\mathcal{T}$ -parzyste i $\mathcal{T}$ -nieparzyste:

$$\begin{aligned} \Gamma_t^{even} &= -\nabla[M_t(\mathbf{r})\nabla] + U_t(\mathbf{r}) + \frac{1}{2i}((\nabla\sigma)B_t(\mathbf{r}) + B_t(\mathbf{r})(\nabla\sigma)) \\ \Gamma_t^{odd} &= -\nabla[(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{C}_t(\mathbf{r}))\nabla] + \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}) + \frac{1}{2i}(\nabla\mathbf{I}_t(\mathbf{r}) + \mathbf{I}_t(\mathbf{r})\nabla). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Funkcje definiujące potencjały pola średniego to odpowiednio:

$$\begin{aligned} U_t &= 2C_t^{\varrho}\varrho_t + 2C_t^{\nabla\varrho}\nabla\varrho_t + C_t^{\tau}\tau_t + C_t^{\nabla J}\nabla\mathbf{J}_t + U_t^{\text{rear}} \\ \boldsymbol{\Sigma}_t &= 2C_t^s\mathbf{s}_t + 2C_t^{\nabla s}\nabla\mathbf{s}_t + C_t^T\mathbf{T}_t + C_t^{\nabla j}\nabla\times\mathbf{j}_t \\ \mathbf{M}_t &= C_t^{\tau}\varrho_t \\ \mathbf{C}_t &= C_t^T\mathbf{s}_t \\ \mathbf{B}_t &= 2C_t^J\mathbf{J}_t - C_t^{\nabla J}\nabla\varrho_t \\ \mathbf{I}_t &= 2C_t^j\mathbf{j}_t + C_t^{\nabla j}\nabla\times\mathbf{s}_t. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Pojęcie samozgodności rozwiązań metody iteracyjnej ma co najmniej kilka aspektów. Mianowicie:

- gęstość cząstkowa i -tej iteracji jest równa co do pewnego ustalonego obcięcia gęstości cząstkowej $i+1$ -ej iteracji.
- energia całkowita i -tej iteracji z dokładnością do pewnego ustalonego obcięcia jest równa energii całkowitej w $i+1$ -ej iteracji.
- Najsilniejszym warunkiem samozgodności jest warunek, w którym energia $\mathcal{E}$ pochodząca od wycalkowanej gęstości hamiltonianu jest równa z pewną zadaną dokładnością energii:

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{1}{2}\mathcal{E}^{\text{s.p.}} + \frac{1}{2}\mathcal{E}^{\text{kin}} - \mathcal{E}^{\text{rear}} + \frac{1}{3}\mathcal{E}_{\text{exch}}^{\text{Cou}} \quad (3.44)$$

W kodzie numerycznym HFODD stabilność rozwiązania równań pola średniego uzyskuje się przez nałożenie warunku: $\delta\mathcal{E} \equiv \mathcal{E} - \bar{\mathcal{E}} = 0$. Wówczas zarówno pola średnie jak i gęstości nie zmieniają się z upływem kolejnych iteracji a o rozwiązaniu możemy mówić, że jest stabilne.

Teoria SHF będzie w tej pracy wykorzystywana jako źródło rozwiązań samozgodnych, czy to stanów podstawowych, czy stanów wzbudzonych. Te natomiast, po zastosowaniu technik rzutowych, będą następnie mieszane. Ponieważ kombinacja liniowa stanów iloczynowych nie jest w ogólności stanem iloczynowym rozwijany dalej formalizm będzie rozszerzeniem metody HF. Zanim jednak przejdziemy do formalizmu wychodzącego poza pole średnie, skupimy uwagę na charakterze używanego oddziaływania najpierw w kanale izoskalarnym następnie w kanale izowektorowym.

§4. Oddziaływania Skyrme’a niezależne od gęstości.

Saturację siły jądrowej w efektywnym oddziaływaniu jądrowym otrzymuje się standardowo poprzez zastąpienie członów wielociałowych oddziaływaniem zależnym od gęstości. Jak się jednak okazuje taki człon generuje niestabilności w rozwiązaniach rzutowych wychodzących poza przybliżenie pola średniego [115, 116, 117, 118, 119]. Przywrócenie spontanicznie złamanych symetrii przez pole średnie jest jednak kluczowe w opisie obserwacji związanych z rozpadami jądrowymi. Stabilność numeryczna w technikach rzutowych zobowiązuje zatem do używania oddziaływania niezależnego od gęstości. Najstarszym oddziaływaniem dwuciałowym niezależnym od gęstości jest parametryzacja SV [109]. Co ciekawe wraz z parametryzacją SVI powstała ona jako produkt uboczny badań nad własnościami oddziaływania w zależności od parametru t_3 siły oddziaływania zależnego od gęstości. Parametryzacje SIII i SIV powstały przy dopasowaniu parametrów t_0, x_0, t_1, t_2 przy ustalonym parametrze t_3 . W kanale wymiany spinu uwzględniono jedynie człon centralny, zatem parametrów x_1, x_2 nie wzięto do rozważań. Ponadto $\alpha = 1$, bowiem idea potęgowej zależności od gęstości została wprowadzona do oddziaływania później. Włączając do analizy parametryzację SII otrzymaną z pełnego dopasowania (wraz z parametrem t_3) w pracy [94] sprawdzono, że odpowiedź wszystkich parametrów na zmianę natężenia wkładu zależnego od gęstości jest z bardzo dużą dokładnością liniowa. Wobec tej obserwacji dokonano ekstrapolacji liniowej parametrów przy $t_3 \rightarrow 0$ – parametryzacja SV oraz $t_3 \rightarrow 17000 \text{ MeV fm}^3$ w przypadku parametryzacji SVI. Przyjęto wówczas założenie, że siła oddziaływania spin-orbita nie jest bezpośrednio skorelowana z pozostałymi parametrami oddziaływania i że zamiast ekstrapolacji należy ją dopasować do poziomów jednocząstkowych w jądrze ^{208}Pb . Koncepcja spinu wynika bezpośrednio z teorii relatywistycznej Diraca, wobec czego oddziaływanie spin-orbita nie jest *ad hoc* dodanym do hamiltonianu członem. Ponadto jak się okazuje [120] siłę krótkozasięgowego oddziaływania spin-orbita można powiązać ze skyrrowskimi parametrami t_1, t_2 oraz z masami mezonów pośredniczących w krótkozasięgowej części oddziaływania: m_ω, m_σ oraz m_ρ . Okazuje się wówczas, że zależność W od parametrów t_1, t_2 również jest liniowa. Zmiana tych parametrów podczas ekstrapolacji wpływa zatem na zmianę natężenia oddziaływania spin-orbita. Przyjęty parametr W_0 dla oddziaływania SV wynosi $W_0 = 150 \text{ MeV fm}^5$. Ekstrapolowany z sił SIII oraz SIV wynosi $W_0 = 167 \text{ MeV fm}^5$ natomiast z sił SII oraz SIV wynosi $W_0 = 202 \text{ MeV fm}^5$. Rozbieżność wynika z faktu, że parametr W_0 dla sił SIII oraz SIV został ustalony i nie był dopasowywany w pełnym ficie. W naszych rachunkach wykorzystujemy siłę SV w dwu wariantach: z oryginalną wartością W_0 oraz z powiększoną o 20% tj. $W_0 = 180 \text{ MeV fm}^5$ dalej zwaną SV_{SO} .

Dla nieskończonej materii środowisko jądrowe możemy traktować w przybliżeniu gazu Fermiego. Takie przybliżenie daje intuicyjne pojęcie o oddziaływaniu. Założenie nieskończoności natychmiast implikuje jednorodność układu, a ta niezmienniczość względem translacji. Zatem część oddziaływania zależna od pędu cząstek znika a funkcje falowe możemy opisywać falami płaskimi. Wówczas energia wiązania na cząstkę zgodnie ze wzorem (3.40) wynosi:

$$\frac{E_{\text{SHF}}}{A} = \frac{\mathcal{H}_{\text{SHF}}^{\text{even}}}{\rho} \stackrel{\text{N}=Z}{=} \frac{3}{5}T + \frac{3}{8}t_0\rho + \frac{1}{16}t_3\rho^2 + \frac{3}{80}(3t_1 + 5t_2)\rho k_F^2 \quad (3.45)$$

Warunek saturacji siły jądrowej wyznacza gęstość jądrową ρ w stanie równowagi. Matematycznie ciśnienie tj. zmiana gęstości energii w otoczeniu gęstości saturacji jest równe zero. Zgodnie ze wzorem (3.45) za równowagę siły jądrowej odpowiada balans pomiędzy energetycznym wkładem od członu centralnego wraz z członem zależnym od gęstości oraz

Tabela 3.1: Wartości parametrów Skyrme’a oraz niektóre własności nieskończonej materii jądrowej dla oddziaływań SII-SVI uporządkowanych z rosnącym parametrem t_3 [94, 109].

	t_3 (MeV fm ⁶)	t_0 (MeV fm ³)	x_0	t_1 (MeV fm ⁵)	t_2 (MeV fm ⁵)	W_0 (MeV fm ⁵)
SV	0	-1248.29	-0.17	970.6	107.2	150
SIV	5000	-1205.6	0.05	765	35	150
SII	9331	-1169.9	0.34	586.6	-27.1	105
SIH	14000	-1128.75	0.45	395	-95	120
SVI	17000	-1101.29	0.58	271.7	-138	115

	ρ (fm ⁻³)	E_0 (MeV)	K (MeV)	$\frac{m^*}{m}$	J (MeV)	V_0 w ⁴⁰ Ca (MeV)
SV	0.155	-16	306	0.38	32.72	-79.7
SIV	0.152	-16	325	0.47	31.22	-66
SII	0.148	-16	342	0.58	34.2	-55.3
SIH	0.145	-16	356	0.76	28.16	-44.6
SVI	0.145	-16	364	0.95	26.89	-38.1

członu $\rho\tau$. W przypadku braku członu w funkcyjale reprezentującego oddziaływania wielociałowe – tak jak w oddziaływaniu SV, balans ustala się poprzez zwiększenie wkładu od członu centralnego (wzrost parametru t_0) z jednoczesnym zmniejszeniem tzw. masy efektywnej m^* tj:

$$m^* = \left(\frac{2}{\hbar^2} \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{SHF}}^{\text{even}}}{\partial \tau} \right)^{-1} = m \left(1 + \frac{2m}{16\hbar} (3t_1 + 5t_2) \rho \right)^{-1} \quad (3.46)$$

względem oddziaływania zależnego od gęstości p.(3.45) oraz Tab. 3.1.

Mechanizm wysycenia sił jądrowych poprzez znaczne obniżenie masy efektywnej ma negatywne skutki. W szczególności, prowadzi on do zmniejszenia gęstości stanów jądrowych przy powierzchni Fermiego, co w konsekwencji prowadzi do niestabilności lub wręcz zaniku korelacji nadprzewodnikowych i wymusza stosowanie formalizmu Hartree’go-Focka w praktycznych zastosowaniach. Właśnie z tego powodu, w niniejszej rozprawie, zmuszeni jesteśmy do rozwijania technik rzutowych z wyznaczników Slatera, a nie z rozwiązań typu nadprzewodnikowego.

Niska masa efektywna to główny mankament siły SV. Jedyną możliwością jej zwiększenia, przy jednoczesnym utrzymaniu stabilności numerycznej w rachunkach rzutowych jest dodanie do oddziaływania członów wielociałowych zerowego zasięgu. Takie oddziaływanie, w którym efekty wielociałowe uwzględniono w postaci kontaktowej siły trójciałowej oraz czterociałowej jest obecnie rozwijane [111, 121]. Na chwilę obecną nie spełnia jednak wielu wymogów oczekiwanych od oddziaływania jądrowego. Przewidywania energii stanów podstawowych sił SLyMR0 oraz SLyMR1 β nadal są poniżej oczekiwań, a energia symetrii $J \approx 22\text{MeV}$ [111] tych oddziaływań daleko odbiega od przedziału ufności $J \in (30; 35)\text{MeV}$ [122]. Należy jednak podkreślić, że prace nad nowymi funkcjonalami, które można byłoby zaaplikować do metod rzutowych są niezwykle istotne szczególnie z perspektywy zwiększenia masy efektywnej.

Warto natomiast zauważyć, że wartość energii symetrii $J = 32.7 \text{ MeV}$ p. Tab. 3.1 dla oddziaływania SV jest bardzo bliska wartości doświadczalnej otrzymanej z analizy pigmejskich rezonansów dipolowych (PDR, Pigmy Dipole Resonance) [123, 124], czy też wartości otrzymanej z wieloskalowych dopasowań do mas jądrowych przy użyciu modelu FRDM (Finite-Range Droplet Model) [125], gdzie $J = 32.5 \pm 2.5 \text{ MeV}$ [122].

§5. Symetria obrotowa w izoprzestrzeni

Szczegółową analizę zagadnienia łamania symetrii izospinowej przez efektywne oddziaływanie silne czytelnik znajdzie w doktoracie Pawła Bączyka [8]. W tym paragrafie ograniczymy się jedynie do skróconego opisu łamania symetrii ładunkowej, całkowicie pomijając zagadnienie łamania niezależności ładunkowej. W ten sposób rozszerzymy standardowe oddziaływanie Skyrme’a opisane w poprzednim paragrafie o część izowektorową. Przeprowadzenie badań uwzględniających łamanie niezależności ładunkowej jest związane z koniecznością złamania osiowej symetrii izospinowej. W rachunkach wychodzących poza przybliżenie pola średniego oznacza to konieczność wykorzystania technik rzutowych w trójwymiarowej izoprzestrzeni. Na chwilę obecną takie rachunki w kodzie HFODD są niemożliwe. Przedstawimy również uzyskane w ramach współpracy główne wyniki badań i płynące z nich wnioski niezbędne do szerszego zrozumienia badań nad rozpadami Fermiego.

Przedstawione w (3.17) oddziaływanie Skyrme’a jest niezmiennicze ze względu na obrót w izoprzestrzeni, co oznacza, że w żaden sposób protony nie są wyróżnione nad neutronami i cząstki wchodzące w skład jądra możemy nazywać nukleonami. W konsekwencji zachodzą relacje komutacyjne [126]:

$$[\hat{H}_{\text{Skyrme}}, \hat{\mathbf{T}}^2] = 0 \quad [\hat{H}_{\text{Skyrme}}, \hat{\mathbf{T}}] = 0 \quad (3.47)$$

i tak jak dyskutowaliśmy w paragrafie 2 rozdziału 1 mówimy wówczas o zachowaniu niezmienniczości oraz niezależności ładunkowej. Dane eksperymentalne wskazują, że powyższe reguły komutacyjne spełnione są z bardzo dobrą dokładnością. W związku z tym większość modeli wielociałowych wykorzystuje oddziaływania izoskalarne. Dzięki temu, konstrukcja konfiguracji np. w przypadku modelu powłokowego może opierać się na stanach z dobrymi liczbami kwantowymi $|IM, TT_z\rangle$, co znacznie upraszcza rachunki.

Symetria izospinowa oddziaływania jądrowego jest jednak złamana w sposób oczywisty przez wkład pochodzący od siły *coulombowskiej*. Nadal dominujący wkład tej siły pochodzi od kanału monopolowego niezaburzającego symetrii izospinowej, a jej łamanie odbywa się dopiero w o wiele słabszych kanałach izowektorowym oraz izotensorowym.

Wyróżnienie cząstki ze względu na jej ładunek nie jest jednak jedynym źródłem łamania symetrii izospinowej. Okazuje się również, że różnica mas między kwarkami u i d , a w konsekwencji pomiędzy neutronem i protonem również przyczynia się do zaburzenia tej symetrii jednak tym razem w oddziaływaniu silnym. Różnica mas implikuje różnicę w energiach kinetycznych. Ma też wpływ na wymianę bozonów pośredniczących.

Łamanie symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne jest widoczne w danych doświadczalnych. W pierwszej kolejności rozróżnienie cząstek uwiadamia się w eksperymen-

tach rozproszeniowych, które pokazują różnice w długościach rozpraszania w zależności od pary nukleonów. I tak, po usunięciu wkładu od oddziaływania Coulomba, w kanale 1S_0 długości rozpraszania neutron-neutron (nn), neutron-proton (np) oraz proton-proton (pp) są równe $a_{nn} \approx -18.9 \text{ fm}$, $a_{np} \approx -23.7 \text{ fm}$ oraz $a_{pp} \approx -17.3 \text{ fm}$ [127]. Te dane wskazują, że oddziaływanie jądrowe nie działa jednakowo między dwoma neutronami oraz między dwoma protonami $V_{nn} \neq V_{pp}$. Na podstawie danych można wywnioskować, że V_{nn} jest silniejsze od V_{pp} o około 1%, a w konsekwencji, że złamana jest symetria ładunkowa. Ponadto różnice w oddziaływaniu między tymi parami uwiadcniają się w strukturze jądrowej. Badając różnice energii wiązania w parach jąder zwierciadlanych dla szerokiego zakresu mas (*mirror displacement energy*, MDE):

$$\text{MDE} = BE(T, T_z = -T) - BE(T, T_z = T) \quad (3.48)$$

Nolen i Shiffer [128] zauważyli, że nawet przy bardzo dokładnym uwzględnieniu wpływu oddziaływania Coulomba rachunki z izospinowo-niezmienicznym oddziaływaniem silnym nie odtwarzają różnic eksperymentalnych. W literaturze to zagadnienie nazywa się anomalią Nolena-Shiffera i świadczy o łamaniu symetrii ładunkowej przez efektywne oddziaływanie silne.

Efekty łamania symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne były obiektem badań przeprowadzanych przez wiele grup badawczych wykorzystujących różne metody wielociałowe w opisie jądra atomowego. Począwszy od obliczeń w modelach *ab initio* [129], pola średniego Hartree’ego–Focka [130] aż do modelu powłokowego [131, 132]. Rozwój kodu numerycznego HFODD [5] pozwolił na globalne badania nad anomalią Nolena-Shiffera po raz pierwszy przy użyciu metody jądrowego funkcjonału gęstości z funkcjonalem Skyrme’a [9, 133] i funkcjonalem wyprowadzonym z modelu QMC [114, 134].

Oddziaływania łamiące symetrię izospinową standardowo klasyfikuje się zgodnie z podziałem zaproponowanym przez Henley’a i Millera [126]:

$$V^{\text{I}}(i, j) = a + b\hat{\boldsymbol{\tau}}(i)\hat{\boldsymbol{\tau}}(j) \quad (3.49)$$

$$V^{\text{II}}(i, j) = c\left[\hat{\tau}_z(i)\hat{\tau}_z(j) - \frac{1}{3}\hat{\boldsymbol{\tau}}(i)\hat{\boldsymbol{\tau}}(j)\right] \quad (3.50)$$

$$V^{\text{III}}(i, j) = d[\hat{\tau}_z(i) + \hat{\tau}_z(j)] \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} V^{\text{IV}}(i, j) &= e[\hat{\boldsymbol{\sigma}}(i) - \hat{\boldsymbol{\sigma}}(j)]\hat{\mathbf{L}}[\hat{\tau}_z(i) + \hat{\tau}_z(j)] \\ &+ f[\hat{\boldsymbol{\sigma}}(i) \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}(j)]\hat{\mathbf{L}}[\hat{\boldsymbol{\tau}}(i) \times \hat{\boldsymbol{\tau}}(j)]_z \end{aligned} \quad (3.52)$$

I tak siła klasy I (3.49) komutuje z operatorem całkowitego izospinu jądra przez co jest izospinowo-niezmieniczna. Jej postać jest tożsama z lokalnym oddziaływaniem nukleon-nukleon zapisanym w postaci Landaua (3.13). Klasa II (3.50) reprezentuje siły łamiące symetrię izospinową w kanale izotensorowym i odpowiada za złamanie niezależności ładunkowej, jednocześnie zachowując symetrię ładunkową. Okazuje się, że jest ona kluczowa w opisie krzywizny energii wiązania w trypletach izospinowych – *triplet displacement energy* TDE:

$$\text{TDE} = BE(T = 1, T_z = -1) + BE(T = 1, T_z = 1) - 2BE(T = 1, T_z = 0) \quad (3.53)$$

jednak marginalna przy opisie MDE w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ oraz $T = 1$ [8, 11]. Z tego powodu nie będziemy dalej jej omawiać.

Izowektorowe oddziaływanie klasy III (3.51) opisuje łamanie symetrii ładunkowej. Różnicuje oddziaływanie między dwoma neutronami oraz dwoma protonami. W przypadku oddziaływania Skyrme’a dla członów objętościowego oraz powierzchniowego oddziaływania klasy III przyjmuje postać [133]:

$$V_{Sk}^{III}(i, j) = \left\{ t_0^{III} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + t_1^{III} \left[\vec{k}^2 \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \vec{k}^2 \right] + t_2^{III} \vec{k} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \vec{k} \right\} \left[\hat{\tau}_z(i) + \hat{\tau}_z(j) \right]. \quad (3.54)$$

Dla tak sformułowanego oddziaływania podobnie do (3.37), (3.38) wyprowadzono funkcjonał gęstości energii. Parametry dodatkowej siły zostały dopasowane do różnic eksperymentalnych MDE w jądrach zwierciadlanych w zakresie mas $A = 6 - 75$. Dopasowano w ten sposób kilka funkcjonałów w tym: SV, SkM* oraz SLy4.

Z perspektywy dalszej części tej pracy i rachunków rzutowych szczególnie istotna jest parametryzacja i dopasowanie klasy III z siłą SV_{SO} [8]. Poniżej przedstawiono odpowiednie parametry dopasowane do danych doświadczalnych w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ oraz $T = 1$ w zakresie mas $A = 7 - 75$ oraz $A = 6 - 58$:

$$t_0^{III,LO} = -6.7 \pm 0.3 \text{ MeVfm}^3 \quad (3.55)$$

$$t_0^{III,NLO} = 5 \pm 2 \text{ MeVfm}^3 \quad t_1^{III,NLO} = -3 \pm 3 \text{ MeVfm}^5 \quad t_2^{III,NLO} = -7.4 \pm 0.8 \text{ MeVfm}^5 \quad (3.56)$$

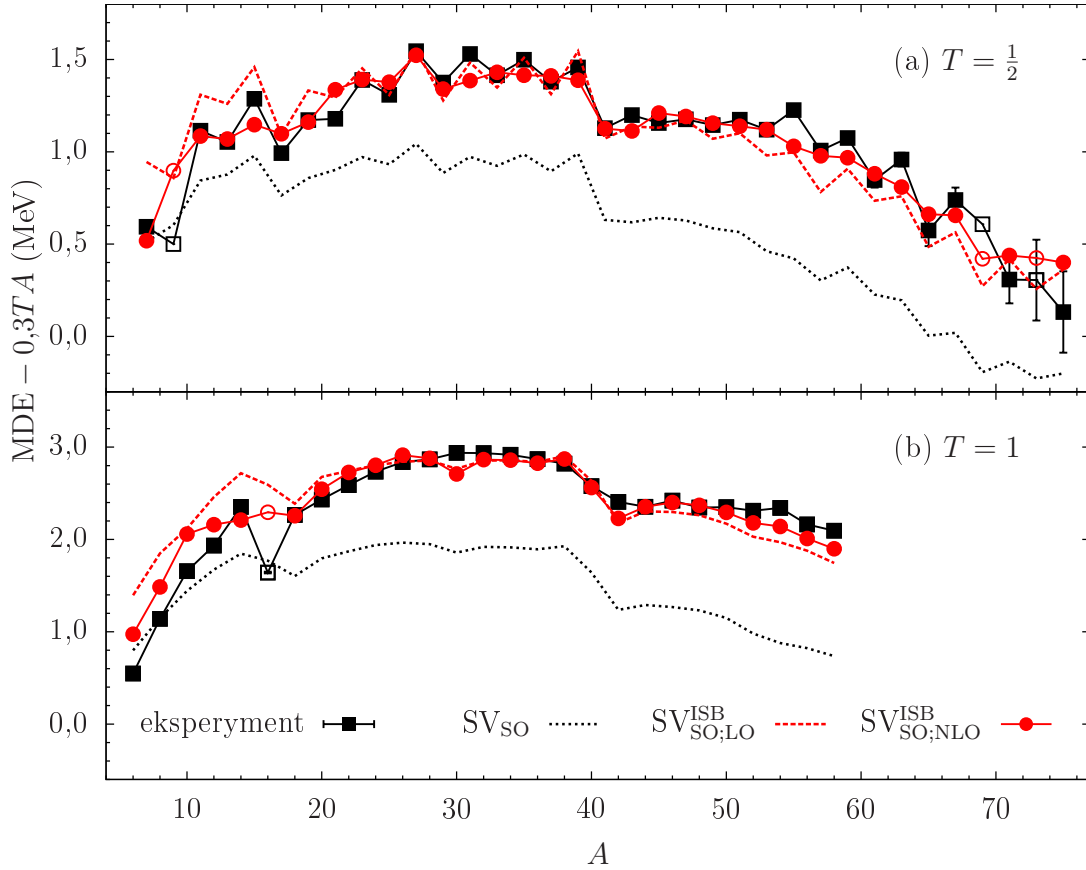
Na wykresie 3.1 przedstawiono wartości MDE otrzymane z funkcjonałami różniącymi się źródłem łamania symetrii izospinowej. Oddziaływanie SV_{SO} łamie symetrię izospinową jedynie przez oddziaływanie Coulomba, w $SV_{SO;LO}^{ISB}$ włączono oddziaływanie klasy III (3.51) w wiodącym rzędzie z parametrem (3.55), natomiast w $SV_{SO;NLO}^{ISB}$ oddziaływanie klasy III wraz z członami powierzchniowymi z parametrami (3.56). Wykorzystanie członów klasy III w obliczeniach już w wiodącym rzędzie zdaje się wyjaśniać anomalie Nolena-Shiffera, a uwzględnienie kolejnego rzędu rozwinięcia dodatkowo poprawia zgodność z danymi doświadczalnymi szczególnie w rejonach lekkich i ciężkich jąder.

Wprawdzie dwuciałowa siła klasy IV (3.52) łamie zarówno symetrię jak i niezależność ładunkową, to jej wkład do obserwabli jest zaniedbywalny [129]. Z tego powodu we wszystkich przeprowadzanych rachunkach nie uwzględniamy tej klasy.

Izowektorowe oddziaływanie Skyrme’a zostało zaimplementowane w kodzie HFODD w wersji opublikowanej w pracy [5].

§6. Przywracanie symetrii rotacyjnej metodą rzutowania

Niemal każdy dotychczasowy paragraf tego rozdziału dotyczy problemu łamania symetrii. Parametryzacja gęstości w ujęciu Kohna-Shama prowadzi do łamania symetrii translacyjnej a w konsekwencji do niedokładnego opisu energii kinetycznej. Uwzględnienie efektów łamania tej symetrii wymaga wprowadzenia dodatkowej poprawki ze względu



Rys. 3.1: Wartości MDE z odjętym trendem liniowym podane w MeV w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ (panel górny) oraz $T = 1$ (panel dolny) w zakresach mas $A = 7 - 75$ oraz $A = 6 - 58$. Czarna linia kropkowana reprezentuje średniopółowe obliczenia wykonane z funkcjonałem SV_{SO} bez izowektorowych członów łamiących izospin w oddziaływaniu silnym, czerwona linia kropkowana przedstawia rachunki z uwzględnieniem klasy III (3.51) w wiodącym rzędzie $SV_{SO;LO}^{ISB}$, natomiast czerwona linia ciągła ze znacznikiem odnosi się do obliczeń z klasą III w kolejnym po wiodącym rzędzie rozwinięcia $SV_{SO;NLO}^{ISB}$. Czarnymi kwadratami oznaczono dane eksperymentalne [135]

na ruch środka masy. W celu zachowania niezmienniczości względem transformacji Galileusza, wprowadza się do struktury funkcjonału np. gęstość tensorową. Wreszcie w ostatniej sekcji przedstawiliśmy oddziaływanie nukleon-nukleon wychodzące poza standardową siłę Skyrme’a (3.17). Wraz z oddziaływaniem Coulomba łamie ono – w sposób jawny, a więc fizyczny – symetrię izospinową.

Metoda Hartree’ego–Focka jest narzędziem teoretycznym pozwalającym obliczyć stany wielofermionowe nukleonów poruszających się w sposób niezależny w pewnym jednociałowym potencjale wyznaczonym przez uśrednienie efektywnego oddziaływania między nimi. Przybliżenie pola średniego generuje łamanie symetrii pełnego hamiltonianu ze względu na konieczność wyboru określonej klasy funkcji próbných potrzebnej do zastosowania metody wariacyjnej i przybliżony charakter rozwiązań. Przykładem może być łamanie symetrii liczby cząstek w teorii HFB, czy też symetrii izospinowej, która naruszana jest przez przybliżenie pola średniego także spontanicznie, w sposób niefizyczny. Głównym po-

wodem wprowadzenia wieloreferencyjnej teorii funkcjonału gęstości jest jednak łamanie przez pole średnie symetrii obrotowej. Przywrócenie tej symetrii umożliwia zastosowanie metody DFT do obliczeń struktury stanów wzbudzonych jak również wyznaczania elementów macierzowych przejść elektromagnetycznych oraz przejść beta.

Metoda pola średniego w ujęciu Hartree’ego-Focka zachowuje symetrię rotacyjną hamiltonianu w przypadku jąder, w których cząstki całkowicie wypełniają określone powłoki. Z tego powodu parametry oddziaływania w metodzie HF dopasowuje się jedynie do danych eksperymentalnych jąder podwójnie magicznych. W przypadku dodania do układu niewielkiej liczby cząstek, tworząc w ten sposób układ z otwartą powłoką, układ po przejściu procedury wariacyjnej staje się układem zdeformowanym. Dzieje się tak, bowiem ze względu na narzucenie na funkcję falową postaci wyznacznika Slatera, obsadzenie kilku cząstek ponad zamkniętą powłoką łączy się z koniecznością wyboru zdegenerowanych orbitali o określonym rzucie momentu pędu. Takie rozwiązanie, wyróżniające pewne orbitale ze względu na magnetyczną liczbę kwantową spośród $2j+1$ o tej samej energii natychmiast łamie symetrię obrotową. Nowa funkcja falowa generuje w kolejnej iteracji - ze względu na nieliniowość równań Hartree’ego-Focka, zdeformowane pole średnie. A wówczas walencyjne cząstki w zdeformowanym polu średnim zaczynają oddziaływać z tzw. rdzeniem i cały układ ulega deformacji. W ten sposób spontaniczne łamanie symetrii obrotowej wzbogaca funkcję falową o bardzo istotne korelacje związane z tzw. polaryzacją rdzenia. Opisany tu efekt znoszenia degeneracji nosi w chemii kwantowej i fizyce molekularnej nazwę efektu Jahna-Tellera. W myśl twierdzenia udowodnionego przez Jahna i Tellera układ cząsteczkowy, w którym występuje degeneracja orbitali będzie nietrwały i będzie ulegał zaburzeniu tworząc układ o niższej energii i niższej symetrii dzięki zmniejszeniu krotności degeneracji poziomów energetycznych [136]. Zdeformowany model średniego pola bazujący na fenomenologicznym potencjale osiowego oscylatora harmonicznego wprowadził do fizyki jądrowej po raz pierwszy Nilsson [137]. Stąd poziomy (orbitale) jednocząstkowe w fizyce jądrowej określa się mianem poziomów Nilssona, niezależnie od tego czy są one rozwiązaniami modeli samozgodnych Hartree’ego-Focka, czy też modeli bazujących na zdeformowanych potencjałach fenomenologicznych. W tym kontekście warto podkreślić rolę nadprzewodnictwa jądrowego, które preferuje symetrię sferyczną. W jądrach atomowych pole *pairing* będzie zatem dążyło do pewnej redukcji deformacji jądrowej w stosunku do rozwiązań Hartree’ego-Focka.

Łamanie symetrii obrotowej wzbogaca funkcję falową układu kwantowego o wiele dodatkowych korelacji tworząc, jak mówi przytoczone wyżej twierdzenie Jahna-Tellera, układ o niższej energii i niższej symetrii dzięki zmniejszeniu krotności degeneracji poziomów energetycznych. Rozwiązania ze złamaną symetrią pozwalają na odtworzenie szeregu obserwabli zwanych popularnie objętościowymi, do których zaliczamy masy, promienie czy też momenty kwadrupolowe jąder. Funkcja falowa modelu zdeformowanego jest jednak zupełnie bezużyteczna przy obliczeniach wielu innych obserwabli takich jak przejścia elektromagnetyczne czy też rozpady beta. Wynika to z faktu, że hamiltonian jądrowy, w przeciwieństwie do cząsteczkowego, jest sferycznie symetryczny co oznacza konieczność przywrócenia naruszonej symetrii rotacyjnej.

Symetrii obrotowej nie da się przywrócić metodą redukcji zmiennych jak w przypadku symetrii translacyjnej. Ciężko bowiem znaleźć współrzędne rozdzielające zmienne układu wewnętrznego i zmienne kolektywne, jak również nie ma dobrze zdefiniowanego odpowied-

nika środka masy dla kątów. Jest wiele dostępnych metod w obrębie teorii pola średniego, które służą do przywracania złamanych symetrii. Zaliczają się do nich m.in. *cranking* [18], *isocranking* [138, 139, 140] - metody przywracające moment pędu lub izospin, metoda Lipkina [141, 142], czy Lipkina-Nogami [143, 144] dbające o zachowanie przez funkcję falową liczby cząstek. Powyższe metody są jednak przybliżeniami. W pełni ścisły kwantowo-mechaniczny opis przywracania złamanych symetrii można uzyskać przy użyciu metod rzutowych [145]. W szczególności w przypadku symetrii obrotowej w przestrzeni i w izoprzestrzeni wykorzystuje się własności grupy $SU(2)$ opisane w rozdziale 1.

Grupe obrotów $SU(2)$ można sparametryzować przy użyciu trzech kątów Eulera $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$. Funkcja falowa pod wpływem obrotu układu współrzędnych przyjmuje postać:

$$|\tilde{\Phi}(\Omega)\rangle = \hat{\mathcal{R}}(\Omega) |\Phi\rangle, \quad (3.57)$$

gdzie operator $\hat{\mathcal{R}}$ jest operatorem obrotu wprowadzonym w (1.12). W przypadku grupy $SU(2)$ sparametryzowanej kątami Eulera na podstawie (1.23) przyjmuje on postać:

$$\hat{\mathcal{R}}(\Omega) = e^{i\alpha\hat{J}_z} e^{i\beta\hat{J}_y} e^{i\gamma\hat{J}_z}. \quad (3.58)$$

Dla sferycznie symetrycznego hamiltonianu wartości średnie wyznaczone dla stanów postaci $|\tilde{\Phi}(\Omega)\rangle$ będą identyczne. Uwzględnienie nieskończenie wielu zdegenerowanych rozwiązań prowadzi do funkcji falowej postaci:

$$|\Psi\rangle = \int d\Omega f(\Omega) |\tilde{\Phi}(\Omega)\rangle, \quad (3.59)$$

gdzie $f(\Omega)$ są funkcjami wagowymi, a element objętości $d\Omega = \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma$. Postać funkcji $f(\Omega)$ wyznacza się, rozwijając ją w bazie reprezentacji grupy tak, aby funkcja falowa $|\Psi\rangle$ spełniała warunek (1.12). W przypadku symetrii rotacyjnej grupy $SU(2)$ (1.27) rozwinięcie odbywa się w tzw. funkcjach D –Wignera, które w przestrzeni przyjmują postać:

$$D_{KM}^{I*}(\Omega) = \langle IK | \hat{\mathcal{R}}(\Omega) | IM \rangle = e^{i\alpha K} d_{KM}^I(\beta) e^{i\gamma M}, \quad (3.60)$$

gdzie funkcję

$$d_{KM}^I(\beta) = \langle IK | \hat{\mathcal{R}}(\beta) | IM \rangle \quad (3.61)$$

nazywa się funkcją d –Wignera, a operator $\hat{\mathcal{R}}(\beta)$ jest operatorem jednowymiarowego obrotu wokół osi y . Funkcja wagowa dla określonego momentu pędu I oraz rzutu M na oś Oz przyjmuje postać:

$$f(\Omega) = \frac{2I+1}{8\pi^2} \sum_K a_K^I D_{MK}^{I*}(\Omega), \quad (3.62)$$

wówczas funkcja falowa, zgodnie ze wzorami (3.59) i (3.62) wyraża się jako:

$$|\Psi, IM\rangle = \frac{2I+1}{8\pi^2} \sum_K \int d\Omega a_K^I D_{MK}^{I*}(\Omega) \hat{\mathcal{R}}(\Omega) |\Phi\rangle \equiv \sum_K a_K^I \hat{P}_{MK}^I |\Phi\rangle. \quad (3.63)$$

Druga równość wynika bezpośrednio ze wzoru na operator rzutowy (1.14), który w obrębie grupy SU(2) przyjmuje postać:

$$\hat{P}_{MK}^I = \frac{2I+1}{8\pi^2} \int D_{MK}^{*I}(\Omega) \hat{\mathcal{R}}(\Omega) d\Omega, \quad (3.64)$$

gdzie $2I+1$ jest wymiarem reprezentacji, a $|G| = \int d\Omega = 8\pi^2$ objętością w przestrzeni sparametryzowanej kątami Eulera. Operator rzutowy $\hat{P}_{MK}^I$ można także zapisać w postaci spektralnej:

$$\hat{P}_{MK}^I = \sum_{\alpha} |IM; \alpha\rangle \langle IK; \alpha|, \quad (3.65)$$

gdzie sumowanie rozciąga się na pozostałe liczby kwantowe. Korzystając z tej postaci można łatwo pokazać, że operator $\hat{P}_{MK}^I$ spełnia relacje (1.15) oraz (1.16):

$$\hat{P}_{MK}^I \hat{P}_{M'K'}^{I'} = \delta_{II'} \delta_{M'K} \hat{P}_{MK}^I, \quad (\hat{P}_{MK}^I)^\dagger = \hat{P}_{KM}^I. \quad (3.66)$$

W ogólności współczynniki rozwinięcia a_K^I (3.62) otrzymuje się, korzystając z zasady wariacyjnej $\delta E_I = 0$ [18]. Energia układu kwantowego w bazie wyrzutowanych liczb kwantowych przyjmuje postać:

$$E_I = \frac{\langle \Psi, IM | \hat{H} | \Psi, IM \rangle}{\langle \Psi, IM | \Psi, IM \rangle} = \frac{\sum_{KK'} a_K^{I*} a_{K'}^I \mathcal{H}_{KK'}^I}{\sum_{KK'} a_K^{I*} a_{K'}^I \mathcal{N}_{KK'}^I}, \quad (3.67)$$

gdzie, korzystając z relacji (3.63) oraz z faktu, że hamiltonian komutuje z operatorem rzutowym $\hat{P}_{KM}^I$, zdefiniowano całkowe kernele hamiltonianu:

$$\mathcal{H}_{KK'}^I = \langle \Phi | \hat{H} \hat{P}_{KK'}^I | \Phi \rangle \quad (3.68)$$

oraz normy:

$$\mathcal{N}_{KK'}^I = \langle \Phi | \hat{P}_{KK'}^I | \Phi \rangle. \quad (3.69)$$

Kernel dowolnego operatora $\mathcal{O}$:

$$\mathcal{O}(\Omega) = \langle \Phi | \hat{\mathcal{O}} | \tilde{\Phi}(\Omega) \rangle, \quad (3.70)$$

jest wartością średnią obliczaną na stanach wyrzutowanych. A zatem zgodnie z twierdzeniem Wicka dla dowolnych operatorów jedno $\hat{F}$ i dwuciałowych $\hat{V}$ kernele [146]:

$$\frac{1}{\mathcal{N}(\Omega)} \mathcal{F}(\Omega) = \frac{\langle \Phi | \hat{F} | \tilde{\Phi} \rangle}{\langle \Phi | \tilde{\Phi} \rangle} \equiv \sum_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \tilde{\rho}_{\nu\mu} \quad (3.71)$$

$$\frac{1}{\mathcal{N}(\Omega)} \mathcal{V}(\Omega) = \frac{\langle \Phi | \hat{V} | \tilde{\Phi} \rangle}{\langle \Phi | \tilde{\Phi} \rangle} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\lambda\pi} \bar{V}_{\mu\nu\lambda\pi} \tilde{\rho}_{\lambda\mu} \tilde{\rho}_{\pi\nu} \quad (3.72)$$

oblicza się, przy użyciu gęstości przejściowych:

$$\tilde{\rho}_{\nu\mu} \equiv \overline{a_\mu^\dagger a_\nu} \equiv \frac{1}{\mathcal{N}(\Omega)} \langle \Phi | a_\mu^\dagger a_\nu | \tilde{\Phi}(\Omega) \rangle \quad (3.73)$$

Ze względu na fakt, iż liczba kwantowa K nie musi być zachowana współczynniki a_K^I są rozwiązaniem wariacyjnego równania zwanego w literaturze równaniem Hilla–Wheeler [147, 148]:

$$\sum_{K'} a_{K'}^I (\mathcal{H}_{KK'}^I - E^I \mathcal{N}_{KK'}^I) = 0 \quad (3.74)$$

Powyższe równanie nie jest typowym równaniem własnym. Rozwiązanie otrzymuje się poprzez diagonalizację Hamiltonianu w bazie nieortogonalnej rozpiętej przez wyrzutowane stany (3.57). W ogólności stany te są liniowo zależne. W takim przypadku generowana przez nie baza jest nadzupełna. Wówczas diagonalizację przeprowadza się w podprzestrzeni rozpiętej przez wybrane liniowo niezależne stany, będące kombinacjami liniowymi stanów wyrzutowanych. Taką podprzestrzeń nazywa się przestrzenią kolektywną. Wyboru dokonuje się przez ortogonalizację wyrzutowanych stanów. Procedurę można przeprowadzić przy użyciu metody Grama-Schmidta lub dokonując diagonalizacji macierzy norm [18]. W używanym programie numerycznym HFODD [5] stosuje się tę drugą metodę. Przy założeniu, że wartości własne macierzy norm są dodatnie $n_i > 0$, a ξ_i są odpowiadającymi im wektorami własnymi, ortogonalne stany rozpinające przestrzeń kolektywną zwane stanami naturalnymi przyjmują postać:

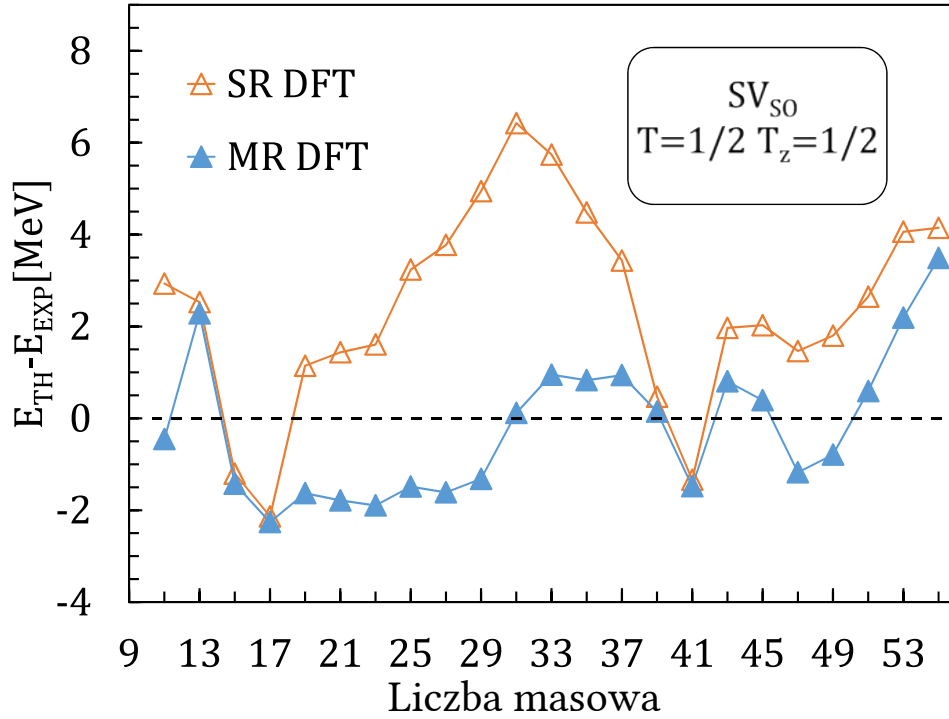
$$|\Phi; IM\rangle^{(m)} = \frac{1}{\sqrt{n_m}} \sum_K \xi_K^{(m)} |\Phi; IMK\rangle \quad (3.75)$$

Indeks m numeruje stany do pewnego zadanego $n_{\max}$ wyznaczającego wymiar przestrzeni kolektywnej. W teorii wystarcza, aby $n_m > 0$. Jednak w praktyce niedokładność numeryczna w całkowaniu kerneli wymusza wprowadzenie parametru obciążenia norm $n_m \ll \zeta$ bliskich zera, zmniejszając jednocześnie wymiar przestrzeni kolektywnej. Równanie Hilla–Wheeler w przestrzeni kolektywnej przyjmuje postać hermitowskiego równania własnego. Wobec czego diagonalizacja hamiltonianu w tejże przestrzeni prowadzi do wyznaczenia współczynników zmieszania a_K^I .

Przywracanie spontanicznie złamanych symetrii opisaną wyżej metodą rzutowania nazywa się wieloreferencyjną metodą DFT (*multireference DFT*) i oznacza MR DFT. Nazwa oddaje istotę całej procedury zawartą w równaniu (3.59). Stan z dobrze określonymi symetriami jest bowiem kombinacją liniową wielu obróconych stanów ze złamanymi symetriami. Wprowadzając do użytku nomenklaturę stanów referencyjnych, stan wyznaczony w ramach metody DFT ze spontanicznie naruszonymi symetriami nazywamy pojedynczym stanem referencyjnym *single-reference DFT* i oznaczamy SR DFT.

Znajomość współczynników zmieszania oraz kerneli hamiltonianu i normy umożliwia wyznaczenie energii wiązania w stanach wyrzutowanych (3.67).

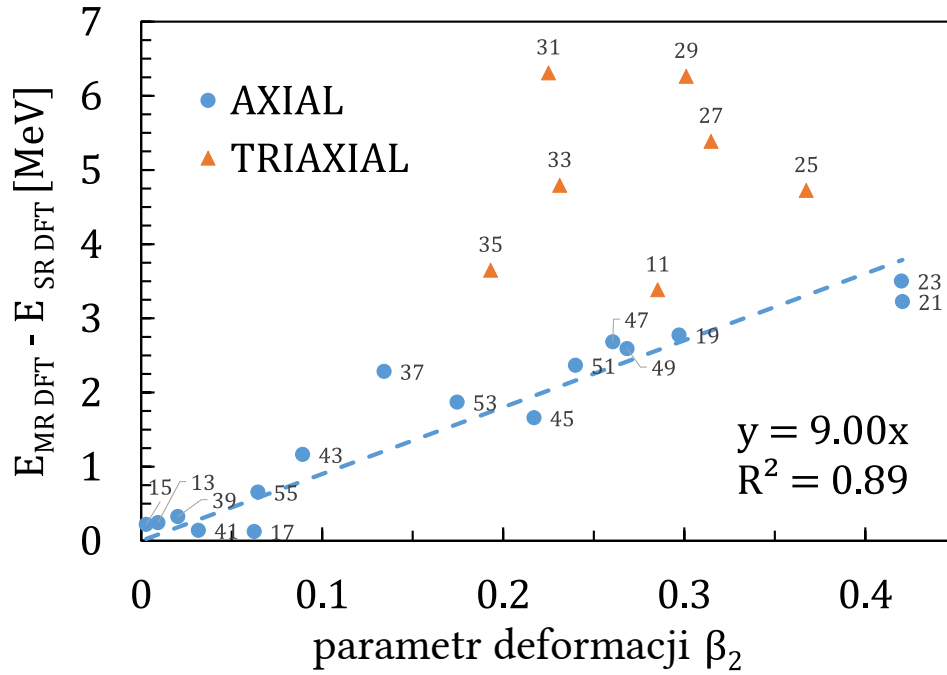
Funkcjonałów ze stałymi dopasowanymi do jąder podwójnie magicznych używamy w niniejszej rozprawie zarówno w rachunkach SR DFT jak i MR DFT. W przypadku metody wieloreferencyjnej ograniczamy się do funkcyjałów generowanych siłami Skyrme’a niezależnymi od gęstości. Stąd w przypadku oddziaływań typu SV zasadne jest porównanie obu metod. Residua energii stanów podstawowych jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z walencyjnym neutronem z zakresu $A = 11 - 55$, Rys. 3.2 wskazują, że metoda MR



Rys. 3.2: Residua energii wiązania dla stanów podstawowych neutronowo-nadmiarowych jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 55$. Obliczenia wykonano przy użyciu oddziaływania SV_{SO} w modelu pola średniego ze spontanicznie złamanymi symetriami (SR DFT) oraz w wersji z przywróconą symetrią rotacyjną (MR DFT) oznaczonymi odpowiednio przez otwarte pomarańczowe i pełne niebieskie trójkąty.

DFT z funkcjonałem SV_{SO} znacznie poprawia zgodność z doświadczeniem dla tych jąder. Zastosowanie metody MR DFT redukuje niemal dwukrotnie odchylenie standardowe z $\sigma_{SRDFT} = 3.06 \text{ MeV}$ do $\sigma_{MRDFT} = 1.54 \text{ MeV}$, co średnio stanowi 0.9% energii wiązania. Różnica w energiach dla obu metod jest szczególnie widoczna dla jąder trójosiowych $A = 11$ oraz $A = 25 - 37$. Nagły wzrost residuum dla jąder $A = 53 - 55$ jest najprawdopodobniej spowodowany oddziaływaniem tensorowym. W przypadku starszych oddziaływań Skyrme'a, jak SV , dopasowanie stałych sprzężenia wykonywano z nieaktywnym członem tensorowym $C_t^J = 0$ [94, 109]. W tej pracy, w rachunkach MR DFT używany funkcjonal jest generowany pełnym oddziaływaniem Skyrme'a. Zawiera on zatem człon tensorowy, którego stała sprzężenia C_t^J jest prawdopodobnie dość przypadkowa. Została ona bowiem obliczona z parametrów oddziaływania Skyrme'a dopasowanego bez udziału tego członu. Procedurę dopasowania należałoby wykonać przy aktywnych wszystkich składowych funkcjonału. Oddziaływanie tensorowe jest szczególnie aktywne dla jąder maksymalnie spinowo-niewysyconych, w szczególności dla jąder w okolicy ^{56}Ni , które ma w pełni obsadzoną podpowłokę $0f_{7/2}$ i pustą podpowłokę $0f_{5/2}$.

Obniżenie energii wiązania w wyniku przywrócenia symetrii obrotowej jest ściśle związane z geometrią jądra. Na wykresie 3.3 przedstawiono tę energię w zależności od parametru deformacji jądra β_2 dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$. W przypadku jąder osiowych zależność między energią uzyskaną w wyniku rzutowania na określony moment pędu a parametrem β_2 z bardzo dobrą dokładnością jest liniowa. Współczynnik determinacji R^2 ,



Rys. 3.3: Energia uzyskana w wyniku przywrócenia symetrii rotacyjnej w zależności od parametru deformacji β_2 dla neutronowo-nadmiarowych jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 55$. Osiowo zdeformowane jądra oznaczono niebieskimi punktami, natomiast jądra trójosiowe przedstawiono przy pomocy pomarańczowych trójkątów. Etykiety obok punktów oznaczają liczbę masową jądra. Liniowa krzywa regresji została dopasowana do jąder osiowych.

będący miarą dopasowania krzywej regresji jest równy 0.89 i wzrasta do 0.95 przy usunięciu przypadku jądra ^{37}Ar . Jak się okaże w późniejszej dyskusji jądra $A = 37$ oraz $A = 38$ wykazują anomalne zachowania ze względu na *niefizyczne* mieszanie orbitali s oraz d . Wzrost deformacji o 0.1 powoduje przyrost energii o 900 keV. Najmniejszy przyrost energii obserwuje się dla jąder sferycznych lub w bardzo niewielkim stopniu zdeformowanych. Największy natomiast dla jąder trójosiowych, dla których przyrost energii związany jest z mieszaniem magnetycznej wewnętrznej liczby kwantowej K .

Warto skomentować konieczność wprowadzenia dodatkowej liczby kwantowej K do rzutowania. Otóż funkcja falowa $\hat{P}_{MM}^I |\Phi\rangle$ nie spełnia relacji (1.12), wobec czego nie transformuje się jak tensor w obrębie grupy $\text{SU}(2)$ pod wpływem obrotu generowanego przez $\hat{\mathcal{R}}$ (3.49). Jest to bezpośrednia konsekwencja faktu, iż trójwymiarowa grupa obrotów nie jest przemieniana. Stąd niezbędne jest rozszerzenie rzutowania o dodatkową liczbę kwantową K . Taki zabieg powoduje jednak, że operator $\hat{P}_{MK}^I$ nie jest już operatorem rzutowym w sensie matematycznym. Przypadek jednowymiarowego obrotu opisywany jest już w obrębie grupy abelowej. Wówczas nie ma potrzeby rozszerzania operatora rzutowego o rzut na z -ową oś układu wewnętrznego. Jednowymiarowe rzutowanie jest wystarczające w przypadku: osiowo zdeformowanych jąder, dla których rzut momentu pędu na z -ową oś w układzie wewnętrznym jest dobrą liczbą kwantową.⁹ W przypadku przestrzeni izospinowej

⁹W praktyce jednak, szczególnie w przypadku późniejszego korelowania układu wzbudzeniami typu cząstka-dziura, które nierzadko deformują się w kierunku trójosiowym, lepiej stosować procedurę rzutowania trójwymiarowego.

rzutowanie w jednym wymiarze aplikowane jest do metod zachowujących liczbę cząstek oraz przy oddziaływaniach nieuwzględniających kanału mieszania protonów z neutronami.

§7. Przywracanie symetrii izospinowej metodą rzutowania

Przedstawione powyżej postępowanie można zaaplikować do przywracania symetrii izospinowej. W niniejszej pracy do obliczeń strukturalnych wykorzystuje się teorię bazującą na polu średnim Hartree’ego–Focka. Wówczas, ze względu na dobrze określoną liczbę cząstek przez wyznacznik Slatera procedura rzutowania na określony izospin może zostać ograniczona do rzutowania w jednym wymiarze. W programie HFODD rzutowanie na moment pędu i na izospin wykonywane jest jednocześnie. Uwzględnienie rzutowania na izospin uzupełnia stany (3.63) o dobrze określony izospin oraz jego rzut na oś Oz w izoprzestrzeni :

$$|\Phi; IM; TT_z\rangle = \sum_K a_K^{IT} \hat{P}_{T_z T_z}^T \hat{P}_{MK}^I |\Phi\rangle, \quad (3.76)$$

gdzie, na podstawie relacji (3.66), operator rzutowy:

$$\hat{P}_{T_z T_z}^T = \frac{2T+1}{2} \int_0^\pi d\beta_T \sin \beta_T d_{T_z T_z}^T(\beta_T) \hat{\mathcal{R}}(\beta_T) \quad (3.77)$$

jest operatorem idempotentnym oraz hermitowskim. Spełnia on zatem wymogi operatora rzutowego w sensie matematycznym. Powyższy operator w działaniu na stan ze złamano symetrią izospinową usuwa z niego wszelkie (również te generowane przez efekty jawnego naruszenia symetrii izospinowej) domieszki:

$$\hat{P}_{T_z T_z}^T |\Phi\rangle \equiv \hat{P}_{T_z T_z}^T \sum_{T'} b_{T' T_z} |\Phi; T' T_z\rangle = b_{T T_z} |\Phi; T T_z\rangle. \quad (3.78)$$

Operator obrotu w izoprzestrzeni występujący we wzorze (3.77) jest, w analogii do (3.58), postaci:

$$\hat{\mathcal{R}}(\beta_T) = e^{i\beta_T \hat{T}_y}. \quad (3.79)$$

Współczynniki a_K^{IT} wyznaczałoby się w zasadzie identycznie jak w przypadku przywracania jedynie symetrii rotacyjnej. Rzutowanie jednowymiarowe nie wymaga bowiem wprowadzenia dodatkowej liczby kwantowej. Należy jednak pamiętać, że symetria izospinowa łamana jest zarówno spontanicznie jak i jawnie. Wobec czego stany wyrzutowane (3.76) nie reprezentują układu kwantowego z prawidłowo opisaną symetrią izospinową. Aby uchwycić *fizyczne* łamanie symetrii należy wyznaczyć współczynniki b_{iT}^I rozkładu

$$|\Phi; IM; T_z\rangle^{(n)} = \sum_{i; T \geq |T_z|} b_{iT}^I |\Phi; IM; T T_z\rangle^{(i)}, \quad (3.80)$$

redagonalizując pełen hamiltonian w przestrzeni kolektywnej [77, 149]. Indeks i w powyższej równości numeruje stany naturalne, a indeks n kolejne stany z prawidłowo opisaną symetrią izospinową uporządkowane wraz z rosnącą energią. Współczynnik

$$\alpha_{\text{ISB}} = 1 - \sum_i |b_{iT=|T_z|}^I|^2 = \sum_{i; T > |T_z|} |b_{iT}^I|^2 \quad (3.81)$$

nazywany jest współczynnikiem zmieszania izospinowego i stanowi miarę łamania symetrii izospinowej w jądrze.

Rediagonalizacja hamiltonianu wymaga znajomości elementów macierzowych w stanach (3.76). Do wyznaczenia tych kerneli przydatne jest rozdzielenie hamiltonianu na część izoskalarną, izowektorową oraz izotensorową:

$$\hat{H} = T + \hat{V}_S + \hat{V}_C \equiv T + \hat{V}_S^{T=0} + \hat{V}_S^{T=1} + \hat{V}_S^{T=2} + \hat{V}_C^{T=0} + \hat{V}_C^{T=1} + \hat{V}_C^{T=2} \quad (3.82)$$

Cały hamiltonian jest niezmienniczy ze względu na obrót w przestrzeni. W izoprzestrzeni natomiast niezmienniczy jest jedynie kanał izoskalarny oddziaływania, do którego należą: energia kinetyczna¹⁰, standardowa część oddziaływania Skyrme'a (3.17) oraz część izoskalarna oddziaływania Coulomba. Na podstawie twierdzenia Wicka (3.69) otrzymujemy natychmiast kernele energii kinetycznej:

$$\mathcal{T} = \mathcal{N}(\Omega, \beta_T) \frac{\hbar^2}{2m} \left(1 - \frac{1}{A}\right) \int d\mathbf{r} \tau_0(\mathbf{r}, \Omega, \beta_T) \quad (3.83)$$

i oddziaływania Skyrme'a:

$$\mathcal{V}_S^{T=0} = \mathcal{N}(\Omega, \beta_T) \sum_{t=0,1} \int d\mathbf{r} [\mathcal{H}_t^{even}(\mathbf{r}, \Omega, \beta_T) + \mathcal{H}_t^{odd}(\mathbf{r}, \Omega, \beta_T)] \quad (3.84)$$

przy czym gęstości hamiltonianu wyrażają się identycznie jak w (3.37), (3.38), z tą różnicą, że gęstości składowe są gęstościami przejściowymi.

Większą trudność stanowi wyznaczenie elementów niediagonalnych, bowiem hamiltonian w kanale izowektorowym, czy też izotensorowym nie komutuje z operatorem rzutowym $\hat{P}_{T_z T_z}^T$. Dla uproszczenia notacji dalsze rachunki przeprowadzamy, rzutując jedynie na określony izospin, co możemy bezpiecznie przeprowadzić ze względu na symetrię hamiltonianu w przestrzeni.

W celu wyznaczenia niediagonalnych elementów macierzowych hamiltonianu

$$H_{TT'} = \frac{\langle \Phi | \hat{P}_{T_z T_z}^T \hat{H} \hat{P}_{T_z T_z}^{T'} | \Phi \rangle}{b_{TT_z}^* b_{T'T_z}} \quad (3.85)$$

przekomutujemy operator rzutowy stojący z lewej strony z hamiltonianem, wykorzystując fakt, że jest on sumą tensorów sferycznych w izoprzestrzeni. Wykorzystamy przy tym relację [19]:

$$\hat{P}_{K_f M_f}^{T_f} \hat{T}_{\lambda \mu} \hat{P}_{M_i K_i}^{T_i} = C_{T_i M_i \lambda \mu}^{T_f M_f} \sum_{M_{\mu'}} C_{T_i M \lambda \mu'}^{T_f K_f} \hat{T}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{M K_i}^{T_i}. \quad (3.86)$$

Elementy macierzowe oddziaływania Coulomba zostały wyznaczone w pracy [150] i zaimplementowane w kodzie HFODD. W niniejszej pracy skupimy się zatem na izowektorowej części oddziaływania Skyrme'a. Izotensorowe oddziaływanie mieszające protony z neutronami łamie symetrię liczby cząstek. Jak wspomnieliśmy wcześniej przywrócenie symetrii izospinowej w takiej sytuacji wymagałoby rzutowania trójwymiarowego, co wychodzi poza ramy tej rozprawy i stanowi wyzwanie w dalszej perspektywie badania efektów łamania

¹⁰W hamiltonianie Skyrme'a przyjmuje się równe masy protonu i neutronu.

symetrii izospinowej.

Na podstawie relacji (3.85) oraz (3.86) element macierzowy oddziaływania $V_S^{T=1}$ wynosi:

$$\langle \Phi; TT_z | \hat{V}_S^{T=1} | \Phi; T'T_z \rangle = \frac{C_{T'T_z 10}^{TT_z}}{b_{TT_z}^* b_{T'T_z}} \sum_{M_\mu} C_{T'M_\mu 1\mu}^{TT_z} \langle \Phi | \hat{V}_S^{1\mu} \hat{P}_{MT_z}^{T'} | \Phi \rangle. \quad (3.87)$$

Korzystając ze wzoru na trójwymiarowy operator rzutowy (3.62) zaaplikowany do izoprzestrzeni, otrzymujemy dalej, że:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \hat{V}_S^{T=1} \hat{P}_{MT_z}^{T'} | \Phi \rangle &= \\ &= \frac{2T' + 1}{4\pi} \int d\alpha_T d\beta_T \sin \beta_T e^{i\alpha_T M} d_{MT_z}^{T'}(\beta_T) \langle \Phi | \hat{V}_S^{1\mu} e^{-\alpha_T \hat{T}_z} \hat{\mathcal{R}}(\beta_T) | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Przekomutowanie operatora oddziaływania z eksponentem pozwoli na uproszczenie powyższej całki do jednowymiarowej całki po β_T . Na podstawie wzoru (1.28) oraz własności funkcji d - oraz D -Wignera:

$$\hat{V}_S^{1\mu} e^{-i\alpha \hat{T}_z} = e^{-i\alpha(\hat{T}_z - \mu)} \hat{V}_S^{1\mu}, \quad (3.89)$$

co pozwala zapisać wyrażenie (3.87) w postaci:

$$\begin{aligned} \langle \Phi; TT_z | V_S^{10} | \Phi; T'T_z \rangle &= \\ &= \frac{C_{T'T_z 10}^{TT_z}}{b_{TT_z}^* b_{T'T_z}} \frac{2T' + 1}{2} \sum_{\mu=-1}^1 C_{T'T_z - \mu 1\mu}^{TT_z} \int_0^\pi d\beta_T \sin \beta_T d_{T_z - \mu T_z}^{T'}(\beta_T) \langle \Phi | \hat{V}_S^{1\mu} \hat{\mathcal{R}}(\beta_T) | \Phi \rangle, \end{aligned} \quad (3.90)$$

gdzie kernel oddziaływania klasy III w wiodącym rzędzie ¹¹

$$\langle \Phi | \hat{V}_S^{1\mu} \hat{\mathcal{R}}(\beta_T) | \Phi \rangle = t_0^{\text{III}} \mathcal{N}(\beta_T) \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \mathcal{V}_S^{1\mu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.91)$$

oblicza się na podstawie uogólnionego twierdzenia Wicka (3.70):

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_S^{10}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= -\tilde{\rho}_{00}(\vec{r}_1) \tilde{\rho}_{10}(\vec{r}_2) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\rho}_{00}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \tilde{\rho}_{10}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \tilde{s}_{00}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \tilde{s}_{10}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\} \end{aligned} \quad (3.92)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_S^{1\pm 1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \tilde{\rho}_{00}(\vec{r}_1) \tilde{\rho}_{1\mp 1}(\vec{r}_2) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\rho}_{00}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \tilde{\rho}_{1\mp 1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \tilde{s}_{00}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \tilde{s}_{1\mp 1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\} \end{aligned} \quad (3.93)$$

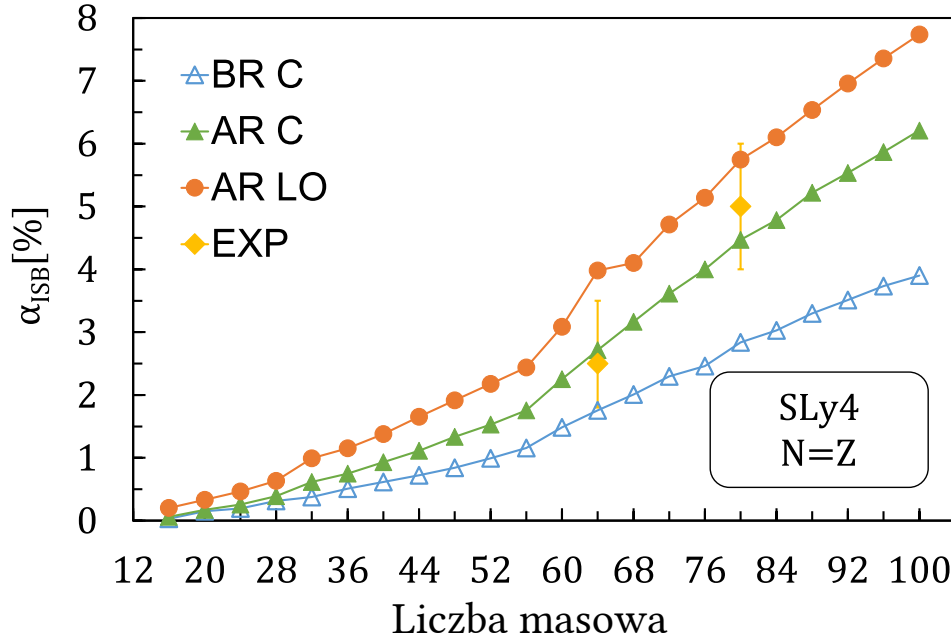
Element macierzowy upraszcza się po odcałkowaniu delty Diraca z powyższymi kernelami otrzymując:

$$\langle \Phi | \hat{V}_S^{10} \hat{\mathcal{R}}(\beta_T) | \Phi \rangle = -\frac{1}{2} t_0^{\text{III}} \mathcal{N}(\beta) \int d\vec{r} \left(-\tilde{\rho}_{00}(\vec{r}) \tilde{\rho}_{10}(\vec{r}) + \tilde{s}_{00}(\vec{r}) \tilde{s}_{10}(\vec{r}) \right) \quad (3.94)$$

$$\langle \Phi | \hat{V}_S^{1\pm 1} \hat{\mathcal{R}}(\beta) | \Phi \rangle = -\frac{1}{2} t_0^{\text{III}} \mathcal{N}(\beta) \int d\vec{r} \left(\tilde{\rho}_{00}(\vec{r}) \tilde{\rho}_{1\mp 1}(\vec{r}) - \tilde{s}_{00}(\vec{r}) \tilde{s}_{1\mp 1}(\vec{r}) \right) \quad (3.95)$$

¹¹Analogiczne wyprowadzenie można przedstawić dla kolejnego rzędu rozwinięcia – NLO

Powyższe elementy macierzowe należy wstawić do sumy (3.90) i dalej przeprowadzić całkowanie numeryczne po kącie β_T przy użyciu kwadratur Gaussa-Legendre'a.



Rys. 3.4: Współczynnik zmieszania izospinowego α_{ISB} obliczony w jądrach parzysto-parzystych o $N = Z$ przed rediagonalizacją (BR) i po rediagonalizacji (AR). W obliczeniach użyto funkcjonału SLy4. Niebieska i zielona krzywa to rachunki, w których za *fizyczne* łamanie symetrii izospinowej odpowiada oddziaływanie Coulomba. Pomarańczowe punkty przedstawiają rachunki z uwzględnieniem oddziaływania klasy III w wiodącym rzędzie LO. Rombami oznaczono wyniki eksperymentalne w przypadku jąder ^{64}Ge [151] oraz ^{80}Zr [152].

Na Rys. 3.4 przedstawiono wyniki obliczeń współczynnika zmieszania izospinowego α_{ISB} (3.81) dla jąder parzysto-parzystych o $N = Z$. Obliczenia przeprowadzono, używając jednowymiarowego rzutowania na izospin bez rzutowania na moment pędu, co umożliwiło wykorzystanie w rachunkach funkcjonału zależnego od gęstości SLy4. Jak pokazano w [149] przywrócenie jedynie symetrii izospinowej wolne jest od biegunów w kernelu hamiltonianu. Porównanie niebieskiej i zielonej krzywej reprezentujących kolejno współczynnik zmieszania izospinowego przed i po rediagonalizacji pokazuje, że efekt niefizycznego łamania symetrii izospinowej przez pole średnie nie jest zaniedbywalny. Dla wariantu obliczeń uwzględniającego wyłącznie oddziaływanie coulombowskie jako źródło naruszenia symetrii izospinowej redukuje on współczynnik α_{ISB} o około 30%, w stosunku do wkładu od oddziaływania Coulomba.

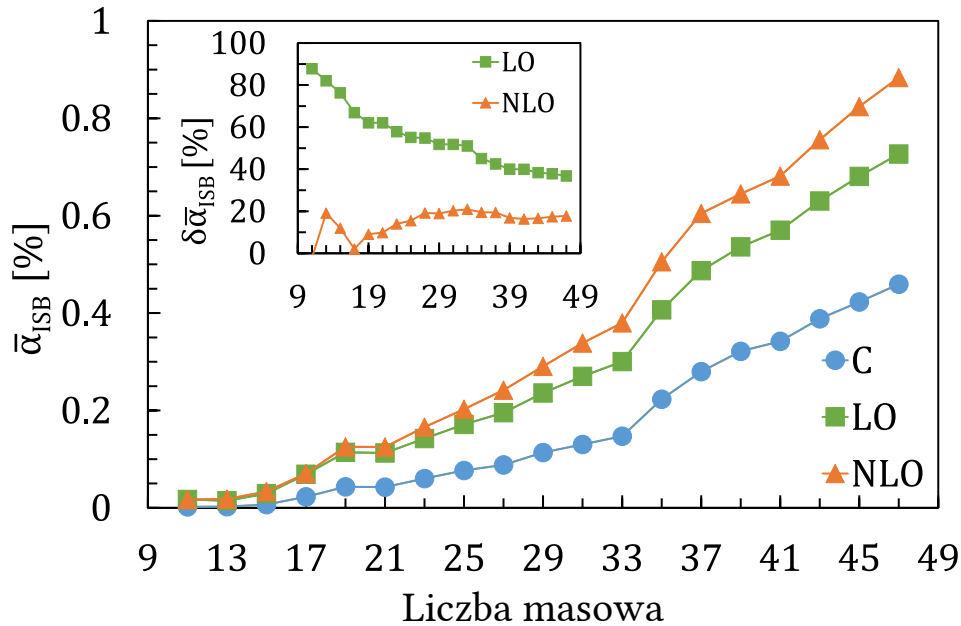
Pomarańczowa krzywa przedstawia współczynnik α_{ISB} obliczony z uwzględnieniem oddziaływania kontaktowego klasy III w wiodącym rzędzie (LO) dopasowanej do wartości MDE obliczanych w modelu pola średniego. W przypadku oddziaływania SLy4 stała sprzężenia wynosi $t_0^{\text{III}} = -5.5 \text{ MeV fm}^3$ [9]. Uwzględnienie tak zdefiniowanego oddziaływania kontaktowego w kanale izowektorowym powoduje zaskakująco duży wzrost parametru zmieszania α_{ISB} w porównaniu z obliczeniami biorącymi pod uwagę wyłącznie oddziaływanie coulombowskie. Rachunki są jednak nadal zgodne ze znanymi dwoma przypadkami

eksperymentalnymi w zakresie 1σ .

Dopasowane w modelu pola średniego parametry izowektorowej części hamiltonianu Skyrme'a zawierają *niefizyczne* efekty związane ze spontanicznym złamaniem symetrii izospinowej. W związku z faktem, iż wzrost współczynnika zmieszania ze względu na uwzględnienie klasy III wynosi od 70% dla bardzo lekkich jąder do 20% dla ^{100}Sn , *niefizyczne* efekty mieszania izospinowego mogą być istotne. W pełni właściwe przywrócenie symetrii izospinowej, wymaga dopasowania parametrów do wartości MDE otrzymanych po rediagonalizacji hamiltonianu w przestrzeni kolektywnej i zostanie przeprowadzone w rozdziale 4 paragraf 1.

Dane doświadczalne dotyczące α_{ISB} uzyskane w przypadku jądra ^{64}Ge $\alpha_{\text{ISB}} = 2.5^{+1}_{-0.7}\%$ z izospinowo wzbronionych przejść E1 [151] oraz z gigantycznego rezonansu dipolowego w jądrze ^{80}Zr [152] $\alpha_{\text{ISB}} = 5 \pm 1\%$ oznaczone na wykresie 3.4 żółtymi rombami są w dobrej zgodności z przedstawionymi rachunkami po rediagonalizacji.

W jądrach $N = Z$ efekty łamania symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne mają podłoże zarówno w kanale izowektorowym jak i izotensorowym. Z tego względu *a priori* nie wiadomo jaki finalny wpływ na współczynnik zmieszania α_{ISB} mają człony łamiące izospin w efektywnym oddziaływaniu silnym.



Rys. 3.5: Uśredniony współczynnik zmieszania izospinowego $\bar{\alpha}_{\text{ISB}}$ (3.96) obliczony w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$. Obliczenia wykonano w modelu z przywróconymi symetriami rotacyjną i izospinową wykorzystując funkcjonal SV_{SO}. Niebieska krzywa (C) uwzględnia tylko oddziaływanie Coulomba. Krzywe zielona i pomarańczowa uwzględniają dodatkowo oddziaływanie kontaktowe klasy III w rzędzie wiodącym (LO) i kolejnym po wiodącym (NLO).

W przypadku jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ wpływ siły izotensorowej jest zaniedbywalny, co pokazano w pracy [9]. Wówczas siła kontaktowa klasy III oraz oddziaływanie

Coulomba wydają się wyczerpywać źródła łamania symetrii izospinowej. Na Rys. 3.5 przedstawiono uśredniony współczynnik zmieszania izospinowego:

$$\bar{\alpha}_{\text{ISB}} = \frac{\alpha_{\text{ISB}}^{T_z=1} + \alpha_{\text{ISB}}^{T_z=-1}}{2} \quad (3.96)$$

obliczony dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 47$ w wariancie, w którym symetria izospinowa łamana jest przez oddziaływanie coulombowskie (C), oraz oddziaływanie coulombowskie wraz z kontaktową siłą klasy III w rzędzie wiodącym (LO) oraz w kolejnym rzędzie rozwinięcia (NLO). Wszystkie obliczenia dotyczą współczynnika zmieszania izospinowego po rediagonalizacji (3.81). W rachunkach użyto parametryzacji SV_{SO} z parametrami ISB dopasowanymi na poziomie modelu pola średniego do eksperymentalnych wartości MDE dla jąder $T = 1$ $A = 6 - 58$ oraz $T = 1/2$ $A = 7 - 75$, patrz wzory (3.55) oraz (3.56) .

Na wykresie obserwujemy wzrost współczynnika α_{ISB} wraz z dodaniem członów klasy III podobnie jak to miało miejsce w przypadku jąder $N = Z$ przedstawionych na Rys. 3.4. Znaczny wpływ izowektorowej części oddziaływania silnego na α_{ISB} jest niezależny od oddziaływania Skyrme’a używanego w obliczeniach. Dla lekkich jąder względna różnica pomiędzy rachunkami uwzględniającymi oddziaływanie klasy III α_{LO} , a obliczeniami uwzględniającymi wyłącznie oddziaływanie coulombowskie α_{COU} :

$$\delta\bar{\alpha}_{\text{ISB}} = \frac{\bar{\alpha}_{\text{LO}} - \bar{\alpha}_{\text{COU}}}{\bar{\alpha}_{\text{LO}}} \quad (3.97)$$

wynosi nawet 90% i spada z liczbą masową do 40% dla cięższych jąder z powłoki pf . Rachunki w rzędzie NLO dają dodatkowy wkład do α_{ISB} ale znacznie mniejszy od rzędu wiodącego, co jest charakterystyczne dla zbieżnej teorii efektywnej.

§8. Model mieszania konfiguracji DFT-NCCI

Brak zewnętrznego potencjału wiążącego jądra atomowe powoduje konieczność opisu jądra w języku wewnętrznych, a nie laboratoryjnych, gęstości. Takie podejście prowadzi z kolei do spontanicznego łamania symetrii hamiltonianu jądrowego, w szczególności symetrii obrotowej oraz izospinowej. Wynikowa funkcja falowa nie ma zatem dobrze określonych liczb kwantowych, co stanowi poważny problem w pełni kwantowomechanicznych obliczeniach dotyczących poziomów wzbudzonych, elementów macierzowych przejść elektromagnetycznych między nimi oraz przejść beta. Takie rachunki są możliwe po przywróceniu złamanych symetrii. W teorii jądrowego funkcjonału gęstości, aby nie korzystać z metod przybliżonych i uniknąć bardzo czasochłonnych obliczeń numerycznych, przywrócenie złamanych symetrii dokonuje się przy użyciu uogólnionego twierdzenia Wicka (3.69) oraz (3.70). Zastosowanie tego twierdzenia wymaga przeformułowania opisu układu kwantowego. W tym celu używa się gęstości przejściowych (3.73). Od tego momentu teorię funkcjonału gęstości nazywamy wieloreferencyjną (MR DFT), podobnie sam funkcjonal gęstości (MR EDF). Niestety okazuje się, że tak zdefiniowany funkcjonal, na ogół, wykazuje osobliwości związane z członem jawnie zależnym od gęstości w generujących go oddziaływaniach [115, 116, 117, 118, 119]. Wówczas uzyskanie stabilności wymaga przeprowadzenia procedury regularizacyjnej. Jak dotąd jednak próby regularyzacji nie przyniosły satysfakcjonującego rozwiązania problemu występujących biegunów [153]. Wykorzystanie funkcjonałów niegenerujących osobliwości stanowi obejście tego problemu. W tej pracy,

zgodnie z dyskusją przedstawioną w paragrafie 4 tego rozdziału, wykorzystamy niezależną od gęstości siłę Skyrme’a $SV_{T,SO}$ z powiększoną względem pierwotnej parametryzacji SV siłą oddziaływania spin-orbita oraz z włączonym oddziaływaniem tensorowym. Cena jaką za to płacimy jest wysoka. Siła SV ma znacznie gorsze własności spektroskopowe niż nowoczesne, zależne od gęstości, parametryzacje sił Skyrma’a. Nie pozwala ona także na uwzględnienie korelacji par na poziomie pola średniego.

Używany w niniejszej pracy model oparty jest o teorię MR DFT, w ramach której przywraca się złamane symetrie zarówno rotacyjną jak i izospinową. Takie unikalne podejście pozwala na bardzo precyzyjne wyznaczanie elementów macierzowych przejść beta [2, 3, 6, 77, 149, 154]. W konsekwencji umożliwia skonfrontowanie po raz pierwszy wyników modelu bazującego na jądrowym funkcjonałe gęstości z wieloma bardzo ciekawymi problemami w fizyce jądrowej. W szczególności do takich należą badania nad unitarnością macierzy CKM [1, 6, 154], ale również efekt redukcji stałej sprzężenia prądów osiowo-wektorowych w środowisku jądrowym [3].

Wieloreferencyjny model funkcjonału gęstości aplikowany do stanów podstawowych jąder można dalej rozszerzyć do modelu uwzględniającego korelacje pochodzące od innych samozgodnie wyznaczonych wyznaczników Slatera w szczególności reprezentujących stany wzbudzone. Technicznie, mieszanie konfiguracji dokonuje się w analogii do modelu współrzędnej generującej (GCM) mieszającej stany z przywróconymi symetriami, z tą różnicą, że w przypadku rozszerzenia metody MR DFT w obecnej wersji przestrzeń konfiguracyjna jest dyskretna.

W chemii kwantowej opartej o modele bazujące na teorii DFT taka metoda popularnie zwana jest metodą oddziaływania konfiguracji CI. W fizyce jądrowej natomiast, w ślad za odkryciem struktury powłokowej jądra przez Marię Goeppert-Mayer metoda CI otrzymała ogólną nazwę jądrowego modelu powłokowego [79]. Zasadniczą różnicą pomiędzy naszym rozszerzeniem metody MR DFT a modelem powłokowym jest przestrzeń modelowa. W tym drugim podejściu stosuje się tzw. przybliżenie rdzenia nieobecne w rachunkach DFT. Mając na uwadze powyższe model mieszania konfiguracji oparty o teorię funkcjonału gęstości nazwalibyśmy bezrdzeniowym modelem oddziaływania konfiguracji DFT-NCCI (DFT-rooted No-Core Configuration-Interaction) [6].

8.1 Formalizm oraz przestrzeń konfiguracyjna w modelu DFT-NCCI

Obliczenia w modelu DFT-NCCI przebiegają zgodnie z poniższą procedurą:

1. W pierwszej kolejności w modelu pola średniego wyznacza się tzw. przestrzeń konfiguracyjną, którą stanowi zbiór samozgodnych rozwiązań Hartree’ego-Focka (konfiguracji) $\{\varphi_i\}$ reprezentujących stan podstawowy oraz istotne z punktu widzenia fizyki rozpatrywanego problemu, niskoleżące wzbudzenia typu 1p1h, 2p2h itd. Konfiguracje obliczamy wykorzystując oddziaływanie Skyrme’a z parametryzacją SV_T lub też jednym z jej wariantów omawianych wcześniej jak $SV_{T,SO}$, $SV_{T,SO}^{ISB}$.
2. Następnie, z każdej z konfiguracji $\{\varphi_i\}$ wyrzutujemy stany o określonym izospinie T, T_z , momencie pędu I, M oraz jego rzucie na trzecią oś w układzie wewnętrznym

$K - \{\Psi_{TIK}^{(i)}\}$. Dla uproszczenia notacji pomijamy zachowane liczby kwantowe T_z i M .

3. Prawidłowe przywrócenie obu symetrii wymaga zmieszania stanów $\{\Psi_{TIK}^{(i)}\}$, tak aby uwzględnić mieszanie K oraz fizyczne łamanie symetrii izospinowej. Dokonujemy tego w obrębie każdej konfiguracji z osobna uzyskując stany $\{\Psi_{j\tilde{T}I}^{(i)}\}$ (3.82) o określonym momencie pędu I i przybliżonym izospinie $\tilde{T}$. Wskaźnik j numeruje kolejne rozwiązania o tych samych I i $\tilde{T}$ w obrębie ustalonej konfiguracji i – jego zakres zależy zatem od i . W metodzie DFT-NCCI przestrzeń rozpiętą przez te stany będziemy nazywać przestrzenią modelu.¹²
4. Stany i energie własne w metodzie DFT-NCCI otrzymuje się przez zmieszanie wszystkich stanów z przestrzeni modelu tj. stanów otrzymanych w kroku 3 $\{\Psi_{j\tilde{T}I}^{(i)}\}$.

O ile kroki 1-3 zostały szczegółowo omówione w poprzednich paragrafach, tak ostatni – 4 etap, polegający na wyznaczeniu stanów DFT-NCCI, wymaga dodatkowego komentarza.

Mieszanie konfiguracji w metodzie DFT-NCCI przebiega podobnie jak mieszanie liczby kwantowej K omówione w paragrafie 6 tego rozdziału. Stany własne w metodzie DFT-NCCI wyznaczone są przez rozwiązanie równania Hilla-Wheelera:

$$\mathcal{H}\Psi_{IM;T_z}^{(n)} = E_i \mathcal{N}\Psi_{IM;T_z}^{(n)}. \quad (3.98)$$

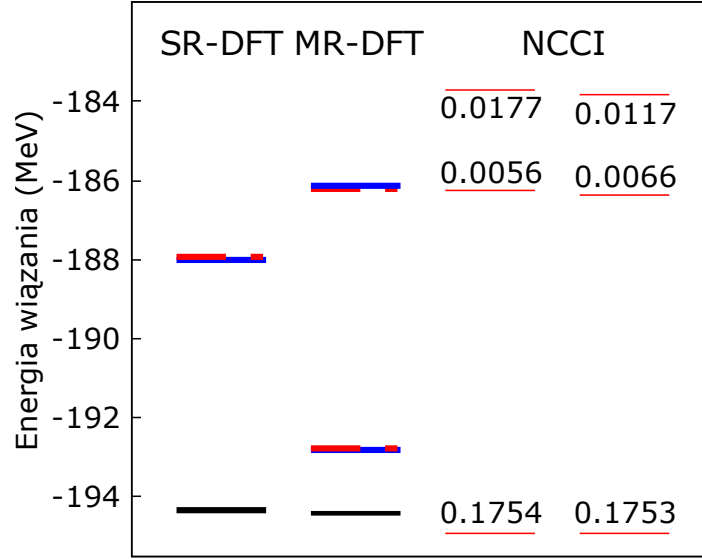
w przestrzeni kolektywnej rozpiętej przez stany naturalne skonstruowane z wektorów własnych macierzy norm $\mathcal{N}$ o niezerowych wartościach własnych $n_m > 0$, w praktyce o $n_m > \epsilon$ tj. o wartościach własnych większych niż zadany z zewnątrz parametr ϵ . W wyniku diagonalizacji otrzymuje się stany DFT-NCCI postaci:

$$|IM;T_z\rangle^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{N_{IM;T_z}^{(n)}}} \sum_{ij} \eta_{ij}^{(n)} |\varphi_i; IM; \tilde{T}T_z\rangle^{(j)} \quad (3.99)$$

gdzie stany $|\varphi_i; IM; \tilde{T}T_z\rangle^{(j)}$ są stanami przestrzeni modelowej, a $N_{IM;T_z}^{(n)}$ jest normą stanu DFT-NCCI. Sumowanie w powyższej równości przebiega po wszystkich i dostępnych konfiguracjach oraz po indeksie j . Indeks n numeruje stany końcowe do pewnego zadanego $n'_{\max}$ wyznaczającego wymiar przestrzeni kolektywnej. Procedura DFT-NCCI dostępna jest w najnowszych, jeszcze nieopublikowanych wersjach kodu HFODD – w wersjach 284 i nowszych. Należy podkreślić, że w obecnej wersji kodu do rozwiązania rów. (3.98) używamy tego samego hamiltonianu, którego użyliśmy do wyznaczania konfiguracji w kroku 1. Wymaganie to można jednak zrelaksować i użyć innego hamiltonianu do mieszania konfiguracji.

W przeciwieństwie do modelu powłokowego, przestrzeń konfiguracyjna w modelu DFT-NCCI nie jest ustalona z góry. Buduje się ją przez dodawanie, krok po kroku, istotnych z punktu widzenia fizyki rozważanego zagadnienia, niskoleżących konfiguracji średniopolo- wych.

¹²W modelu MR DFT bez rozszerzenia teorii o mieszanie konfiguracji taką przestrzeń nazywamy przestrzenią kolektywną (3.75). Wprowadzamy taką nazwę, aby uniknąć konfuzji pojęć. Przestrzeń kolektywną w modelu DFT-NCCI otrzymuje się bowiem po przejściu kroku 4.



Rys. 3.6: Pierwsza kolumna z lewej strony pokazuje energie Hartree’ego-Focka wyznaczone w ramach przybliżenia pola średniego dla stanu podstawowego oraz najniżej leżącego wzbudzenia typu cząstka-dziura neutronu (czerwona, linia kreskowana) oraz protonu (niebieska, linia ciągła) w jądrze ^{24}Mg . W następnej kolumnie zaprezentowano wyrzutowane z tych konfiguracji energie stanów 4^+ w modelu MR DFT bez ich mieszania. Dwie ostatnie kolumny przedstawiają stany uzyskane w modelu DFT-NCCI z różnymi przestrzeniami konfiguracyjnymi – stan podstawowy oraz wzbudzenie neutronowe (kolumna 3) oraz dodane do nich wzbudzenie protonowe (kolumna 4). Liczby nad stanami oznaczają wartości elementu macierzowego Gamowa-Tellera dla przejścia $|^{24}\text{Al}; 4_1^+\rangle \rightarrow |^{24}\text{Mg}; 4_i^+\rangle$.

W jądrach parzysto-parzystych przestrzeń konfiguracyjna modelu DFT-NCCI zawiera stan podstawowy oraz niskoleżące uszeregowane ($|h\rangle \otimes |\tilde{p}\rangle$ lub $|\tilde{h}\rangle \otimes |p\rangle$) oraz antyuszeregowane ($|h\rangle \otimes |p\rangle$ lub $|\tilde{h}\rangle \otimes |\tilde{p}\rangle$) konfiguracje typu cząstka-dziura, gdzie $|p\rangle$ i $|\tilde{p}\rangle$ ($|h\rangle$ i $|\tilde{h}\rangle$) oznaczają stany ze wzbudzoną cząstką (dziurą) o przeciwnej sygnaturze p.(1.17). W przypadku jąder nieparzystych przestrzeń konfiguracyjną buduje się przez wzbudzenie w pierwszej kolejności niesparowanego nukleonu do kolejnych nieobsadzonych orbitali *niłso-nowskich*, a następnie niskoleżących konfiguracji z rozerwaną parą. Podobnie, przestrzeń budujemy w przypadku jąder nieparzysto-nieparzystych z tą różnicą, że wówczas należy uwzględnić zarówno konfiguracje uszeregowane, jak i antyuszeregowane.

Ze względu na podobieństwo między neutronowymi oraz protonowymi wzbudzeniami cząstka-dziura w jądrach $N = Z$ przestrzeń konfiguracyjną można zredukować o połowę pod warunkiem zastosowania rzutowania w izoprzestrzeni [2]. Ilustruje to schematyczny rachunek dotyczący jądra ^{24}Mg przedstawiony na Rys. 3.6. Obliczenia uwzględniają stan podstawowy oraz energetycznie najniższe wzbudzenie protonowe ($\pi p - \pi h$) oraz neutronowe ($\nu p - \nu h$) typu cząstka-dziura. Energie tych stanów wzbudzonych w modelu pola średniego różnią się zaledwie o 80 keV, patrz Rys. 3.6. Przy użyciu technik rzutowych na dobrze określony izospin oraz moment pędu ($I = 4^+$) w obrębie wyspecyfikowanych konfiguracji uzyskujemy stan $I = 4_1^+$ pochodzący od stanu podstawowego oraz cztery stany wzbudzone $I = 4^+$ przedstawione w drugiej kolumnie wykresu 3.6. Trzecia oraz czwarta kolumna przedstawia energie stanów $I = 4^+$ wyznaczone przy użyciu modelu DFT-NCCI.

W trzeciej kolumnie rachunek uwzględnia stan podstawowy oraz wzbudzenie neutronowe. Natomiast w czwartej przestrzeń konfiguracyjną rozszerzono o wzbudzenie protonowe. Dodanie wzbudzenia protonowego niemal wcale nie wpływa ani na energie stanów wzbudzonych, ani na element macierzy Gamowa-Tellera rozpadu $|^{24}\text{Al}; 4_1^+\rangle \rightarrow |^{24}\text{Mg}; 4_i^+\rangle$.

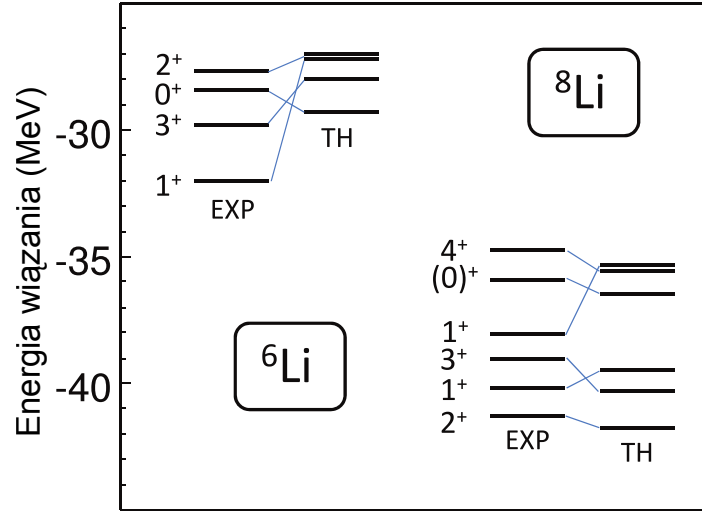
Wszystkie poziomy jednocząstkowe są wyznaczane w ramach teorii DFT i nazywamy je poziomami Kohna-Shama. Natomiast dla uproszczenia zarówno notacji jak i intuicji fizycznej do ich opisu wykorzystujemy sferyczne orbitale, lub, znacznie częściej, liczby kwantowe Nilssona. Z tego względu dalej w tekście poziomy Kohna-Shama nazywamy poziomami Nilssona. Należy jednak mieć świadomość, że jest to przybliżenie, szczególnie w przypadku słabo zdeformowanego układu.

8.2 Własności modelu DFT-NCCI

Model DFT-NCCI jest unikalnym narzędziem teoretycznym, łączącym cechy teorii jądrowego funkcjonału gęstości, z cechami modelu powłokowego bazującego na mieszaniu konfiguracji o dobrze określonych liczbach kwantowych. Taka metoda łączy zalety obu wspomnianych modeli, a w konsekwencji ma szanse na udzielanie odpowiedzi na pytania dotyczące energii stanów podstawowych, momentów kwadrupolowych czy promieni jądrowych jak również struktury stanów wzbudzonych, intensywności przejść elektromagnetycznych oraz przejść beta. Metoda DFT-NCCI ma również swoje wady. Podstawowym problemem są osobliwości występujące przy zastosowaniu uogólnionego twierdzenia Wicka do funkcjonałów generowanych przez oddziaływania zależne jawnie od gęstości. Kolejnym mankamentem jest nieuwzględnienie oddziaływania *pairingowego* na poziomie budowania przestrzeni konfiguracyjnej. Parametryzacja SV, czy też jej warianty mają ujemny współczynnik Landaua ($g_0 \approx -0.5$) opisujący natężenie oddziaływania związanego z kreacją par [122]. Wówczas zastosowanie metody HFB bez dodatkowego funkcjonału opisującego oddziaływanie *pairingowe* okazuje się być nieskuteczne [121]. W efekcie nie dostarcza do układu kwantowego korelacji związanych z tworzeniem się par. Rachunki przeprowadzone w tym krótkim podrozdziale służą przybliżeniu własności modelu DFT-NCCI oraz obnażeniu jego braków. Główne wnioski będą się przewijały w większości rachunków prezentowanych w niniejszej rozprawie. Dyskusję rozpoczniemy od bardzo lekkiego układu kwantowego ^6Li .

Przestrzeń konfiguracyjną dla nieparzysto-nieparzystego układu jakim jest ^6Li tworzymy zgodnie z przepisem opisanym w poprzedniej podsekcji, tworząc uszeregowane oraz antyuszeregowane wzbudzenia w obrębie stanów jednocząstkowych pochodzących ze sferycznej podpowłoki $p_{3/2}$. Przestrzeń można byłoby dalej wzbogacić również o wzbudzenia do stanów podpowłoki $p_{1/2}$, jednak są one położone znacznie wyżej w energii przez co nie powinny wpływać znacząco na widmoiskoenergetyczne. Wszystkie uwzględnione konfiguracje przedstawiono w tabeli 3.2. Poza czterema podstawowymi konfiguracjami znaleziono jeszcze konfigurację o kształcie *prolate*. Konfiguracja ta została uwzględniona w mieszaniu ze względu na jej niewielką energię wzbudzenia jedynie 0.5 MeV ponad stanem podstawowym oraz ze względu na uszeregowanie spinów cząstek walencyjnych $K = 1$. Wyrzutowane stany mają bowiem całkowity moment pędu $I \geq |K|$. Mogą zatem w sposób istotny wpływać na strukturę w tym jądrze.

Na wykresie 3.7 przedstawiono obliczenia w jądrze ^6Li oraz celem porównania w ją-



Rys. 3.7: Porównanie doświadczalnego i teoretycznego widma energetycznego w jądrach ${}^6\text{Li}$ po lewej oraz ${}^8\text{Li}$ po prawej stronie rysunku. Na wykresie podano nie-normalizowane, bezwzględne wartości energii.

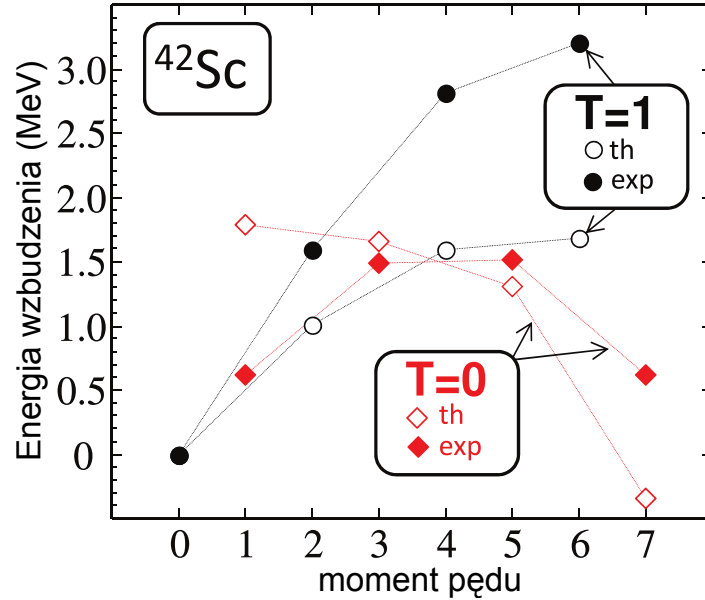
drze ${}^8\text{Li}$, gdzie uwzględniono podobnie jak w ${}^6\text{Li}$ jedynie najbardziej istotne konfiguracje. Szersza dyskusja przypadku ${}^8\text{Li}$ zostanie przeprowadzona przy okazji omawiania rozpadu Gamowa-Tellera jądra ${}^8\text{He}$, dlatego w tym miejscu ograniczymy się do podania jedynie szkicu struktury tego jądra. W przypadku jądra ${}^6\text{Li}$ teoria nie zgadza się z danymi doświadczalnymi zarówno ze względu na energię jak i uporządkowanie stanów wzbudzonych. Zaczniemy od przypadku multipletu $T = 0$ zbudowanego ze stanów 1^+ oraz 3^+ . Stan 1^+ jest stanem podstawowym z energią -31.995 MeV. W rachunkach natomiast jest położony znacznie wyżej niemal 5 MeV ponad eksperymentalnym stanem podstawowym, co stanowi błąd około 15% , a więc znacznie większy niż dla innych jąder leżących na linii $N = Z$.

Tabela 3.2: Przestrzeń konfiguracyjna w jądrze ${}^6\text{Li}$. Wyszczególniono w kolejności: energię Hartree’ego-Focka E_{HF} [MeV], parametr wydłużenia β_2 , parametr trójosiowości γ , neutronowe i protonowe wartości momentu pędu cząstek walencyjnych j_ν , j_π oraz ich orientację k w układzie wewnętrznym.

i	E_{HF}	β_2	γ	j_ν	j_π	k
1	-27.244	0.207	60°	1.50	1.50	Y
2	-26.846	0.090	60°	1.50	0.50	Y
3	-26.787	0.330	0°	0.50	0.50	Z
4	-26.510	0.216	60°	-1.50	1.50	Y
5	-25.972	0.008	0°	-0.50	1.50	Z

Co więcej stan 1^+ leży powyżej stanu $I = 3^+, T = 0$. Stan 3^+ jest odtwarzany przez model DFT-NCCI lepiej – różni się od wartości doświadczalnej o niecałe 2 MeV. Z tej dyskusji można wnioskować, że w modelu brakuje korelacji związanych z pairingiem izoskalarnym $I = 1, T = 0$ oraz, że model pola średniego faworyzuje maksymalnie uszeregowane stany $T = 0$.

W przypadku multipletu $T = 1$ składającego się ze stanów 0^+ oraz 2^+ , model DFT-NCCI przeszacowuje energię stanu 0^+ o 0.8 MeV i niedoszacowuje energię stanu 2^+ o 0.4 MeV. Poziom zgodności jest lepszy niż w przypadku multipletu izoskalarnego.



Rys. 3.8: Energie stanów wzbudzonych multipletów izowektrowego (kółka) oraz izoskalarnego (kwadraty) w jądrze ^{42}Sc względem energii stanu 0^+ . Wartości teoretyczne i doświadczalne oznaczono odpowiednio otwartymi i zamkniętymi symbolami.

Dodanie do układu dwóch neutronów, czyli przejście do ^8Li znacznie poprawia poziom zgodności obliczeń z danymi eksperymentalnymi. Konfiguracje użyte do obliczenia widma ^8Li zaprezentowanego na wykresie 3.7 są wyszczególnione w Tab. 5.2 w rozdziale 5. Zarówno energie wiązania jak i kolejność poziomów dobrze zgadzają się z danymi. Odstępstwem są stan 1_2^+ niedoszacowany o niemal 3 MeV oraz kolejność stanów 1_1^+ oraz 3_1^+ .

Podobne rachunki do tych przeprowadzonych w jądrze ^6Li wykonano dla ^{18}F oraz ^{42}Sc . Ze względu na większą ilość stanów w multipiecie $T = 0$ w późniejszej dyskusji skoncentrujemy się jedynie na przypadku jądra ^{42}Sc . W nomenklaturze modelu powłokowego ze względu na stosowanie przybliżenia rdzenia jądra ^6Li , ^{18}F oraz ^{42}Sc są układami dwuciałowymi. Z tego powodu służą do dopasowania izoskalarnych $T=0$ oraz izowektrowych $T=1$ elementów macierzowych. Naturalnie w przypadku modelu DFT-NCCI bazującego na teorii funkcjonału gęstości jądro ^{42}Sc jest układem 42 cząstek. Na podstawie wykresu 3.8 można wywnioskować, że:

- Tak jak w przypadku jądra ^6Li , tak w rachunkach w ^{42}Sc brakuje korelacji związanych z pairingiem izoskalarnym $T = 0, I = 1$. Energia wzbudzenia względem stanu $T = 1, I = 0$ jest około trzy razy większa w teorii niż w eksperymencie.
- Model faworyzuje stany izoskalarne z całkowitym uszeregowaniem spinów cząstek walencyjnych $T = 0, I_{\text{max}} = 7$, podobnie jak stan $T = 0, I_{\text{max}} = 3$ w jądrze ^6Li . W przypadku jądra ^{42}Sc maksymalnie uszeregowany stan z multipletu izoskalarnego jest w rachunkach teoretycznych stanem podstawowym.

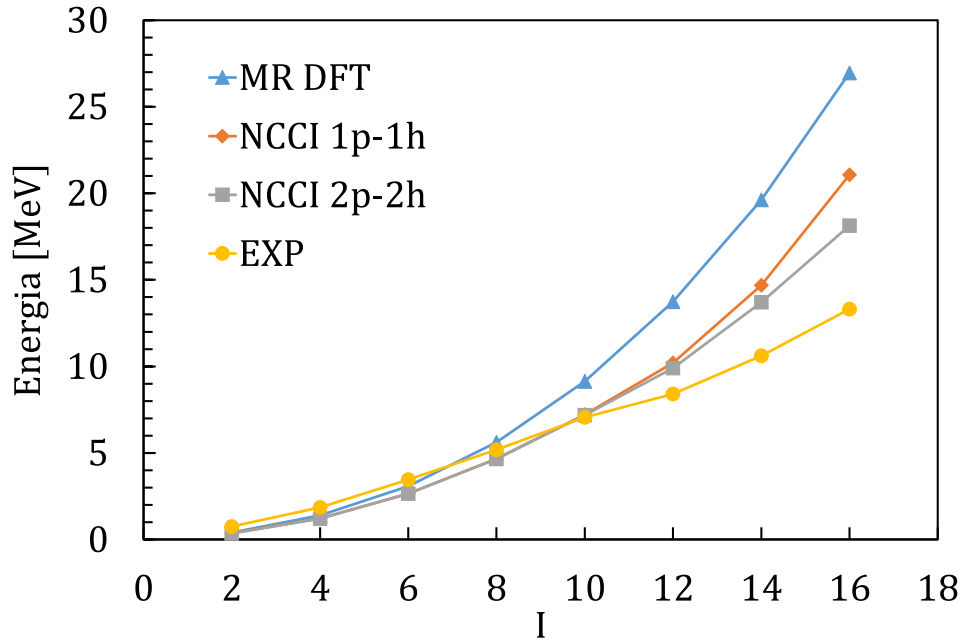
Tabela 3.3: Podobnie jak w Tab. 3.2, ale dla jądra ^{42}Sc . Wyszczególnione konfiguracje są zbudowane z obsadzeniem walencyjnych cząstek na poziomie $f_{7/2}$: $\nu f_{7/2} \otimes \pi f_{7/2}$ i są oznaczone przez liczbę kwantową K walencyjnych neutronu i protonu w układzie wewnętrznym: $|\nu; K_\nu\rangle \otimes |\pi; K_\pi\rangle$. Stany $i=1-4$ reprezentują konfiguracje antyuszeregowane, $K_\nu = -K_\pi$. Następnie wypisano konfiguracje uszeregowane $i=5-8$ $K_\nu = K_\pi$ oraz dwie pozostałe $i=9-10$ energetycznie niskoleżące antyuszeregowane z całkowitym $|K|=1$. W tabeli wyszczególniono energie Hartree’ego-Focka tych konfiguracji $\Delta E_{I=|K|}$ względem rozwiązania $|\nu; \frac{1}{2}\rangle \otimes |\pi; \frac{1}{2}\rangle$. Podano parametry deformacji β_2 oraz γ . W ostatniej kolumnie natomiast przedstawiono energię wzbudzenia najniższych stanów $I = |K|$ wyrzutowanych z danej konfiguracji.

i	$ ^{42}\text{Sc}; i\rangle$	ΔE_{HF}	β_2	γ	$\Delta E_{I= K }$
1	$ \nu; \frac{1}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{1}{2}\rangle$	0.000	0.063	0	0.000
2	$ \nu; \frac{3}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{3}{2}\rangle$	0.802	0.031	0	0.561
3	$ \nu; \frac{5}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{5}{2}\rangle$	0.986	0.008	60	0.551
4	$ \nu; \frac{7}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{7}{2}\rangle$	0.759	0.062	60	0.085
5	$ \nu; \frac{7}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{7}{2}\rangle$	-0.929	0.061	60	-0.647
6	$ \nu; \frac{5}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{5}{2}\rangle$	0.082	0.007	60	1.160
7	$ \nu; \frac{3}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{3}{2}\rangle$	0.345	0.032	0	1.594
8	$ \nu; \frac{1}{2}\rangle \otimes \pi; \frac{1}{2}\rangle$	0.340	0.060	0	1.719
9	$ \nu; \frac{3}{2}\rangle \otimes \pi; -\frac{1}{2}\rangle$	0.716	0.043	0	2.164
10	$ \nu; \frac{5}{2}\rangle \otimes \pi; -\frac{3}{2}\rangle$	0.986	0.011	0	2.338

- Energia stanów izowektorowych $\Delta E_{T=1} = E_{T=1, I=6} - E_{T=1, I=0}$ jest dwa razy mniejsza w rachunkach z modelem DFT-NCCI niż w eksperymencie. Jednocześnie zachowuje eksperymentalny trend multipletu. Przyczyną obserwowanej różnicy może być zarówno brak korelacji *pairingu* typu izowektorowego, jak i zbyt silne wiązanie stanów uszeregowanych w polu średnim.

W Tab. 3.3 wyszczególniono konfiguracje użyte w analizie struktury jądrowej w ^{42}Sc w ramach modelu DFT-NCCI.

Niedoskonałości modelu DFT-NCCI wynikają po części z używanej teorii średniopolewej – w naszym przypadku teorii Hartree’ego-Focka, a po części z oddziaływania generującego to pole średnie. Naturalnie, nie ma powodu, aby pasmo otrzymane w wyniku rzutowania ze stanu podstawowego, nawet w obecności funkcjonału energii o bardzo dobrych własnościach spektroskopowych, było dobrze odtwarzane. Stany o wyższym spinie pochodzą bowiem od nieznanych *a priori* wzbudzeń w obrębie jednocząstkowych orbitali *nilssonowskich* (Kohna-Shama). Warto zatem przeanalizować wpływ przestrzeni konfiguracyjnej użytej w modelu DFT-NCCI na pasmo rotacyjne. Bardzo dobrym przykładem relatywnie lekkiego jądra, w którym występuje potwierdzone doświadczalnie pasmo rotacyjne jest jądro ze środka powłoki $0f_{7/2} - ^{48}\text{Cr}$. Budowa przestrzeni konfiguracyjnej przebiega jak opisano w przepisie w poprzednim podrozdziale. Zbudowana jest ona ze stanu podstawowego, 8 wzbudzeń neutronowych typu cząstka-dziura oraz czterech wzbudzeń typu 2p2h gdzie ograniczyliśmy się jedynie do wzbudzeń typu *pairingowego*, a zatem



Rys. 3.9: Porównanie eksperymentalnego i teoretycznego pasma rotacyjnego w jądrze ^{48}Cr dla parzystych spinów od $I = 0$ do $I = 16$. Niebieskimi trójkątami oznaczono rachunek MR DFT, pomarańczowymi rombami obliczenia DFT-NCCI w przestrzeni konfiguracyjnej zbudowanej ze wzbudzeń cząstka-dziura, a szarymi kwadratami obliczenia DFT-NCCI w przestrzeni konfiguracyjnej uwzględniającej niskoleżące wzbudzenia 2p2h typu *pairing*. Wyniki obliczeń zestawiono z danymi doświadczalnymi oznaczonymi żółtymi kołami.

do rozproszenia dwóch neutronów do kolejnych orbitali jednocząstkowych bez rozrywania pary. Szczegóły zawiera tabela 3.4.

Na wykresie 3.9 przedstawiono pasmo rotacyjne w jądrze ^{48}Cr . Dla niskich spinów rachunki MR DFT oraz DFT-NCCI różnią się od 40 keV dla stanu $I = 2$ do 400 keV dla $I = 6$. Im większy spin stanu tym bardziej istotne okazują się być korelacje pochodzące od zmieszanych stanów wzbudzonych. Energie wzbudzenia tych stanów są dwukrotnie mniejsze w porównaniu z danymi eksperymentalnymi. Ten efekt obserwowaliśmy już wcześniej w przypadku multipletu izowektorowego w jądrze ^{42}Sc . Wynik w ^{48}Cr zdaje się zatem potwierdzać poprzednie wnioski. Dla wyższych spinów $I \geq 8$ rozszerzanie rachunków od MR DFT po DFT-NCCI ze wzbudzeniami 2p2h okazuje się być znacznie bardziej efektywne. Największą różnicę między rachunkami obserwuje się w stanie o maksymalnym spinie. W rachunkach MR DFT energia tego stanu wynosi 27 MeV. Zmieszanie konfiguracji w obrębie przestrzeni 1p1h obniża tę energię do 21 MeV, a przy uwzględnieniu wzbudzeń 2p2h do 18 MeV, zbliżając się jednocześnie do wartości eksperymentalnej 13.3 MeV. Naturalnie, aby odtworzyć górną część pasma rotacyjnego należałoby uwzględnić wzbudzenia wyższych rzędów z rozerwanymi parami, mające duży uszeregowany moment pędu. W szczególnym przypadku stanu krańcowego $I_{\text{max}} = 16$ kluczową rolę będzie odgrywać konfiguracja, w której rozerwane są wszystkie pary z całkowitym uszeregowaniem $K = 16$.

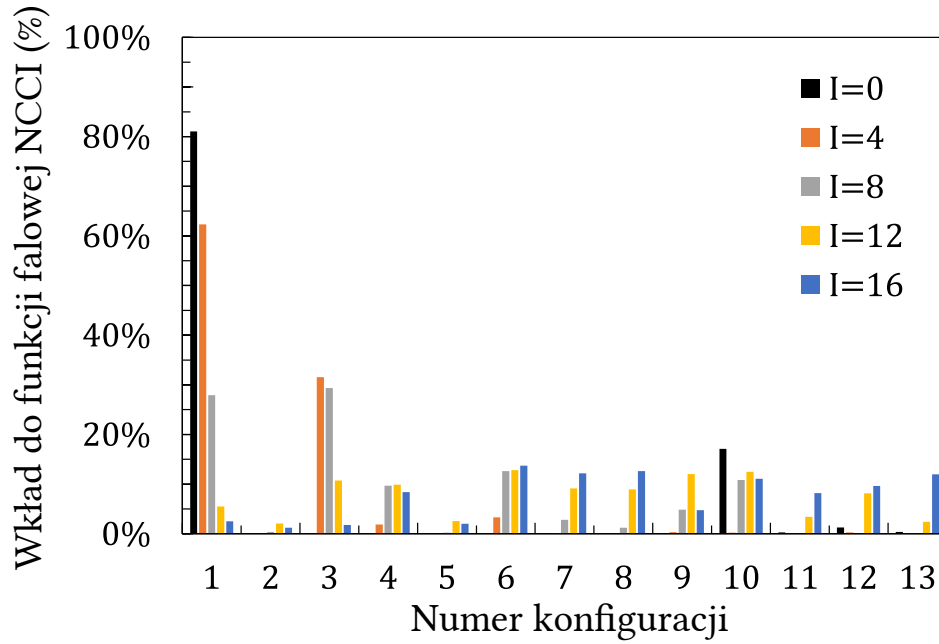
Podejście DFT-NCCI daje unikalną możliwość interpretacji poszczególnych stanów w języku intuicyjnych konfiguracji średniopolowych. Zawartość n -tej *hartree-fockowskiej*

Tabela 3.4: Samozgodne konfiguracje średniopolowe użyte do obliczeń w jądrze ^{48}Cr . Konfiguracje oznaczono liczbami kwantowymi Nilssona wraz z sygnaturą niesparowanej cząstki i dziury walencyjnej. Następne 3 kolumny zawierają informacje na temat własności poszczególnych konfiguracji: energia HF w MeV, deformację kwadrupolową przedstawioną przy użyciu parametru β_2 oraz całkowite uszeregowanie $\langle j \rangle$ wraz z orientacją w układzie wewnętrznym. Parametru γ nie wyszczególniono ze względu na osiową deformację wszystkich konfiguracji.

i	$ ^{48}\text{Cr}; \varphi_i\rangle$	E_{HF}	β_2	$\langle j \rangle$
1	st. podst.	-409.18	0.28	0_Z
2	$ \nu 321\ 3/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 +\rangle^1$	-405.10	0.24	4_Z
3	$ \nu 321\ 3/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 +\rangle^1$	-405.38	0.25	1_Z
4	$ \nu 321\ 3/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 +\rangle^1$	-403.49	0.21	2_Z
5	$ \nu 321\ 3/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 -\rangle^1$	-403.20	0.21	5_Z
6	$ \nu 330\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 -\rangle^1$	-402.47	0.20	2_Z
7	$ \nu 330\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 +\rangle^1$	-402.44	0.20	3_Z
8	$ \nu 330\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 +\rangle^1$	-400.37	0.17	4_Z
9	$ \nu 330\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 -\rangle^1$	-400.45	0.17	3_Z
10	$ \nu 321\ 3/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 -\rangle^1$ $\otimes \nu 321\ 3/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 +\rangle^1$	-402.18	0.21	0_Z
11	$ \nu 321\ 3/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 -\rangle^1$ $\otimes \nu 321\ 3/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 +\rangle^1$	-399.44	0.14	0_Z
12	$ \nu 321\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 -\rangle^1$ $\otimes \nu 321\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 312\ 5/2 +\rangle^1$	-399.32	0.14	0_Z
13	$ \nu 321\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 -\rangle^1$ $\otimes \nu 321\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 303\ 7/2 +\rangle^1$	-396.23	0.06	0_Z

konfiguracji w k -tym stanie modelu DFT-NCCI o danym I oraz T_z dana jest wyrażeniem:

$$\begin{aligned}
P(\varphi_n) &\equiv \sum_i |^{(i)}\langle \varphi_n; IM; T_z | \psi_{\text{NCCI}}^{k; IM; T_z} \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}_{IM; T_z}^{(k)}} \sum_i \left| \sum_{jl} c_{jl}^{(k)} |^{(i)}\langle \varphi_n; IM; T_z | \varphi_j; IM; T_z \rangle^{(l)} \right|^2.
\end{aligned} \tag{3.100}$$



Rys. 3.10: Procentowy wkład poszczególnych konfiguracji wymienionych enumeratywnie w tabeli 3.4 do stanów DFT-NCCI o $I = 0, 4, 8, 12$ oraz 16 w pasmie rotacyjnym jądra ^{48}Cr .

Na wykresie kolumnowym 3.10 przedstawiono wkłady procentowe poszczególnych średniopolewych konfiguracji do funkcji falowych opisujących co drugi stan pasma rotacyjnego. Widzimy od razu, że wkład konfiguracji stanu podstawowego do stanów o coraz wyższym spinie równomiernie spada od 81% dla stanu $I = 0$ do 2.5% dla stanu $I = 16$. Niemal 20% wkładu do stanu $I = 0$ pochodzi od konfiguracji nr 10 typu 2p2h, co nie wpływa jednak na zmianę energii tego stanu. Po uwzględnieniu tej konfiguracji jego energia obniża się zaledwie o 1keV. Z wykresu można odczytać, że stany o spinach $I = 0$, $I = 4$ mają dominującą składową reprezentowaną przez stan podstawowy. Dopiero od stanu o spinie $I = 8$ wpływ konfiguracji wzbudzonych staje się znacznie bardziej istotny. Stany z górnej części pasma – $I = 8$, $I = 12$ oraz $I = 16$ są rozmyte po większości dostępnych konfiguracji w przestrzeni konfiguracyjnej. Oznacza to, jak wcześniej wspomnieliśmy, że w użytej przestrzeni konfiguracyjnej nie ma konfiguracji, które by je reprezentowały. Stany o niskim spinie są zatem dobrze reprezentowane w obliczeniach DFT-NCCI z przestrzenią 1p1h. Konfiguracje wzbudzone typu 2p2h są niezbędne w szczególności do opisu stanów o wysokim spinie.

Rozdział 4

Rozpad beta typu Fermiego

Po omówieniu konstrukcji oraz właściwości modelu DFT-NCCI opartego na jądrowym funkcjonale gęstości możemy przejść do analizy rozpadów beta. W niniejszej pracy skupimy się na rozpadach dozwolonych, które, zgodnie z klasyfikacją opisaną w rozdziale 2, dzielą się na rozpady Fermiego oraz rozpady Gamowa-Tellera. Szczegółowa analiza zarówno jednych, jak i drugich odsłania fizykę wychodzącą poza ramy fizyki jądrowej. Badania łamania symetrii izospinowej w jądrach atomowych w kontekście rozpadów Fermiego stanowią najbardziej precyzyjne źródło informacji na temat wiodącego elementu macierzy mieszania kwarków. W konsekwencji przyczyniają się do testów unitarności tejże macierzy i w efekcie do poszukiwania fizyki poza Modelem Standardowym w aspekcie kolejnych generacji kwarków. Takie rachunki wykonuje się zarówno w przypadku przejść superdozwolonych między stanami analogowymi $T = 1$ jak i między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$.

Nie mniej interesujące okazują się być rozpady Gamowa-Tellera omawiane szerzej w następnym rozdziale. Analiza wspomnianego w rozdziale 2 efektu redukcji stałej sprzężenia prądów osiowovektorowych przyczynia się do głębszego zrozumienia natury naładowanych prądów słabych. Ponadto, badania zarówno nad procesami Fermiego jak i Gamowa-Tellera doskonale przyczyniają się do zrozumienia struktury jądrowej układów uczestniczących w rozpadzie, a w konsekwencji natury oddziaływania silnego.

§1. Superdozwolone rozpady beta Fermiego

W poniższym paragrafie uwagę skupimy na superdozwolonych rozpadach Fermiego między stanami analogowymi $T = 1$. Temat poruszamy w niniejszej pracy bardziej w formie podsumowania niż w formie wnikliwej analizy ze względu na fakt, że stanowił on temat przewodni pracy doktorskiej [150], mojej pracy magisterskiej [155] oraz kilku publikacji [77, 149]. W żadnych z tych prac jednak poprawki izospinowe δ_C do wszystkich dostępnych przejść superdozwolonych nie zostały wyznaczone w modelu DFT-NCCI. Mieszanie konfiguracji okazuje się być niezbędną procedurą w przypadku jąder, dla których stan podstawowy w procedurze Hartree’ego-Focka nie jest wyznaczany w sposób jednoznaczny. Otóż okazuje się, że w przypadku jąder nieparzystych lub nieparzysto-nieparzystych prąd generowany przez walencyjny nukleon, czy też odpowiednio przez walencyjne nukleony może być zorientowany wzdłuż różnych osi rozkładu masy jądra. Niejednoznaczność rozwiązania wynika bezpośrednio z metody opisu jądra. W przypadku jądra o sferycznym rozkładzie gęstości rozwiązania, w których prąd cząstek walencyj-

nych jest zorientowany wzdłuż osi X, Y oraz Z, są zdegenerowane. Rozkłady gęstości o kształcie osiowo symetrycznym oraz trójosiowym ze względu na swoją geometrię znoszą tę degenerację. W ten sposób stan podstawowy może być reprezentowany nawet przez trzy średniopolowe rozwiązania różniące się jedynie orientacją prądu cząstek walencyjnych. Przez cząstki walencyjne rozumiemy tu niesparowane jeden lub dwa nukleony krążące wokół parzysto-parzystego podukładu zwanego dla uproszczenia rdzenia. Okazuje się, że poprawka izospinowa zależy w sposób znaczący od reprezentacji stanu podstawowego. Dotychczas, tj. w pracy [154] oraz w pracy doktorskiej [150], wyznaczano poprawki dla każdej reprezentacji niezależnie, a wartość końcową służącą do obliczeń zredukowanego czasu życia, wyznaczano jako ich średnią arytmetyczną. W poniższym paragrafie zaprezentujemy wyniki, w których poprawka jest otrzymywana poprzez zmieszanie wszystkich dostępnych reprezentacji stanu podstawowego przy pomocy metody DFT-NCCI .

W przedstawionych w tym paragrafie rachunkach złamana symetria izospinowa w naszym modelu jest wynikiem jedynie oddziaływania Coulomba. Naturalnie korelacje związane z łamaniem tejże symetrii związane są również z oddziaływaniem silnym zarówno w kanale łamania symetrii ładunkowej jak i mieszania protonów z neutronami manifestującego się szczególnie w nieparzysto-nieparzystym jądrze $N = Z$. Te ostatnie powoduje jednak łamanie osiowej symetrii izospinowej. W konsekwencji używane przez nas jedno-wymiarowe rzutowanie na izospin jest niewystarczające. Można byłoby pokusić się o przeprowadzenie rachunków poprawek izospinowych do superdozwolonych przejść Fermiego, wyłączając klasę II związaną z mieszaniem protonów z neutronami. Taki rachunek prezentujemy w kolejnym podrozdziale jednak dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$, dla których wiadomo [9], że efekt klasy II jest zaniedbywalny.

Stan podstawowy jądra parzysto-parzystego o $N - Z = \pm 2$, $|I = 0, T \approx 1, T_z = \pm 1\rangle$, jest wyznaczony w sposób jednoznaczny ze względu na brak niesparowanych nukleonów. Łamanie symetrii izospinowej w tym stanie opisane jest przez mieszanie *coulombowskie* :

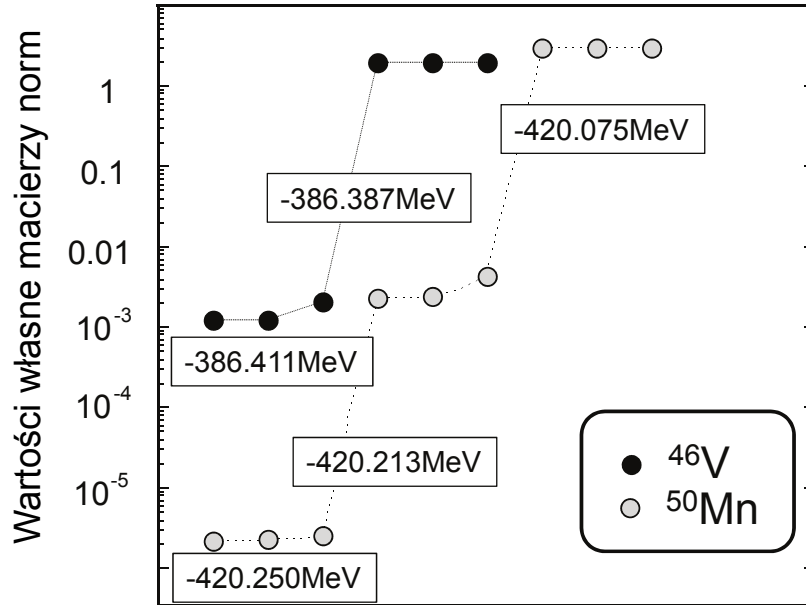
$$|I = 0, T \approx 1, T_z = \pm 1\rangle = \sum_{T' \geq 1} c_T |I = 0; T', T_z = \pm 1\rangle, \quad (4.1)$$

stanów o przywróconej symetrii obrotowej z momentem pędu $I = 0$. W jądrze nieparzysto-nieparzystym o $N = Z$ odpowiedni izospinowy stan analogowy $|I = 0, T \approx 1, T_z = 0\rangle$ wyznaczamy przez zmieszanie różnych, zależnych od orientacji prądu niesparowanych nukleonów, reprezentacji średniopolowych tego stanu. A zatem:

$$|I = 0, T \approx 1, T_z = 0\rangle = \sum_{k=X,Y,Z} \sum_{T'=0,1,2} c_{T'}^{(k)} |I = 0, T', T_z = 0\rangle^{(k)}. \quad (4.2)$$

Stany $|I = 0, T, T_z = 0\rangle^{(k)}$ powstały przez wyrzutowanie momentu pędu oraz izospinu ze średniopolowych rozwiązań φ_k będących antyuszeregowanymi wyznacznikami Slatera z określonym kierunkiem prądu, a ściślej kierunku jednocząstkowego momentu pędu, neutronu i protonu wzdłuż osi $k = X, Y, Z$. Antyuszeregowany stan średniopolowy w jądrze nieparzysto-nieparzystym $N = Z$ zbudowany jest w taki sposób, że walencyjne neutron i proton obsadzają najniższy dostępny stan jednocząstkowy tak, że jedna z cząstek zajmuje stan odwrócony w czasie (w sygnaturze) względem drugiej $|\bar{\nu} \otimes \pi; k\rangle$ (lub $|\nu \otimes \bar{\pi}; k\rangle$). Taki stan przez konstrukcję jawnie łamie symetrię izospinową.

Antyuszeregowane stany, o których mowa, różniące się jedynie kierunkiem prądu cząstek walencyjnych okazują się być od siebie liniowo zależne. W przestrzeni kolektywnej zbudowanej ze stanów wyrzutowanych z tych konfiguracji mamy 6 (9) stanów dla jąder osiowych (trójosiowych) różniących się orientacją prądu oraz izospinem $T = 0, 1, 2$. Przeprowadzając mieszanie konfiguracji (3.98), dostrzegamy, że wszystkie wartości własne macierzy norm są niezerowe. Niemniej liniowa zależność stanów uwidacznia się w zachowaniu tych wartości własnych. Okazuje się, że trend jest identyczny we wszystkich rozważanych przypadkach jąder. Na wykresie 4.1 przedstawiono dwa przykłady: jądro osiowe ^{46}V oraz trójosiowe ^{50}Mn . Wartości własne macierzy norm tworzą, w zależności od przypadku, dwie lub trzy grupy podobnych wartości. Co istotne różnica pomiędzy tymi grupami jest znacząca sięgająca nawet kilku rzędów wielkości. Obliczane poprawki izospinowe δ_C okazują się być niestabilne w pełnym rachunku uwzględniającym stany o niskich normach. Dopiero obcięcie bazy do trzech stanów odpowiadających największym wartościom własnym stabilizuje wynik. W związku z czym w tych i w przyszłych rachunkach uwzględniających mieszanie konfiguracji różniących się orientacją prądu dokonujemy redukcji przestrzeni kolektywnej jedynie do stanów, których wartości własne macierzy norm grupują się przy największych wartościach.



Rys. 4.1: Wartości własne macierzy norm w rachunkach DFT-NCCI dla stanów $I = 0, T \approx 1$ w jądrach nieparzysto-nieparzystych dla dwu przypadków: zdeformowanego osiowo jądra ^{46}V oraz zdeformowanego trójosiowo jądra ^{50}Mn . Podane energie zostały uzyskane przy obcięciu do trzech, sześciu oraz dziewięciu wartości własnych macierzy norm.

W tabelach 4.1 oraz 4.2 podano obliczenia związane z superdozwolonymi przejściami Fermiego. W pierwszej zaprezentowano 12 przypadków jąder, dla których bardzo wysoka precyzja wyznaczenia czasu życia pozwala na uwzględnienie ich w statystyce związanej z analizą elementu macierzowego V_{ud} . W drugiej przedstawiono przejścia, dla których ta precyzja nie jest wystarczająca. W Tab. 4.1 przedstawiono poprawki izospinowe wyznaczone pomiędzy rozwiązaniami o określonym kierunku prądu cząstek walencyjnych w nieparzysto-nieparzystym jądrze $N = Z$ zaczerpnięte z pracy [154] oraz jej wartość końcową $\delta_C^{\text{SV};\text{mix}}$ obliczoną w wyniku zmieszania tych konfiguracji. Następnie na podstawie

Tabela 4.1: Wyniki obliczeń dla przejść superdozwolonych, których doświadczalna precyzja pozwala na uwzględnienie w analizie elementu macierzowego V_{ud} . W tabeli podano poprawki obliczone w modelu MR DFT dla trzech orientacji prądu generowanego przez cząstki walencyjne X,Y oraz Z, następnie wartość poprawki uzyskanej w wyniku zmieszania tychże konfiguracji w modelu DFT-NCCI, obliczony na podstawie wzoru (2.52) zredukowany czas życia $\mathcal{F}t$, empiryczną poprawkę $\delta_C^{(exp)}$ wprowadzoną dalej w tekście (4.5) oraz wkład poszczególnych przejść do testu χ^2 .

Jądro matki	$\delta_C^{(X)}$ (%)	$\delta_C^{(Y)}$ (%)	$\delta_C^{(Z)}$ (%)	$\delta_C^{(SV;mix)}$ (%)	$\mathcal{F}t$ (s)	$\delta_C^{(exp)}$ (%)	χ_i^2
$T_z = -1$							
^{10}C	0.559	0.559	0.823	0.579(87)	3064.5(52)	0.37(15)	3.5
^{14}O	0.303	0.303	0.303	0.303(30)	3072.3(33)	0.36(6)	0.0
^{22}Mg	0.243	0.243	0.417	0.270(41)	3081.4(72)	0.62(23)	1.4
^{34}Ar	0.865	0.997	1.475	0.87(13)	3063.6(91)	0.63(27)	1.3
$T_z = 0$							
^{26}Al	0.308	0.308	0.494	0.329(49)	3071.8(20)	0.37(4)	0.8
^{34}Cl	0.809	0.679	1.504	0.75(11)	3067.6(38)	0.65(5)	10.9
^{42}Sc	0.770	0.770	0.770	0.77(27)	3069.2(85)	0.72(6)	3.1
^{46}V	0.486	0.486	0.759	0.563(84)	3075.1(32)	0.71(6)	1.3
^{50}Mn	0.460	0.460	0.740	0.476(71)	3076.5(32)	0.67(7)	2.4
^{54}Co	0.622	0.622	0.671	0.586(88)	3075.6(36)	0.75(8)	1.3
^{62}Ga	0.925	0.840	0.881	0.78(12)	3093.1(48)	1.51(9)	43.2
^{74}Rb	2.054	1.995	1.273	1.63(24)	3078(12)	1.86(27)	0.3
$\overline{\mathcal{F}t}^{0^+ \rightarrow 0^+} =$					3073.7(11)	$\chi^2 =$	69.5
$ V_{ud} =$					0.97396(25)	$\chi_d^2 =$	6.3
					0.99892(65)		

obliczonych poprawek izospinowych oraz poprawek radiacyjnych δ'_R [67, 68], Δ_R [69] oraz δ_{NS} [67, 68, 76] podano zredukowany czas życia $\mathcal{F}t$ wyliczony ze wzoru (2.52). Należy podkreślić, że rachunki dla przejść superdozwolonych zostały przeprowadzone z użyciem standardowego natężenia siły spin-orbita tj. $W_0 = 150 \text{ MeV fm}^5$ w parametryzacji SV.

Poza przejściami $^{14}\text{O} \rightarrow ^{14}\text{N}$ oraz $^{42}\text{Sc} \rightarrow ^{42}\text{Ca}$ wszystkie poprawki zostały wyznaczone przy obcięciu bazy przestrzeni kolektywnej do trzech stanów zgodnie z wcześniejszą dyskusją. W średniopoloowych rachunkach jądro ^{14}O jest sferyczne, a ^{42}Sc niemal sferyczne, wobec czego reprezentujące je antyuszeregowane konfiguracje są jednoznacznie wyznaczone i nie zachodzi konieczność mieszania różnych orientacji. Dla pozostałych przypadków, ze względu na obcięcie stanów w przestrzeni kolektywnej oraz ze względu na ograniczenie bazy, błąd szacowany jest na 15%.

Ponadto, podobnie jak w poprzednich pracach, wyklucziliśmy przejścia $^{38}\text{K} \rightarrow ^{38}\text{Ar}$ oraz $^{38}\text{Ca} \rightarrow ^{38}\text{K}$ z analizy statystycznej. Ze względu na silne mieszanie poziomów jednocząstkowych pochodzących od powłok $d_{3/2}$ oraz $s_{1/2}$ poprawka izospinowa dla tych

Tabela 4.2: Podobnie jak w Tabeli 4.1 jednak dla przejść dotychczas niezmiierzonych lub zmierzonych z niewystarczającą precyzją, aby móc je zastosować do wyznaczenia elementu macierzowego V_{ud} .

jądro matki	$\delta_C^{(SV)}$ (%)	jądro matki	$\delta_C^{(SV)}$ (%)
$T_z = -1$		$T_z = 0$	
^{18}Ne	1.37(21)	^{18}F	1.22(18)
^{26}Si	0.427(64)	^{22}Na	0.335(50)
^{30}S	1.24(19)	^{30}P	0.98(15)

przejść jest niefizycznie duża i wynosi nawet 10%. Istnieje duża szansa, że rozseparowanie poziomów jednocząstkowych przy zwiększeniu natężenia oddziaływania spin-orbita wraz z uwzględnieniem w metodzie DFT-NCCI konfiguracji wzbudzonych typu 1p-1h oraz 2p-2h ustabilizuje tę poprawkę. Taki rachunek przeprowadzono w przypadku rozpadu $^{37}\text{K} \rightarrow ^{37}\text{Ar}$, gdzie udało się obniżyć niefizyczną wartość poprawki izospinowej p. par. 2 niniejszego rozdziału.

Średnia wartość $\overline{\mathcal{F}t}^{0^+ \rightarrow 0^+} = 3073.7(11)$ wyznaczona na podstawie średniej ważonej błędem prowadzi do wartości V_{ud} równej:

$$V_{ud} = 0.97396(25). \quad (4.3)$$

Wartość ta jest w pełni zgodna z wartością otrzymaną w rachunkach modelu powłokowego (2.35). A na podstawie wartości elementów macierzowych V_{us} oraz V_{ub} (2.40) wartość testu unitarności macierzy CKM wynosi:

$$|V_{ud}|^2 + |V_{us}|^2 + |V_{ub}|^2 = 0.99892(65) \quad (4.4)$$

Ta wartość sugeruje unitarność macierzy CKM z dokładnością do 3σ .

Dwie ostatnie kolumny w Tab. 4.1 przedstawiają test zgodności zaproponowany w pracy [156]. Zakładając spełnienie hipotezy o zachowaniu prądu wektorowego tj. niezależną od przejścia wartość $\overline{\mathcal{F}t}^{0^+ \rightarrow 0^+}$ oraz prawidłowo wyznaczone poprawki radiacyjne δ_{NS} i δ'_R na podstawie wzoru (2.52) można wyprowadzić tzw. eksperymentalne wartości poprawek izospinowych:

$$\delta_C^{(\text{exp})} = 1 + \delta_{NS} - \frac{\overline{\mathcal{F}t}^{0^+ \rightarrow 0^+}}{ft(1 + \delta'_R)}, \quad (4.5)$$

które przedstawiono w przedostatniej kolumnie. W ostatniej natomiast podano wartości testu χ^2 tj. zgodności poprawki obliczonej w ramach modelu DFT-NCCI z poprawką wyznaczoną na podstawie powyższego wzoru dla poszczególnych przejść z osobna. Całkowita wartość testu na ilość stopni swobody ($\chi_d^2 = \chi^2/n_d$ dla $n_d = 11$) wynosi $\chi_d^2 = 6.3$. Otrzymana wartość jest znacznie mniejsza niż ta uzyskana we wcześniejszej pracy [154], gdzie poprawkę izospinową uzyskiwano jako średnią arytmetyczną poprawek pochodzących od średniopółowych rozwiązań z różnymi orientacjami prądu cząstek walencyjnych. Warto

zauważyć, że tak jak w poprzedniej pracy [154], tak i w rachunkach DFT-NCCI nasza wartość χ^2/n_d jest zdominowana przez dwa przejścia $^{62}\text{Ga} \rightarrow ^{62}\text{As}$ oraz $^{34}\text{Cl} \rightarrow ^{34}\text{S}$. Wykluczając je z analizy otrzymalibyśmy $\chi_d^2 = \chi^2/9 = 1.7$, a zatem liczbę podobną do uzyskanych w ramach innych modeli:

- modelu perturbacyjnego ($\chi_d^2 = 1.5$) [156]
- modelu powłokowego z funkcjami radialnymi Woods-Saxona ($\chi_d^2 = 0.4$) [70]
- modelu powłokowego z funkcjami radialnymi Hartree’ego-Focka ($\chi_d^2 = 2.0$) [157, 158]
- przybliżenia faz przypadkowych (RPA) z potencjałem Skyrme’a-Hartree’ego-Focka ($\chi_d^2 = 2.1$) [159]
- RPA z relatywistyczną teorią Hartree’ego-Focka ($\chi_d^2 = 1.7$) [160]

§2. Rozpady beta Fermiego w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$

Tak jak opisano w rozdziale 2 przejścia Fermiego między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ stanowią alternatywną do przejść superdozwolonych metodę jądrową wyznaczania elementu macierzowego V_{ud} . W niniejszym paragrafie poprawki izospinowe oznaczamy przez δ_{ISB} , aby podkreślić, że w rachunkach uwzględniono różne źródła łamania symetrii izospinowej, poza przypadkiem rachunków z uwzględnieniem jedynie oddziaływania coulombowskiego, gdzie poprawkę oznaczamy przez δ_C .

2.1 Dopasowanie parametrów izowektorowej części siły Skyrme’a do obliczeń z rzutowaniem

Przybliżenie pola średniego prowadzi do spontanicznego łamania symetrii oddziaływania. W szczególności złamana jest symetria izospinowa. Aby przywrócić izospin w sposób właściwy należy wykluczyć *niefizyczne* łamanie tejże symetrii a zachować to, które faktycznie występuje w przyrodzie, mianowicie łamanie izospinu przez oddziaływanie Coulomba oraz przez oddziaływanie silne. Zatem aby funkcja falowa była wolna od *niefizycznego* mieszania izospinu, należy z rozwiązania średniopoleowego wyrzutować dobry izospin, a następnie otrzymane w ten sposób stany zredagonalizować w bazie kolektywnej z tym samym oddziaływaniem. W ten sposób otrzymane energie własne wyznaczające stany podstawowe jąder zwierciadlanych $N \approx Z$ mogą posłużyć do dopasowania MDE (3.48) do danych doświadczalnych. W przypadku oddziaływania Coulomba (3.22) nie ma parametru wymagającego dopasowania. W używanym przez nas modelu ładunek e nie jest parametrem efektywnym. W przypadku silnego oddziaływania klasy III dopasowanie parametrów t^{III} do tak otrzymanych wartości MDE będzie wolne od sztucznego efektu mieszania izospinu generowanego przez pole średnie. Można spodziewać się, *a priori*, że ten efekt nie będzie znaczący. Jednak istotą rachunków związanych z poprawkami izospinowymi δ_{ISB} , a w konsekwencji z elementem macierzowym V_{ud} jest ich precyzja. Dlatego warto pokusić się o dopasowanie stałych sprzężenia na poziomie teorii z rzutowaniem.

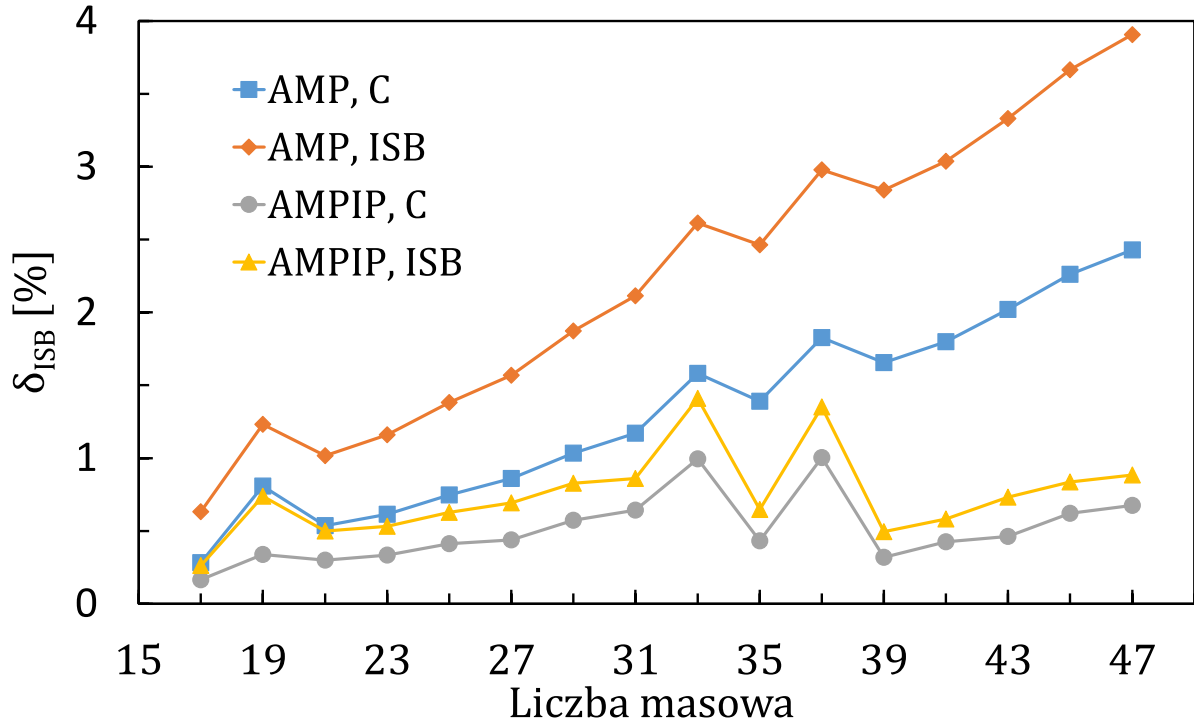
Taka precyzja nie była wymagana w rachunkach dotyczących współczynnika zmieszania izospinowego przedstawionych w poprzednim rozdziale. Wobec tego wówczas użyto parametrów dopasowywanych do energii wyznaczonych w ramach formalizmu Hartree’ego–Focka do jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 7 - 75$ oraz jąder $T = 1$ $A = 6 - 58$ p. [8].

Tabela 4.3: Zestawy parametrów kontaktowego oddziaływania klasy III dopasowane w dwu wariantach obliczeń teoretycznych – SR DFT oraz MR DFT z użyciem funkcjonału SV_{SO} . W przypadku obliczeń SR DFT zestawy parametrów różnią się danymi doświadczalnymi użytymi do dopasowania. Szczegóły znajdzie czytelnik w tekście.

		t_0^{LO}	RMSD	t_0^{NLO}	t_1^{NLO}	t_2^{NLO}	RMSD
	metoda	(MeV fm ³)	(keV)	(MeV fm ³)	(MeV fm ⁵)	(MeV fm ⁵)	(keV)
1	SR DFT	-6.7 ± 0.3	138	5 ± 2	-3 ± 3	-7.4 ± 0.8	97
2	SR DFT	-6.2 ± 0.3	102	2 ± 2	-1 ± 3	-5.6 ± 1.1	75
3	SR DFT	-6.2 ± 0.5	96	0 ± 3	-1 ± 5	-4.8 ± 1.3	74
4	MR DFT	-6.3 ± 0.5	116	0 ± 2	-2 ± 2	-4 ± 1	106

Założenie liniowości fitu [9] pozwala na dopasowanie parametrów w rzędzie wiodącym przy dwu punktach, a w kolejnym rzędzie rozwinięcia przy czterech. Ze względu na złożoność obliczeniową problemu dopasowanie parametrów w formalizmie MR DFT zawęziliśmy do badanych jąder o izospinie $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 47$. Analiza porównawcza parametrów obu modeli wymaga takiej samej procedury dopasowania. Skupmy uwagę na zmianie parametru t_0^{LO} . Zestaw 1 w Tab. 4.3 przedstawia parametry siły SV_{SO} dopasowane do wszystkich znanych wartości doświadczalnych MDE. Zestaw 2 przedstawia parametry dopasowane do jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 47$ oraz sąsiadujących jąder $T = 1$ o $A = 10 - 48$. Ograniczenie zakresu danych doświadczalnych spowodowało nieznaczny wzrost parametru. Wreszcie zestaw 3 przedstawia parametry wyznaczone tylko dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ $A = 11 - 47$. Pominięcie połowy danych nie wpłynęło na wartość parametru, podnosząc w sposób oczywisty wartość błędu dopasowania. Trzy powyższe dopasowania zostały wykonane przy użyciu rachunków SR-DFT. Z powyższej analizy wynika, że wykluczenie wartości MDE jąder $T = 1$ w dopasowaniu parametru w modelu MR DFT nie powinno wpłynąć znacząco na jego wartość. Porównanie parametrów z zestawu 3 i 4 oddaje zatem wpływ mieszania izospinu generowanego przez pole średnie. Różnica parametrów mieści się w błędzie, zatem dyskutowany wpływ jest pomijalny. Obserwujemy również, że fit z rzutowaniem nieznacznie pogarsza zgodność z doświadczeniem.

Należy jeszcze zwrócić uwagę na parametry w kolejnym rzędzie rozwinięcia. Parametry w rzędzie NLO są ściśle skorelowane – t_0^{NLO} i t_1^{NLO} są koliniowe. Tłumaczy to z pozoru istotniejsze niż w wiodącym rzędzie zmiany parametrów w kolejnych zestawach z Tab. 4.3.



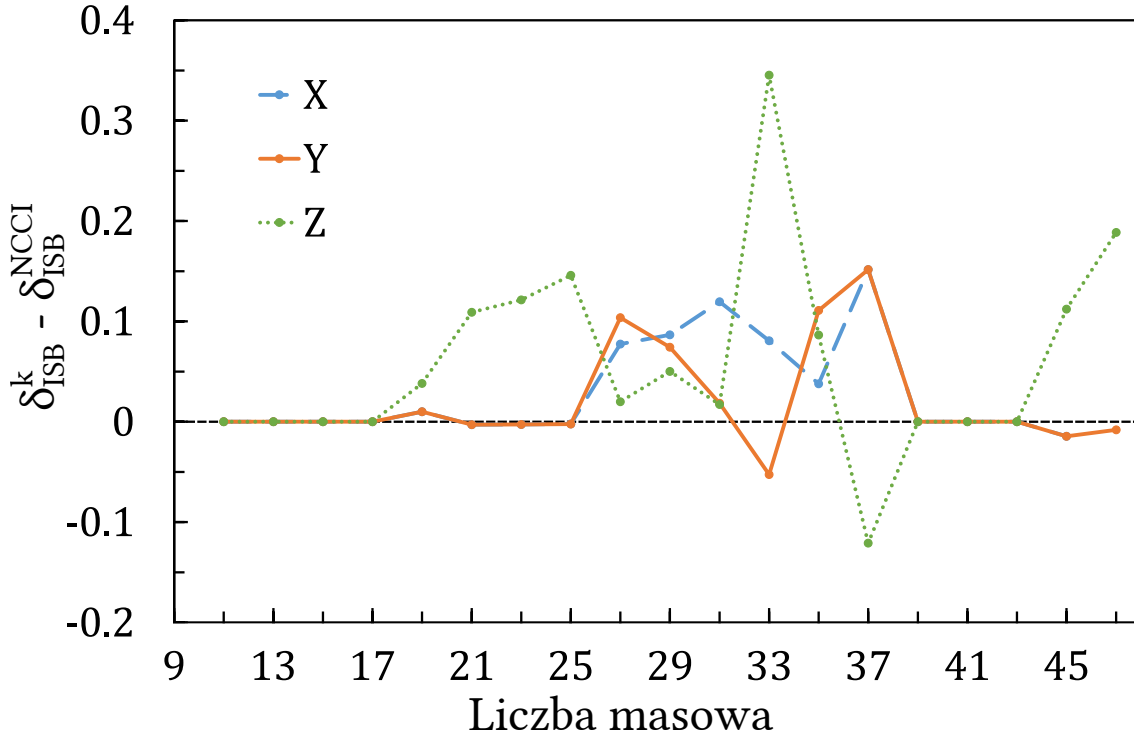
Rys. 4.2: Wpływ rzutowania na izospin (IP) na poprawkę izospinową w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 17 - 47$. Obliczenia z oddziaływaniem Coulomba jako jedynym źródłem łamania symetrii izospinowej zostały przedstawione przez szare i niebieskie krzywe. Żółte i pomarańczowe krzywe pokazują rachunki uwzględniające także oddziaływanie klasy III (3.54) w wiodącym rzędzie. Obliczenia zostały wykonane przy użyciu 10 powłok oscylatora harmonicznego.

2.2 Wpływ rzutowania na izospin na wartość poprawki izospinowej

Rzutowanie na izospin ma kluczowe znaczenie w wyznaczaniu współczynnika zmieszania izospinowego α_{ISB} , jak również przy obliczeniach dotyczących poprawek izospinowych δ_{ISB} . Wpływ rzutowania na izospin na tę poprawkę widoczny jest na wykresie 4.2. Rachunki poprawki izospinowej przeprowadzono dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 17 - 47$ w 2 wariantach z uwzględnieniem oddziaływania Coulomba jako jedynego źródła łamania symetrii izospinowej (C) oraz po dodaniu oddziaływania kontaktowego klasy III w rzędzie LO. Porównanie krzywych z rzutowaniem jedynie na moment pędu (*angular-momentum projection*, AMP) oraz z uwzględnieniem jednowymiarowego rzutowania na izospin (*angular-momentum and isospin projection*, AMPIP) wskazuje, że przywrócenie symetrii izospinowej obniża wartość poprawki względem rachunków AMP dwukrotnie dla lżejszych jąder, a nawet kilkakrotnie dla cięższych.

2.3 Wpływ orientacji prądu cząstek walencyjnych w rozwiązaniach średniopolowych na wartość poprawki izospinowej.

W paragrafie dotyczącym superdozwolonych rozpadów Fermiego opisaliśmy problem niejednoznaczności rozwiązań średniopolowych. Mianowicie, w zależności od typu deformacji istnieją 2 lub 3 minima, różniące się kierunkiem prądu generowanego przez cząstki



Rys. 4.3: Residua poprawek izospinowych obliczanych pomiędzy konfiguracjami stanu podstawowego o różnych orientacjach prądu cząstek walencyjnych $\delta_{\text{ISB}}^{\text{X}}$, $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Y}}$ oraz $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Z}}$ względem poprawki $\delta_{\text{ISB}}^{\text{NCCI}}$ uzyskanej ze zmieszania tychże konfiguracji w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 47$. Na wykresie przerywana niebieska linia odnosi się do rozwiązań z uszeregowaniem momentu pędu wzdłuż osi OX , ciągła pomarańczowa krzywa wzdłuż osi OY , a punktowana krzywa zielona wzdłuż osi OZ .

walencyjne względem rozkładu masy jądra w układzie wewnętrznym. Podobna niejednoznaczność średniopoloowych rozwiązań HF występuje również w przypadku jąder nieparzystych.

Okazuje się, że wartość poprawki izospinowej δ_{ISB} zależy w sposób znaczący od orientacji momentu pędu nieparzystej cząstki względem rozkładu masy jądra. Wobec tego, w celu wyznaczenia poprawki, konieczne jest przeprowadzenie mieszania wszystkich konfiguracji reprezentujących stan podstawowy. Ze względu na liniową zależność tych rozwiązań, tak jak opisano w paragrafie o przejściach superdozwolonych, przestrzeń kolektywną należy zredukować, obcinając wartości własne macierzy norm bliskie zeru.

Na wykresie 4.3 przedstawiono residua poprawek izospinowych obliczonych pomiędzy konfiguracjami stanu podstawowego o różnych orientacjach prądu cząstek walencyjnych $\delta_{\text{ISB}}^{\text{X}}$, $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Y}}$ oraz $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Z}}$ względem poprawki $\delta_{\text{ISB}}^{\text{NCCI}}$ uzyskanej z mieszania wszystkich orientacji. W przypadku jąder z dubletu o $A=11$, pomimo deformacji trójosiowej znaleziono jedynie rozwiązanie z orientacją prądu wzdłuż osi OZ . Przypadki $A = 13 - 17$ oraz $A = 39 - 43$ są rozwiązaniami niemal sferycznymi, dla których, z przyczyn geometrycznych, istnieje tylko jedno rozwiązanie. W przypadku jąder osiowych, ze względu na degenerację rozwiązań, krzywe $\delta_{\text{ISB}}^{\text{X}}(A)$ oraz $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Y}}(A)$ się pokrywają. Największe odchylenie od wartości $\delta_{\text{ISB}}^{\text{NCCI}}$ obserwowane jest w przypadku przejścia $^{33}\text{Cl} \rightarrow ^{33}\text{S}$, dla którego poprawka $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Z}}$ wykazuje

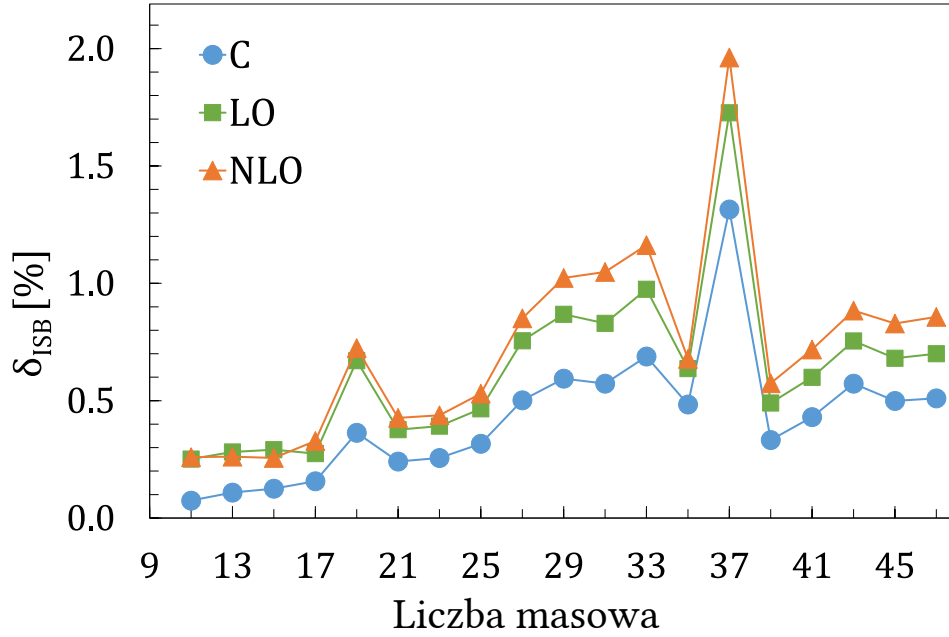
najbardziej anomalne zachowanie.

Traktując wartość poprawki DFT-NCCI jako wartość referencyjną, obliczamy następnie test χ^2 zgodności poprawek wyznaczonych dla poszczególnych orientacji. Okazuje się, że χ^2 jest najmniejsze dla δ_{ISB}^Y , a średni błąd odstępstwa wartości δ_{ISB}^Y od $\delta_{\text{ISB}}^{\text{NCCI}}$ wynosi 0.008% dla jąder zdeformowanych osiowo i 0.07% dla jąder trójosiowych. Na średnio stanowi to błąd odpowiednio 1.5% oraz 8% od wartości poprawki ze względu na nieuwzględnienie mieszania wszystkich orientacji. W celu zmniejszenia przestrzeni konfiguracyjnej, w rachunkach DFT-NCCI prezentowanych w dalszej części pracy ograniczymy się do uwzględnienia jedynie rozwiązań, dla których prąd cząstek walencyjnych jest zorientowany wzdłuż osi OY . To ograniczenie powoduje jednocześnie konieczność narzucenia błędu na wyznaczoną poprawkę w wartości 1.5% dla jąder zdeformowanych osiowo oraz 8% dla jąder trójosiowych od wartości poprawki. Naturalnie, błędu nie nakłada się w przypadku konfiguracji sferycznej.

Metoda MR DFT nie może być zastosowana do wyznaczania elementu macierzowego V_{ud} z przejść Fermiego między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$. W dwóch z czterech eksperymentalnych przypadków wyznaczenie poprawki izospinowej δ_{ISB} wiąże się bowiem z koniecznością skorelowania funkcji falowej stanu podstawowego ze wzbudzeniami cząstka-dziura. Powodem jest zbyt silne mieszanie orbitali $1s_{1/2}$ oraz $0d_{3/2}$ związane z niewłaściwie opisaną strukturą jednocząstkową w oddziaływaniu $SV_{\text{T,SO}}$. Aby uniknąć problemów z niejednoznacznością stanów wzbudzonych spowodowaną różnymi orientacjami prądu generowanego przez cząstki walencyjne przestrzeni konfiguracyjną w rachunkach DFT-NCCI ograniczymy do stanów średniopolowych z uszeregowaniem wzdłuż osi OY , zwiększając jednocześnie niepewność teoretyczną obliczanej poprawki zgodnie z wynikami analizy przeprowadzonej powyżej.

2.4 Wpływ izowektorowego oddziaływania kontaktowego na wartość poprawki izospinowej

Izowektorowe oddziaływanie silne okazało się być kluczowe w zrozumieniu anomalii Nolena-Shiffera obserwowanej w jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ oraz $T = 1$. Ponadto, jak pokazuje wykres 3.5, współczynnik zmieszania izospinowego α_{ISB} jest niezwykle czuły ze względu na skorelowanie stanu kwantowego przez człony łamiące symetrię ładunkową. Podobnie reaguje poprawka izospinowa. Na wykresie 4.4 przedstawiono zależność poprawki δ_{ISB} wyznaczonej dla przejść Fermiego między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ od liczby masowej w zakresie $A = 11 - 47$. Obliczenia wykonano w trzech wariantach: z oddziaływaniem Coulomba jako jedynym źródłem łamania symetrii izospinowej (C) oraz z uwzględnieniem wiodącego (LO) oraz kolejnego rzędu (NLO) rozwinięcia izowektorowego oddziaływania Skyrme'a. Wraz z dodaniem oddziaływania w wiodącym rzędzie rozwinięcia poprawka wzrasta od 70% dla lekkich jąder do 20% dla jąder z powłoki pf . Wzrost jest zatem podobny jak w przypadku α_{ISB} , patrz Rys. 3.5. Uwzględnienie oddziaływania izowektorowego w rzędzie NLO wnosi kolejne 10% w porównaniu do obliczeń w rzędzie LO. Poprawka jest zatem zbieżna ze względu na dodawanie członów klasy III rząd po rzędzie.



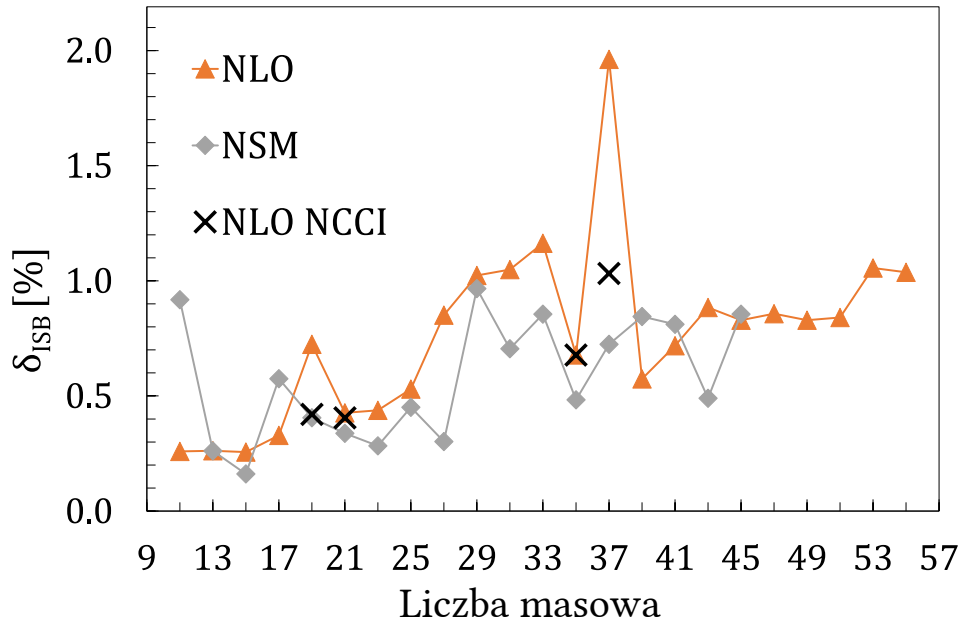
Rys. 4.4: Wartość poprawki izospinowej δ_{ISB} dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu mas $A = 11 - 47$. Rachunki uwzględniające jedynie oddziaływanie Coulomba ilustruje krzywa niebieska. Krzywa zielona odpowiada rachunkom z uwzględnieniem klasy III w wiodącym rzędzie, a krzywa pomarańczowa w następnym rzędzie rozwinięcia.

2.5 Wpływ struktury jądrowej na poprawkę izospinową

W zdeformowanym osiowo polu średnim stany (orbitale) jednocząstkowe znakowane są zwykle tzw. liczbami kwantowymi Nilssona $|Nn_z\Lambda, \Omega\rangle$. Są to liczby przybliżone, a jedyną zachowaną jest rzut momentu pędu Ω na oś kwantyzacji. Pozostałe liczby kwantowe $[Nn_z\Lambda]$ mówią jedynie, który ze stanów bazy ma największą domieszkę w rozkładzie jednocząstkowego stanu własnego w bazie. Liczby nilssonowskie są liczbami asymptotycznymi tj. bardzo dobrze odzwierciedlają strukturę stanu jednocząstkowego dla układów silnie zdeformowanych. Dla układów słabo zdeformowanych strukturę stanów znacznie lepiej, aczkolwiek nadal w sposób przybliżony, oddaje notacja sferyczna. W przypadku deformacji trójosiowej żadna z liczb kwantowych Nilssona nie jest zachowana, a poziomy jednocząstkowe są jeszcze silniej zmieszane, w sensie rozkładu w bazie, niż w przypadku osiowym.

Brak zachowanych liczb kwantowych powoduje, że nie ma transparentnych reguł wyboru dla elementów macierzowych Fermiego pomiędzy stanami jednocząstkowymi w jądrze matki i córki. Co więcej, na skutek przypadkowych degeneracji w widmie jednocząstkowym jednocząstkowe stany własne mogą się różnić w jądrze matki i córki na tyle istotnie, by w efekcie prowadzić do anomalii w przebiegu zwłaszcza tak subtelnej wielkości jaką jest poprawka δ_{ISB} w funkcji A . Na Rys. 4.4 takie anomalne zachowanie widać wyraźnie dla dubletów izospinowych o $A = 19$ i $A = 37$ oraz w w obszarze od $A=27$ do $A=33$, gdzie nasze obliczenia przewidują kształty trójosiowe.

Anomalne zachowanie poprawki δ_{ISB} dla przejść między jądrami zwierciadlanymi o $A = 19$ oraz $A = 37$ jest skutkiem źle odtwarzanych przerw energetycznych przez od-

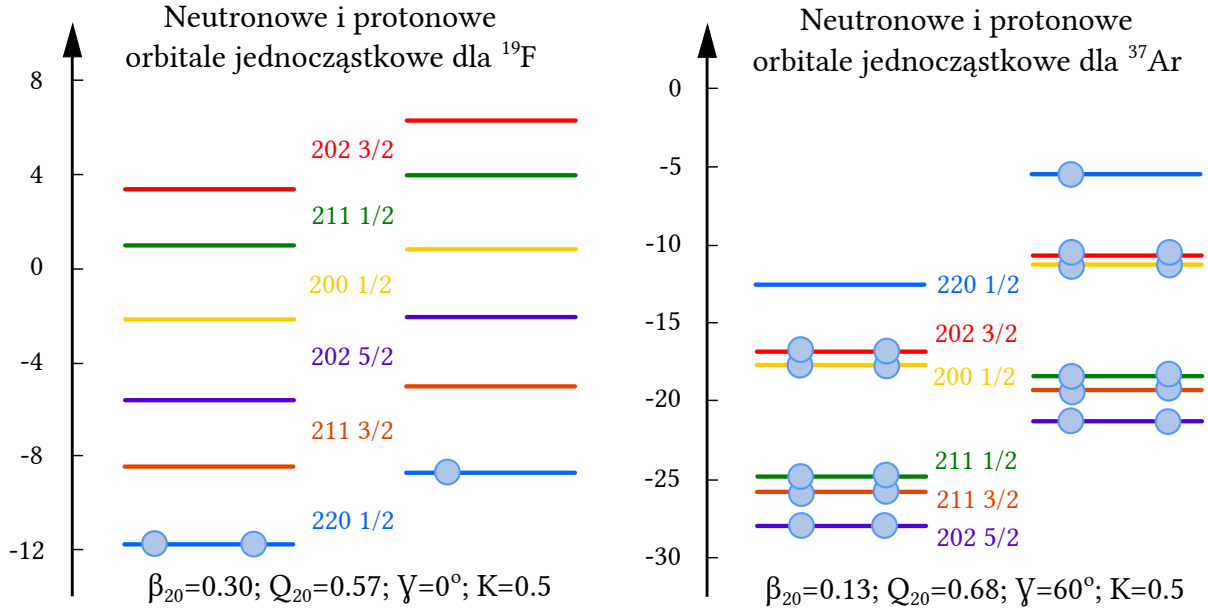


Rys. 4.5: Poprawki izospinowe wyznaczone w modelu MR DFT (pomarańczowe trójkąty) z oddziaływaniem $SV_{T,SO}^{NLO}$ dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 55$. Szare kwadraty prezentują wyniki uzyskane w modelu powłokowym NSM dla jąder z zakresu $A = 11 - 45$. Krzyżykami oznaczono obliczenia poprawki izospinowej w modelu DFT-NCCI. Rachunki DFT-NCCI wykonano dla 4 rozpadów branych do analizy elementu macierzowego V_{ud} .

działanie $SV_{T,SO}$ między sferycznymi podpowłokami, odpowiednio, $1s_{1/2}$ a $0d_{5/2}$ oraz $1s_{1/2}$ a $0d_{3/2}$. Oba przypadki wchodzą do puli czterech dobrze zmierzonych przejść, których używa się do wyznaczenia elementu macierzowego V_{ud} . Z omawianego wykresu widać wyraźnie, że poprawki δ_{ISB} dla przejść w $A = 19$ oraz $A = 37$ wyliczone w modelu MR DFT są niewiarygodne i nie mogą być wykorzystane do testowania Modelu Standardowego. Podobna sytuacja miała miejsce dla przejść superdozwolonych $0^+ \rightarrow 0^+$ w tryplecie izospinowym o $A = 38$, gdzie wyliczona metodą MR DFT poprawka izospinowa była anomalnie duża.

Aby lepiej zrozumieć przyczyny fizyczne anomalii pojawiających się dla przejść w dubletach o $A = 19$ oraz $A = 37$ i zaproponować stosowne remedium przejdźmy do opisu nilssonowskiego zdeformowanych orbitali jednocząstkowych. W powłoce sd mamy sześć orbitali Nilssona, które można powiązać z podpowłokami sferycznymi. Stany $|220\ 1/2\rangle$, $|211\ 3/2\rangle$ oraz $|202\ 5/2\rangle$ pochodzą ze sferycznej podpowłoki $0d_{5/2}$, orbital $|200\ 1/2\rangle$ pochodzi ze sferycznej podpowłoki $1s_{1/2}$ oraz dwa orbitale $|211\ 1/2\rangle$ i $|202\ 3/2\rangle$ pochodzące z podpowłoki $0d_{3/2}$. Konfiguracje stanów podstawowych jąder ^{19}F oraz ^{37}Ar wraz z energiami nilssonowskich poziomów jednocząstkowych przedstawia Rys. 4.6. Oba jądra są osiowe, a niesparowany nukleon obsadza stan o dominującej konfiguracji bazowej $|220\ 1/2\rangle$. Zauważmy, że w przypadku $A = 37$ stan ten jest szczególnie silnie zmieszany, do tego stopnia, że dominująca konfiguracja bazowa wskazuje, iż pochodzi on ze sferycznej podpowłoki $0d_{5/2}$, a nie $0d_{3/2}$. Jest to skutkiem silnego mieszania tego stanu ze stanem $|200\ 1/2\rangle$ spowodowanego degeneracją tych stanów widoczną na Rys. 4.6 co w efekcie prowadzi do jego silnej fragmentacji w bazie.

Silne mieszanie stanów jednocząstkowych w rozpatrywanych przypadkach wymaga rediagonalizacji hamiltonianu z wykorzystaniem metody DFT-NCCI. Wyniki takich obliczeń dla przejść w dubletach o $A=19$, $A=21$, $A=35$ oraz $A=37$ ilustruje Rys. 4.5. Obliczenia z mieszaniem konfiguracji wykonano wyłącznie dla jąder, których czasy życia oraz parametry korelacji zostały zmierzone najdokładniej spośród dostępnych zmierzonych przypadków w dubletach o $A = 11 - 45$. Jądra te są wykorzystywane do obliczenia elementu V_{ud} . W rachunkach wykorzystano izowektorowe oddziaływanie Skyrma'a w rzędzie NLO, SV_{SO}^{NLO} . Obliczenia DFT-NCCI wykonano w przestrzeni konfiguracyjnej uwzględniającej konfigurację stanu podstawowego oraz wszystkie wzbudzenia typu cząstka-dziura w podukładzie nieparzystym (wzbudzenia o liczbie kwantowej seniority $\nu=1$), w którym niesparowany nukleon obsadza nilssonowski stan jednocząstkowy o tej samej liczbie kwantowej Ω co w stanie podstawowym – wszystkie konfiguracje uwzględnione w obliczeniach są osiowo zdeformowane. Z wykresu obserwujemy wyraźnie, że mieszanie konfiguracji nie wpływa na poprawkę δ_{ISB} w przypadku przejść między jądrami o $A = 21$ oraz $A = 35$. Natomiast zdecydowanie poprawia zachowanie poprawki dla przejść w $A = 19$ oraz $A = 37$.



Rys. 4.6: Obsadzenie stanów jednocząstkowych w stanach podstawowych jąder ^{19}F oraz ^{37}Ar .

Dla przejścia $^{19}\text{Ne} \rightarrow ^{19}\text{F}$ obserwujemy spadek δ_{ISB} z 0.738% do 0.580% po zmieszanu stanu podstawowego z konfiguracją odpowiadającą wzbudzeniu cząstki walencyjnej na orbital $|200\ 1/2\rangle$ i do 0.430% po dodaniu do przestrzeni konfiguracyjnej wzbudzenia na orbital $|211\ 1/2\rangle$. Stan podstawowy oraz dwa wymienione wzbudzenia wyczerpują aktywną ($\Delta\Omega = 0$) przestrzeń konfiguracyjną stanów 1p-1h o seniority $\nu = 1$ dla tych jąder. Warto przedyskutować jeszcze spadek poprawki przy uwzględnieniu trzeciej konfiguracji. Orbital $|211\ 1/2\rangle$ leży wyżej o ok. 12MeV niż $|220\ 1/2\rangle$, patrz Rys. 4.6. Wydawałoby się, że taka przerwa energetyczna spowoduje jedynie nieznaczne mieszanie tej konfiguracji ze stanem podstawowym. W istocie, jeżeli w mieszanu uwzględnić jedynie stan podstawowy oraz wzbudzenie cząstki na orbital $|211\ 1/2\rangle$ to poprawka δ_{ISB} z 0.738% spada jedynie do 0.699%. Należy jednak zwrócić uwagę na fakt, iż różnica energetyczna między orbitalami $|200\ 1/2\rangle$ i $|211\ 1/2\rangle$ jest niewielka, w związku z czym zbudowane na nich konfiguracje

mogą istotnie się mieszać. To mieszanie jest odpowiedzialne za znaczny spadek δ_{ISB} z 0.580% do 0.430% przy uwzględnieniu energetycznie najwyżej leżącego wzbudzenia. Podobną analizę można przeprowadzić dla przejścia $^{37}\text{K} \rightarrow ^{37}\text{Ar}$, budując konfiguracje 1p-1h $\nu = 1$ przez wykreowanie dziury w stanach $|200\ 1/2\rangle$ oraz $|211\ 1/2\rangle$. Uwzględnienie tych wzbudzeń w mieszanii konfiguracji powoduje, że poprawka δ_{ISB} z wartości 1.833% spada do 1.099% i do 1.042%. Stany te wyczerpują aktywną przestrzeń konfiguracyjną 1p-1h $\nu = 1$ o $\Delta\Omega = 0$.

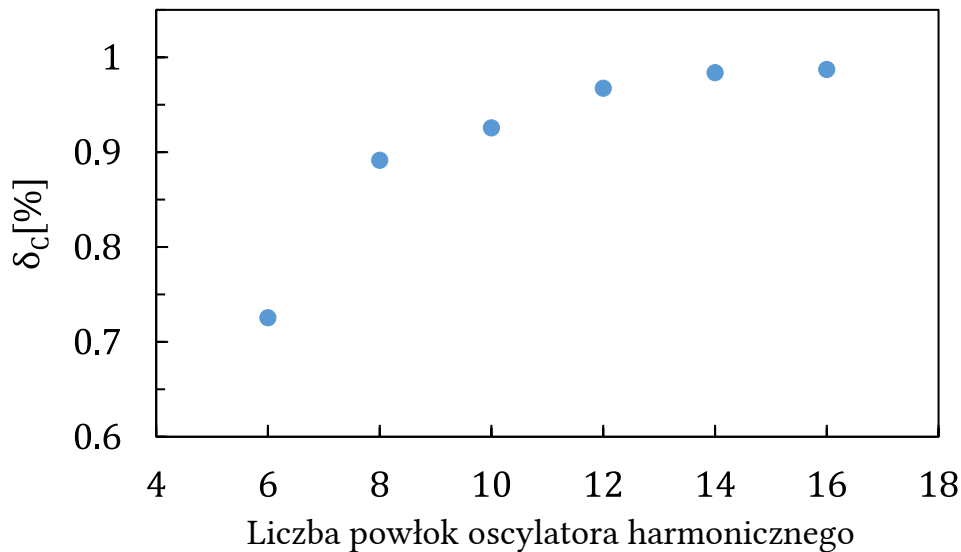
Znaczący spadek poprawki δ_{ISB} w modelu DFT-NCCI umożliwia dalsze obliczenia związane z wyznaczeniem elementu macierzowego V_{ud} . Niemniej nadal poprawka δ_{ISB} , dla przejścia $^{37}\text{K} \rightarrow ^{37}\text{Ar}$ jest znacznie większa od poprawek w sąsiadujących przejściach w $A = 35$ oraz $A = 39$, co może sugerować, że mieszanie konfiguracji w obrębie przestrzeni konfiguracyjnej zbudowanej ze wzbudzeń 1p-1h $\nu = 1$ nie rekompensuje w pełni średniopolewego efektu *niefizycznego* mieszania orbitali.

2.6 Analiza błędu poprawki izospinowej

Zanim przejdziemy do analizy unitarności macierzy CKM, przeprowadzimy analizę błędu obliczonej poprawki izospinowej. Źródła błędów można podzielić na kilka niezależnych składowych. Mianowicie:

- 1) błąd spowodowany obcięciem bazy do 12 powłok oscylatora harmonicznego

Zbieżność poprawki δ_C dla przejścia $^{51}\text{Fe} \rightarrow ^{51}\text{Mn}$ w funkcji rozmiaru bazy ilustruje Rys. 4.7. Analiza zbieżności pozwala przyjąć 3% (powłoka *sd*) oraz 5% (powłoka *pf*) błąd dla poprawek ze względu na obcięcie bazy do 12 powłok oscylatora harmonicznego.



Rys. 4.7: Zbieżność poprawki izospinowej δ_C w funkcji rozmiaru bazy mierzonej ilością powłok sferycznego oscylatora harmonicznego dla rozpadu Fermiego między stanami podstawowymi $^{51}\text{Fe} \rightarrow ^{51}\text{Mn}$.

2) błąd ze względu na różne orientacje prądu generowanego przez cząstkę walencyjną

Kolejnym źródłem błędu jest ograniczenie się w obliczeniach DFT-NCCI do konfiguracji, dla których prąd cząstki walencyjnej zorientowany jest w kierunku osi OY . Zgodnie z dyskusją w podrozdziale 3 tego paragrafu dla jąder osiowych takie założenie generuje błąd rzędu 1.5%, a dla jąder trójosiowych błąd rzędu 8% wartości poprawki izospinowej.

3) błąd ze względu na dopasowanie stałych sprzężenia t^{III}

Propagacja błędu dopasowania natężenia izowektorowego oddziaływania silnego t^{III} wymaga znajomości zależności poprawki izospinowej od tego parametru $\delta_{\text{ISB}}(t^{\text{III}})$. Linearyzacja tej zależności dla członu centralnego (LO) prowadzi do założenia:

$$\delta_{\text{ISB}}^{\text{LIN}} = at_0^{\text{III}} + b, \quad (4.6)$$

gdzie wyrazem wolnym jest poprawka, dla której jedynym źródłem łamania symetrii izospinowej jest oddziaływanie Coulomba. Współczynnik kierunkowy dopasowano do obliczeń poprawki $\delta_{\text{ISB}}(t_0^{\text{III}} = -6.3 \text{ MeV fm}^3)$. Liniową zależność przetestowano, przeprowadzając rachunki poprawki izospinowej z uwzględnieniem izowektorowego członu centralnego o natężeniu -7.4 MeV fm^3 oraz, wyznaczając poprawkę $\delta_{\text{ISB}}^{\text{LIN}}$ na podstawie wzoru (4.6). Średni błąd (Residual Standard Error)

$$RSE = \sqrt{\frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (\delta_{\text{ISB},i}^{\text{MR DFT}} - \delta_{\text{ISB},i}^{\text{LIN}})^2} < 0.002\% \quad (4.7)$$

jest całkowicie pomijalny, co pozwala przyjąć założenie liniowości pomiędzy parametrem t^{III} a poprawką izospinową. Wówczas błąd parametru dopasowania propaguje się zgodnie z:

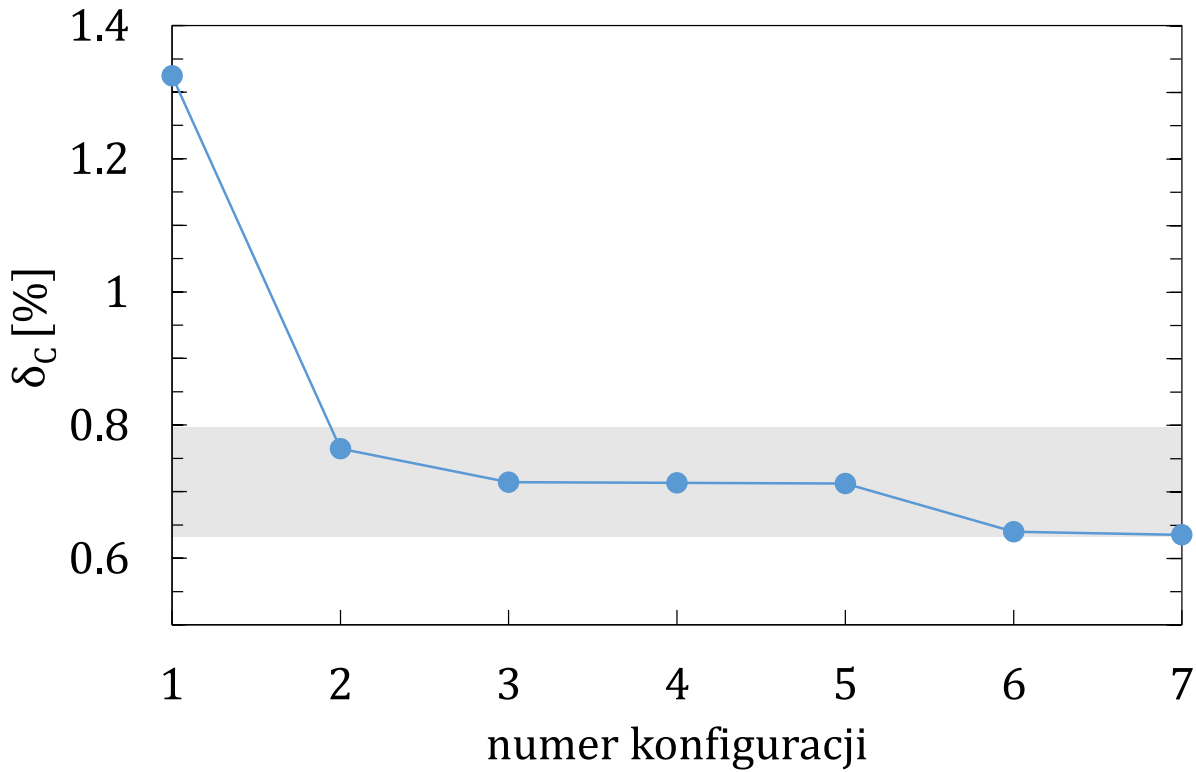
$$\delta(\delta_{\text{ISB}}) = a\delta(t_0^{\text{III}}). \quad (4.8)$$

Uśredniony błąd po wszystkich przypadkach wynosi 0.01%, co średnio stanowi 3% wartości poprawki izospinowej dla rachunków w rzędzie LO. Analogiczne rozumowanie przeprowadzono dla izowektorowego oddziaływania do rzędu NLO. Wówczas średni błąd wynosi 4% wartości poprawki.

4) błąd związany z ograniczeniem przestrzeni konfiguracyjnej

Przy wyznaczaniu poprawki izospinowej w modelu DFT-NCCI ograniczyliśmy przestrzeń konfiguracyjną do stanu podstawowego i wzbudzeń 1p-1h $\nu = 1$ o tej samej liczbie kwantowej Ω zwanych konfiguracjami aktywnymi. Wykluczenie z przestrzeni konfiguracyjnej wzbudzeń typu 2p-2h jest źródłem niepewności. Rys. 4.8 ilustruje test stabilności poprawki ze względu na rozmiar przestrzeni konfiguracyjnej. Rachunek wykonano dla przypadku $A=37$, dla którego poprawka jest anomalnie duża, patrz Rys. 4.5. Konfiguracje 1-5 rozpinają przestrzeń wzbudzeń jednocząstkowych, z czego pierwsze trzy należą do aktywnej przestrzeni konfiguracyjnej, dyskutowanej w poprzednim podrozdziale. Konfiguracje 4 i 5 są konfiguracjami 1p-1h $\nu = 1$ o $\Omega = 3/2$. Skorelowanie

układu kwantowego tymi dwoma wzbudzeniami 1p-1h nienależącymi do przestrzeni aktywnej nie zmienia wartości poprawki δ_{ISB} .



Rys. 4.8: Wykres stabilności poprawki izospinowej δ_{ISB} dla przejścia między jądrami o $A = 37$. Zacieniowany obszar przedstawia błąd poprawki wyznaczonej w obrębie przestrzeni konfiguracyjnej 1p-1h (punkt 5) ze względu na nieuwzględnienie w mieszanii wzbudzeń typu 2p-2h.

Na podstawie anomального zachowania poprawki δ_{ISB} w punkcie $A = 37$ p. Rys. 4.5 można przypuszczać, że przestrzeń konfiguracyjna zbudowana ze wzbudzeń 1p-1h może być niewystarczająca i że należałoby ją rozszerzyć do wzbudzeń 2p-2h. W modelu DFT-NCCI do takich wzbudzeń należą tzw. konfiguracje pairingowe w kanałach neutronowo-protonowym (np), neutronowo-neutronowym (nn) oraz protonowo-protonowym (pp). Naturalnie ilość takich wzbudzeń jest duża, ale można je zawęzić do konfiguracji o $\Delta\Omega = 0$ tj. takich, dla których rzut momentu pędu na oś kwantyzacji jest taki sam jak dla konfiguracji stanu podstawowego. W przypadku jądra ^{37}K , patrz Rys. 4.6, takie konfiguracje otrzymamy, wzbudzając neutron z poziomu $|200\ 1/2\rangle$ lub z poziomu $|211\ 1/2\rangle$ na poziom $|220\ 1/2\rangle$ w obrębie tej samej sygnatury. Kolejne konfiguracje pairingowe np otrzymamy przez jednoczesne wzbudzenie protonu oraz odpowiednie rozerwanie pary neutronowej. Na wykresie Rys. 4.8 konfiguracje 6 i 7 stanowią energetycznie najniższe leżące wzbudzenia np o $\Delta\Omega = 0$ w stosunku do stanu podstawowego. Obserwujemy znaczny spadek δ_{ISB} – o 12% wartości poprawki. Na chwilę obecną w kodzie HFODD nie można uzbudzić konfiguracji 2p-2h typu nn -pairing oraz pp -pairing w jądrach $A = 37$, używając oddziaływania $\text{SV}_{\text{T,SO}}$. Powodem jest bardzo niewielka przerwa energetyczna między orbitalami $|202\ 3/2\rangle$ oraz $|200\ 1/2\rangle$.

Podobną analizę wykonaliśmy dla $A = 21$, mieszając 10 konfiguracji, w tym konfiguracje 2p-2h typu *pairing* w kanałach nn , pp i np używając mniejszej bazy, składającej się z 10 powłok oscylatora harmonicznego, i nieco zmodyfikowanego oddziaływania $SV_{T,SO}$. Te obliczenia pokazują, że w tym przypadku uwzględnienie najniżej leżących wzbudzeń 2p-2h typu *pairing* generuje niepewność teoretyczną rzędu 5% wartości poprawki. Na obecnym etapie badań przyjmujemy jednak błąd 12% wartości poprawki ze względu na ograniczenie przestrzeni konfiguracyjnej do wzbudzeń 1p-1h $\nu = 1$. Z pewnością dla $A = 21$ i $A = 35$ jest to wartość zawyżona. Jednak szczegółowe wyznaczenie błędu wymagałoby znajomości zachowania poprawki izospinowej przy wysyceniu przestrzeni konfiguracyjnej. Takie rachunki są niezwykle czasochłonne ale możliwe do wykonania, a zatem niepewność z tytułu obciążenia przestrzeni konfiguracyjnej można zmniejszyć.

Podsumowując, cztery niezależne źródła błędu predykcji poprawki izospinowej dają łączny błąd poprawki dla przejść Fermiego między jądrami:

- osiowymi dla całego zakresu jąder - 13% wartości poprawki
- trójosiowymi - 15% wartości poprawki

Warto nadmienić również, że do analizy błędu należałoby dodać niepewność ze względu na przyjętą parametryzację Skyrme'a. Jednak ze względu na brak możliwości przeprowadzenia analogicznych rachunków poprawki izospinowej z inną niż SV parametryzacją, oszacowanie takiego błędu jest niemożliwe.

2.7 Analiza unitarności macierzy Cabbibo-Kobayashiego-Maskawy

Wprowadzony w rozdziale 2. wzór (2.57) wiąże zredukowany czas życia jądra niezależny od przejścia z elementem macierzowym V_{ud} . Zestawienie wielkości niezbędnych do przeprowadzenia analizy wartości elementu macierzowego V_{ud} umieszczono w Tab. 4.4. Wszystkie podane liczby zostały uzyskane wykorzystując wartości δ_{ISB}^V obliczone metodami MR DFT lub DFT-NCCI z uwzględnieniem łamania symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne w rzędzie NLO.

Przy obecnej dokładności teorii wyliczenie współczynnika mieszania ρ bezpośrednio ze wzoru (2.55) jest obciążone zbyt dużą niepewnością z powodu nieznaności stałej sprzężenia g_A w ośrodku. Wzór (2.55) pomaga jednak ustalić znak ρ . Wartość współczynnik mieszania można natomiast wyznaczyć, wykorzystując wzór (2.56):

$$\varrho^2 = \frac{f_V}{f_A} \left(2 \frac{\mathcal{F}^{0^+ \rightarrow 0^+}}{\mathcal{F}^{t_{\text{mirror}}}} - 1 \right). \quad (4.9)$$

Znajomość ρ pozwala z kolei wyznaczyć parametry korelacji A_β , $a_{\beta\nu}$ oraz B_ν na podstawie wzorów (2.60)–(2.62). Wartości parametru mieszania podane w Tab. 4.4 obliczono z powyższego wzoru dla $\mathcal{F}^{0^+ \rightarrow 0^+} = 3073.7 \pm 1.1$ uzyskanego w modelu DFT-NCCI w rachunkach przedstawionych w poprzednim paragrafie.

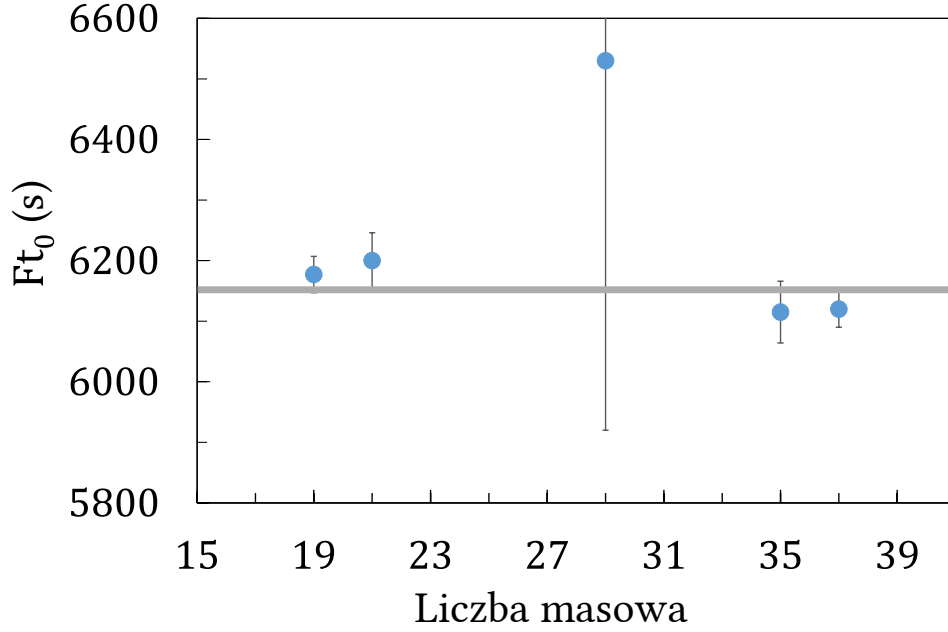
W celu wyznaczenia elementu macierzowego V_{ud} niezbędna jest eksperymentalnie wyznaczona wartość czasu życia oraz jednego ze współczynników korelacji. Znajomość takiego współczynnika, na podstawie wzorów (2.60)–(2.62), pozwala na wyznaczenie empirycznej wartości współczynnika mieszania ϱ i w konsekwencji zredukowanego czasu życia

Tabela 4.4: Zestawienie wielkości niezbędnych do przeprowadzenia analizy wartości elementu macierzowego V_{ud} na podstawie przejść Fermiego w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$. Wartości podano dla wszystkich przejść z zakresu $A = 11 - 45$. W kolejnych kolumnach tabeli podano: zredukowany czas życia $f_V t$, stosunek czynników fazowych $\frac{f_A}{f_V}$ oraz poprawki radiacyjne δ'_R oraz δ_{NS}^V . Te wartości zaczerpnięto z pracy [71]. Kolejna kolumna, δ_{ISB}^V zawiera poprawki izospinowe wyznaczone w modelu MR DFT, z wyjątkiem przejść między jądrami o $A=19, 21, 35$ oraz 35 , gdzie podano wartość poprawki wyznaczonej w ramach modelu DFT-NCCI. Ostatnie dwie kolumny przedstawiają wyznaczoną w ramach modeli MR DFT i DFT-NCCI wartość zredukowanego czasu życia $\mathcal{F}t^{\text{mirror}}$ daną wzorem (2.54) oraz wartość współczynnika mieszania ρ wyliczoną według wzoru (4.9).

A	$f_V t[s]$	$\frac{f_A}{f_V}$	$\delta'_R[\%]$	$\delta_{NS}^V[\%]$	$\delta_{ISB}^V[\%]$	$\mathcal{F}t^{\text{mirror}}[s]$	ρ
11	3910(16)	1.0105(21)	1.660(4)	-0.12(2)	0.269(35)	3959(15)	0.7396(40)
13	4622.3(47)	1.0045(9)	1.635(6)	-0.06(2)	0.271(35)	4682.3(48)	0.5576(13)
15	4344(11)	1.0026(5)	1.555(8)	-0.04(2)	0.266(35)	4398(11)	-0.6294(28)
17	2278.5(61)	1.0170(34)	1.587(10)	-0.04(2)	0.339(44)	2305.9(63)	-1.2794(35)
19	1701.5(30)	1.0143(29)	1.533(12)	-0.11(2)	0.430(56)	1718.3(31)	1.5936(30)
21	4041(11)	1.0180(36)	1.514(15)	-0.06(2)	0.415(54)	4083(11)	-0.7043(31)
23	4675(17)	1.0194(39)	1.476(17)	-0.11(2)	0.448(58)	4718(17)	0.5446(44)
25	3686.1(67)	1.0237(47)	1.475(20)	-0.06(2)	0.540(81)	3718.2(68)	-0.7984(26)
27	4119(19)	1.0270(54)	1.443(23)	-0.11(2)	0.86(13)	4138(20)	0.6872(54)
29	4791(18)	1.0223(45)	1.453(26)	-0.09(2)	1.03(15)	4806(18)	-0.5219(46)
31	4799(33)	1.0195(39)	1.430(29)	-0.08(2)	1.06(16)	4812(32)	0.5212(81)
33	5590(12)	0.9878(24)	1.435(32)	-0.06(2)	1.17(18)	5600(13)	0.3137(41)
35	5638.8(63)	0.9894(21)	1.421(35)	-0.04(2)	0.69(10)	5677.3(70)	-0.2884(24)
37	4576.8(91)	1.0046(9)	1.431(39)	-0.06(2)	1.04(14)	4591.2(97)	0.5803(24)
39	4296(16)	1.0010(2)	1.421(42)	-0.09(2)	0.584(76)	4328(16)	-0.6475(41)
41	2833(11)	1.0367(73)	1.453(47)	-0.04(2)	0.728(95)	2855(10)	-1.0540(52)
43	3672(56)	1.0318(64)	1.444(50)	-0.13(2)	0.89(12)	3691(56)	0.802(16)
45	4363(98)	1.0411(82)	1.439(54)	-0.06(2)	0.84(11)	4385(96)	-0.620(24)

jądra niezależnego od przejścia $\mathcal{F}t_0$.

Dane eksperymentalne odnośnie współczynników korelacji dla 5 przypadków przejść beta w jądrach zwierciadlanych o $A = 19, 21, 29, 35$ i 37 podano w Tab. 4.5. Najdokładniejszy pomiar wykonano dla przejść $^{19}\text{Ne} \rightarrow ^{19}\text{F}$ [161] oraz $^{37}\text{K} \rightarrow ^{37}\text{Ar}$ [162]. W ostatnim przypadku zmierzono dwa parametry $B_\nu = -0.755(24)$ [163] oraz $A_\beta = -0.5707(19)$ [162], przy czym znacznie dokładniejszy pomiar wykonano dla współczynnika A_β . Pomiar ten został poprzedzony bardzo dokładnym wyznaczeniem połowicznego czasu życia jądra ^{37}K



Rys. 4.9: Zredukowany czas życia niezależny od jądra dla 5 przypadków przejść między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$, dla których zmierzono współczynniki korelacji z wyznaczoną średnią ważoną oraz jej błędem - zacieniowany obszar.

$t_{1/2} = 1.23651(94)$ [164] w porównaniu z wcześniejszymi, mniej dokładnymi eksperymentami, których uśredniona wartość dawała przewidywanie $t_{1/2} = 1.2248(73)$. Dokładność pomiaru czasu życia oraz współczynnika korelacji stanowią największe źródło błędu predykcji elementu macierzowego V_{ud} . Z kolei dla przejścia $^{35}\text{Ar} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ pomiar współczynnika A_β wykonano dwukrotnie, otrzymując $A_\beta = 0.49(10)$ [165] oraz $A_\beta = 0.427(23)$ [166]. W dalszej analizie współczynnik mieszania ϱ wyznacza się na podstawie najdokładniejszego pomiaru, lub średniej ważonej błędem w przypadku pomiarów o zbliżonej dokładności.

Na wykresie 4.9 przedstawiono wartości $\mathcal{F}t_0$ (2.56) uzyskane dla pięciu przypadków, dla których wartość współczynnika mieszania ϱ została wyznaczona na podstawie danych eksperymentalnych oraz ich średnią ważoną błędem wraz z błędem dopasowania obliczo-

Tabela 4.5: Wartości wyznaczonych eksperymentalnie współczynników korelacji $A_\beta, a_{\beta\nu}$ oraz B_ν i wyznaczony na ich podstawie współczynnik mieszania ϱ dla przypadku 5 przejść między jądrami zwierciadlanymi o $A = 19, 21, 29, 35$ oraz 37.

A	A_β	$a_{\beta\nu}$	B_ν	ϱ
19	-0.0391(14) [161]	-	-	1.5995(45)
21	-	0.5502(60) [167]	-	-0.7136(72)
29	0.681(86) [168]	-	-	-0.59(10)
35	0.430(22) [78]	-	-	-0.279(16)
37	-0.5707(19) [162]	-	0.755(24) [163]	0.5760(60)

nym zgodnie ze wzorem:

$$\bar{x} \pm \delta\bar{x} = \frac{\sum_i w_i x_i}{\sum_i w_i} \pm \left(\sum_i w_i \right)^{-1/2}, \quad (4.10)$$

gdzie wagi

$$w_i = \frac{1}{(\delta x_i)^2}. \quad (4.11)$$

Niewystarczająca precyzja pomiaru parametru $A_\beta = 0.681(86)$ [168] dla przejścia między jądrami o liczbie masowej $A = 29$ wyklucza ten przypadek z dalszej analizy.

Tabela 4.6: W górnym panelu wartości poprawek izospinowych wraz z błędami w modelu powłokowym oraz w modelu DFT-NCCI dla trzech wariantów źródeł łamania symetrii izospinowej: z uwzględnieniem tylko oddziaływania Coulomba (C), z dołączeniem izowektorowej klasy III oddziaływania silnego w rzędzie wiodącym (LO) oraz w kolejnym rzędzie rozwinięcia (NLO). W dolnej części wyznaczone zredukowany czas życia niezależny od przejścia $\mathcal{F}t_0$, wartość elementu macierzowego V_{ud} oraz unitarność macierzy CKM w zależności od używanego modelu tj. NSM, DFT-NCCI (C), DFT-NCCI (LO) oraz DFT-NCCI (NLO).

	A	NSM	C	LO	NLO
δ_{ISB}^V	19	0.415(39)	0.231(30)	0.412(54)	0.430(56)
	21	0.348(27)	0.251(33)	0.387(50)	0.415(54)
	35	0.493(46)	0.474(62)	0.647(84)	0.688(89)
	37	0.734(61)	0.714(93)	0.97(13)	1.04(14)
$\mathcal{F}t_0$		6162(15)	6166(18)	6156(18)	6152(21)
V_{ud}		0.9727(14)	0.9725(14)	0.9732(14)	0.9736(16)
unitarność		0.9967(31)	0.9961(31)	0.9976(31)	0.9983(35)

W ten sposób uzyskano:

$$\overline{\mathcal{F}t_0} = 6152 \pm 21s, \quad (4.12)$$

a w konsekwencji, przy wartości poprawki radiacyjnej $\Delta_R^V = 2.361(38)\%$ [69] wartość elementu macierzowego wynosi:

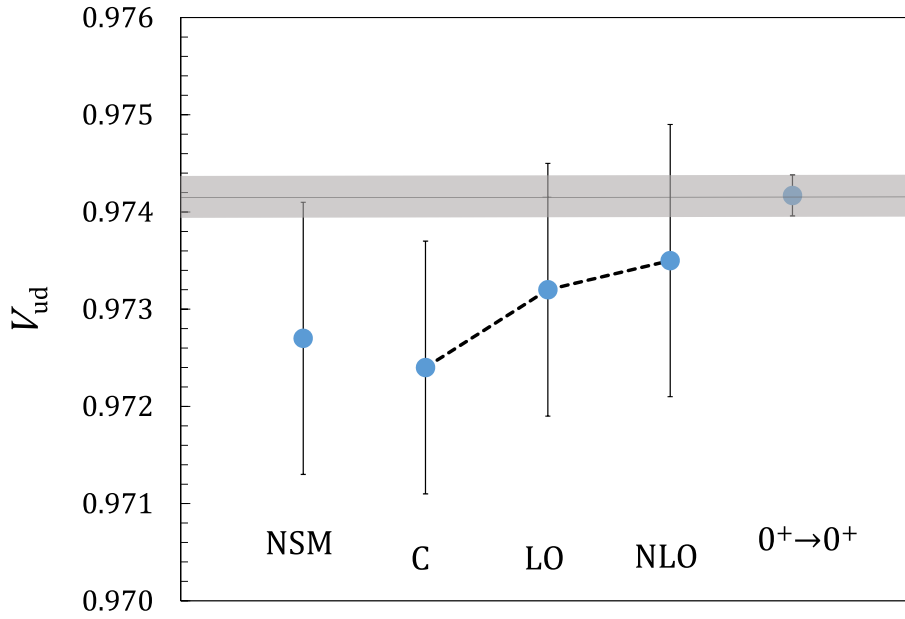
$$V_{ud} = 0.9736 \pm 0.0016. \quad (4.13)$$

Wynik jest całkowicie konsystentny z wartością uzyskaną w modelu powłokowym, dla którego $V_{ud} = 0.9727(14)$ [78]. Ponadto uzyskana wartość jest zgodna z wartością V_{ud} wyznaczoną z przejść superdozwolonych co do $\frac{\sigma}{3}$. Jednak jest nadal rząd wielkości mniej dokładna. Powodem jest przede wszystkim bardzo niewielka ilość przejść między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$, dla których dokładnie zmierzono połowiczne czasy rozpadu $t_{1/2}$ oraz parametry korelacji. Dla przejść superdozwolonych przypadków kontrybuujących w

analizie unitarności macierzy CKM jest aż 14.

Średnia ważona błędem powoduje, że w powyższej analizie najistotniejsze wkłady pochodzą od rozpadów ^{19}Ne oraz ^{37}K . Zgodnie z dyskusją całego powyższego paragrafu obok jąder trójosiowych są to jedyne przypadki wymagające rozszerzenia metody MR DFT o mieszanie wzbudzonych konfiguracji. I o ile ostateczny wynik δ_{ISB} dla przejścia $^{19}\text{Ne} \rightarrow ^{19}\text{F}$ wygładza trend poprawki, co więcej jest w pełnej zgodności z obliczeniami modelu powłokowego, tak dla przypadku rozpadu ^{37}K δ_{ISB} odstaje zarówno od wartości w jądrach sąsiadujących, jak i od wartości uzyskanej w modelu powłokowym. Wiemy, że poprawka izospinowa w tym rozpadzie spada wraz z rozszerzeniem przestrzeni konfiguracyjnej o najniższe leżące pairingowe wzbudzenia 2p-2h typu np i znacznie wygładza trend. Naturalnie stabilność poprawki należałoby przetestować ze względu na dodanie większej liczby konfiguracji typu 2p-2h użytych w mieszaniu DFT-NCCI.

Celem weryfikacji wpływu łamania symetrii ładunkowej powyższą analizę przeprowadzono dla trzech wariantów obliczeń: uwzględniając jedynie oddziaływanie Coulomba (C), z członem objętościowym (LO) oraz członem powierzchniowym (NLO) oddziaływania silnego łamiącym symetrię izospinową.



Rys. 4.10: Wartość elementu macierzowego V_{ud} wraz z błędem uzyskana z analizy przejść beta między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ w modelach NSM, DFT-NCCI (C), DFT-NCCI (LO) oraz DFT-NCCI (NLO) porównana z wartością otrzymaną z przejść superdozwolonych w modelu NSM.

W Tab. 4.6 przedstawiono wartości poprawek izospinowych, uśrednionego zredukowanego czasu życia $\mathcal{F}t_0$ oraz elementu macierzowego V_{ud} i testu unitarności macierzy CKM dla wszystkich trzech wariantów obliczeń wraz z rachunkami modelu powłokowego. Wszystkie obliczenia zostały wykonane z uwzględnieniem mieszania wzbudzeń z aktywnej przestrzeni konfiguracyjnej 1p-1h. Wartości V_{ud} przedstawiono na wykresie 4.10.

Wzrost elementu V_{ud} przy uwzględnieniu łamania symetrii ładunkowej jest znaczący, szczególnie dostrzegalny pomiędzy rachunkami w wariancie C i LO. Kolejny, mniejszy, wzrost obserwuje się przy uwzględnieniu kolejnego rzędu rozwinięcia NLO. Uwzględnienie izowektorowej części oddziaływania silnego znacznie przybliża wartość elementu V_{ud} do tej pochodzącej od przejść superdozwolonych.

Rozdział 5

Rozpad beta typu Gamowa-Tellera

§1. Element macierzowy Gamowa-Tellera

Procedury rzutowania (MR DFT) oraz mieszania konfiguracji (DFT-NCCI) dostarczają funkcji falowych z dobrze określonymi liczbami kwantowymi I, M oraz $T_z = (N - Z)/2$. Tak skonstruowana teoria pozwala na wyznaczenie elementów macierzowych przejść beta. W modelu DFT-NCCI stany kwantowe jądra rozpadającego się (jądra matki) oraz jądra po rozpadzie (jądra córki) przyjmują, zgodnie z wzorami (3.80) oraz (3.99), następującą postać:

$$\begin{aligned} |n; IM; T_z\rangle &= \sum_{i,j} a_{i,j}^{(n;IM;T_z)} |\varphi_j; IM; T_z\rangle^{(i)} \\ &= \sum_{i,j} \sum_{K,T \geq |T_z|} f_{ij;KT}^{(n;IM;T_z)} \hat{P}_{T_z T_z}^T \hat{P}_{MK}^I |\varphi_j\rangle \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} |m; I'M'; T'_z\rangle &= \sum_{p,r} a_{p,r}^{(m;I'M';T'_z)} |\psi_r; I'M'; T'_z\rangle^{(p)} \\ &= \sum_{p,r} \sum_{K',T' \geq |T'_z|} f_{pr;K'T'}^{(m;I'M';T'_z)} \hat{P}_{T'_z T'_z}^{T'} \hat{P}_{M'K'}^{I'} |\psi_r\rangle \end{aligned} \quad (5.2)$$

gdzie n, m numerują stany własne modelu DFT-NCCI o tym samym momencie pędu, jego rzucie na trzecią oś oraz rzucie na trzecią oś w izoprzestrzeni rosnąco zgodnie z ich energią, zaś i, p przebiegają po stanach o tych samych liczbach kwantowych I, M, T_z wyrzutowanych z określonego wyznacznika Slatra φ_j w przypadku jądra matki oraz ψ_r w przypadku jądra córki.

Wyznaczenie elementów macierzowych jednociłowego wektorowego operatora Gamowa-Tellera w powyższych stanach (5.1) i (5.2) upraszcza się, jeżeli przedstawimy go w postaci operatora sferycznego:

$$\hat{O}_{\mu\nu}^{\text{GT}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=1}^A \hat{\tau}_{1\mu}^{(k)} \hat{\sigma}_{1\nu}^{(k)} \quad (5.3)$$

przy czym zależność izospinowa $\mu = \pm 1$ zależy od tego, czy przejście następuje w kanale β^+ , czy β^- . Postać sferyczna operatora pozwala skorzystać z reguły komutacyjnej dla tensorów sferycznych (1.28) i zredukować procedurę rzutowania w obu stanach kwantowych

– matki i córki do rzutowania z jednego stanu np. ze stanu kwantowego opisującego jądro matki zgodnie z (3.80). Element macierzowy Gamowa-Tellera przyjmuje wtedy postać:

$$M_{\mu\nu}^{\text{GT}} = \sum_{ij;KT} \sum_{pr;K'T'} f_{ij;KT}^{(n;IM;T_z)} f_{pr;K'T'}^{(m;I'M';T'_z)} \underbrace{\langle \psi_r | \hat{P}_{T'_z T'_z}^{T'} \hat{P}_{K'M'}^{I'} \mathcal{O}_{\mu\nu}^{\text{GT}} \hat{P}_{T_z T_z}^T \hat{P}_{MK}^I | \varphi_j \rangle}_{\mathbb{M}_{\mu\nu}^{\text{GT}}} \quad (5.4)$$

przy czym

$$\mathbb{M}_{\mu\nu}^{\text{GT}} = C_{TT_z, 1\mu}^{T'T'_z} C_{IM, 1\nu}^{I'M'} \sum_{\eta\xi} C_{TT'_z - \eta, 1\eta}^{T'T'_z} C_{IK' - \xi, 1\xi}^{I'K'} \langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} \hat{P}_{T'_z - \eta T_z}^T \hat{P}_{K' - \xi K}^I | \varphi_j \rangle. \quad (5.5)$$

Skorzystanie z definicji operatora obrotu (1.27), funkcji D -Wignera oraz relacji (3.86) pozwala zapisać element macierzowy występujący w powyższym wzorze w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} \hat{P}_{T'_z - \eta T_z}^T \hat{P}_{K' - \xi K}^I | \varphi_j \rangle &= \\ &= \frac{2T+1}{8\pi^2} \frac{2I+1}{8\pi^2} \int d\Omega_T \int d\Omega D_{T'_z - \eta, T_z}^{T*}(\Omega_T) D_{K' - \eta, K}^{I*}(\Omega) \langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} \hat{R}(\Omega_T) \hat{R}(\Omega) | \varphi_j \rangle \\ &= \frac{2T+1}{8\pi^2} \frac{2I+1}{8\pi^2} \int d\Omega_T e^{i\alpha_T(T'_z - \eta)} d_{T'_z - \eta, T_z}^T(\beta_T) e^{i\gamma_T T_z} e^{-i\alpha_T(T'_z - \eta)} e^{-i\gamma_T T_z} \\ &\quad \int d\Omega D_{K' - \eta, K}^{I*}(\Omega) \langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} e^{-i\beta_T \hat{T}_y} \hat{R}(\Omega) | \varphi_j \rangle \\ &= \frac{2T+1}{2} \frac{2I+1}{8\pi^2} \int_0^\pi d\beta_T \sin \beta_T d_{T'_z - \eta, T_z}^T(\beta_T) \int d\Omega D_{K' - \eta, K}^{I*}(\Omega) \langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} | \tilde{\varphi}_j \rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Korzystając z uogólnionego twierdzenia Wicka (3.71) i (3.72) element macierzowy pomiędzy wyznacznikami Slatra występujący w powyższej całce można zapisać następująco:

$$\langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} | \tilde{\varphi}_j \rangle = \langle \psi_r | \tilde{\varphi}_j \rangle \int d\mathbf{r} \sum_{qq'; \sigma\sigma'} \langle q | \hat{\tau}_{1\eta} | q' \rangle \langle \sigma | \hat{\sigma}_{1\xi} | \sigma' \rangle \tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma'q'; \mathbf{r}\sigma q). \quad (5.7)$$

Aby go wyliczyć należy obliczyć zatem kontrakcje gęstości przejściowej z elementami macierzowymi operatora $\hat{\sigma}_k$ i $\hat{\tau}_k$.

Gęstość przejściowa (3.73) wyraża się następująco:

$$\tilde{\rho}(\sigma'q'; \sigma q) = \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\rho}(q', q) + \sum_{k=(x,y,z)} \langle \sigma' | \hat{\sigma}_k | \sigma \rangle \tilde{s}_k(q, q') \right\} \quad (5.8)$$

i jest równoznaczna definicji sformułowanej w języku tensorów sferycznych:

$$\tilde{\rho}(\sigma'q'; \sigma q) = \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\rho}(q', q) + \sum_{\alpha=(1,0,-1)} \langle \sigma' | \hat{\sigma}_{1\alpha} | \sigma \rangle \tilde{\rho}_{1\alpha}(q, q') \right\} \quad (5.9)$$

Wówczas kontrakcja jest równa:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma\sigma'} \langle \sigma | \hat{\sigma}_{1\xi} | \sigma' \rangle \tilde{\rho}(\sigma' q'; \sigma q) = \\
& = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \left\{ \langle \sigma | \hat{\sigma}_{1\xi} | \sigma' \rangle \tilde{\rho}(q', q) \delta_{\sigma\sigma'} + \sum_{\alpha=(1,0,-1)} \langle \sigma | \hat{\sigma}_{1\xi} | \sigma' \rangle \langle \sigma' | \hat{\sigma}_{1\alpha} | \sigma \rangle \tilde{\rho}_{1\alpha}(q', q) \right\} \\
& = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\alpha} \langle \sigma | \hat{\sigma}_{1\xi} \hat{\sigma}_{1\alpha} | \sigma \rangle \tilde{\rho}_{1\alpha}(q', q) = (-1)^{\xi} \tilde{\rho}_{1-\xi}(q', q)
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Wobec powyższego element macierzowy przyjmuje postać:

$$\langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} | \tilde{\varphi}_j \rangle = \langle \psi_r | \tilde{\varphi}_j \rangle \int d\mathbf{r} (-1)^{\eta+\xi} \tilde{\rho}_{1-\xi, 1-\eta}(\mathbf{r}). \tag{5.11}$$

W programie HFODD gęstości są wyrażone w układzie kartezjańskim, wobec czego powyższe wymaga jeszcze przekształcenia:

$$\begin{aligned}
& \langle \psi_r | \hat{\tau}_{1\eta} \hat{\sigma}_{1\xi} | \tilde{\varphi}_j \rangle = \\
& = \langle \psi_r | \tilde{\varphi}_j \rangle \int d\mathbf{r} (-1)^{\eta} \left\{ \tilde{s}_{z, 1-\eta}(\mathbf{r}) \delta_{\xi, 0} - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{s}_{x, 1-\eta}(\mathbf{r}) + i \tilde{s}_{y, 1-\eta}(\mathbf{r}) \right) \delta_{\xi, 1} + \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{s}_{x, 1-\eta}(\mathbf{r}) - i \tilde{s}_{y, 1-\eta}(\mathbf{r}) \right) \delta_{\xi, -1} \right\}.
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Należy podkreślić, że operator Gamowa-Tellera w postaci (5.3) nie posiada żadnych wolnych parametrów i nie jest wobec tego dopasowywany do wartości eksperymentalnych. W modelu MR DFT operator ten działa na stany kwantowe uwzględniające korelacje związane z łamaniem a następnie przywracaniem symetrii np. obrotowej czy izospinowej. W modelu powłokowym natomiast takie korelacje wprowadza się przez mieszanie konfiguracji w przestrzeni walencyjnej. W modelu powłokowym często definiuje się efektywny operator Gamowa-Tellera. W szczególności, w powłoce *sd* (szczegóły czytelnik znajdzie w [169]) ma on postać:

$$\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{GT}} = \sum_{k=1}^A \boldsymbol{\sigma}_k \tau_k + \delta \mathcal{O}^{\text{GT}}, \tag{5.13}$$

gdzie

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{O}^{\text{GT}} = & \delta_s (d-d) \sum_{k=1}^A \boldsymbol{\sigma}_k \tau_k + \delta_s (s-s) \sum_{k=1}^A \boldsymbol{\sigma}_k \tau_k + \delta_l (d-d) \sum_{k=1}^A \mathbf{l}_k \tau_k \\
& + \delta_p (s-d) \sum_{k=1}^A \mathbf{p}_k \tau_k + \delta_p (d-d) \sum_{k=1}^A \mathbf{p}_k \tau_k.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Wartości δ są czynnikami renormalizującymi w obrębie powłoki *sd*, które dopasowuje się do danych doświadczalnych, a operator

$$\mathbf{p}_k = \sqrt{8\pi} [Y^{(2)}(\mathbf{r}_k) \times \boldsymbol{\sigma}_k]^{(1)}. \tag{5.15}$$

Dopasowane parametry efektywne tak skonstruowanego operatora mają za zadanie odtworzenie korelacji, których pozbawiona jest jądrowa funkcja falowa. W tym kontekście różni autorzy wymieniają wysokoenergetyczne wzbudzenia nieuwzględniane w mieszaniu konfiguracji oraz efekty związane ze wzbudzeniem nukleonu do rezonansu Δ , który przed deekscytacją może rozpaść się w procesie rozpadu beta w kanale Gamowa-Tellera [50]. Dodatkowo parametry mogą zawierać korelacje związane z wielociałowymi prądami zmieniającymi ładunek, jak się okazuje [3, 47, 170, 171] kluczowymi w rozumieniu efektu *quenchingu*.

Zaimplementowany w kodzie HFODD element macierzowy Gamowa-Tellera został przetestowany w obliczeniach 5 jednociąłowych elementów macierzowych w przestrzeni sd w przejściach: $^{17}\text{F} \rightarrow ^{17}\text{O}$ oraz $^{39}\text{Ca} \rightarrow ^{39}\text{K}$, na które składają się przejścia: $0d_{5/2} \rightarrow 0d_{5/2}$, $0d_{3/2} \rightarrow 0d_{3/2}$, $0d_{5/2} \rightarrow 0d_{3/2}$, $1s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ oraz $1s_{1/2} \rightarrow 0d_{3/2}$. W modelu powłokowym jądra ^{17}F , ^{17}O są ^{39}Ca i ^{39}K są układami jednociąłowymi z jedną cząstką bądź jedną dziurą w przestrzeni walencyjnej. W modelu pola średniego następuje zniesienie degeneracji sferycznej. Podpowłoki sferyczne rozszczepiają się na 6 poziomów Nilssona ze względu na magnetyczną liczbę kwantową, co schematycznie zilustrowano na Rys. 5.1 dla przypadku $A = 17$. Obok schematu rozszczepienia na rysunku podano także wyniki obliczeń diagonalnych elementów macierzowych M_{GT} metodą MR DFT.

$M_{\text{GT}}^{\text{MR DFT}}$					
$0d_{3/2}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 6 \\ \text{---} \\ 5 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ -1.548 \\ \text{---} \\ -1.548 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 6 \\ \text{---} \\ 5 \end{array}$	$0d_{3/2}$	
$1s_{1/2}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 4 \\ \text{---} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 2.444 \\ \text{---} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 4 \\ \text{---} \end{array}$	$1s_{1/2}$	
$0d_{5/2}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 3 \\ \text{---} \\ 2 \\ \text{---} \\ 1 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 2.895 \\ \text{---} \\ 2.895 \\ \text{---} \\ 2.894 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{---} \\ 3 \\ \text{---} \\ 2 \\ \text{---} \\ 1 \end{array}$	$0d_{5/2}$	
^{17}F				^{17}O	

Rys. 5.1: Schemat przedstawiający strukturę jednociąłkową w modelu Nilssona w jądrach uczestniczących w rozpadzie $^{17}\text{F} \rightarrow ^{17}\text{O}$. Pomiędzy stanami podano wartości jednociąłkowych elementów macierzowych Gamowa-Tellera obliczone metodą MR DFT.

Okazuje się, że wartości przejść Gamowa-Tellera pomiędzy wzbudzeniami w obrębie

tego samego orbitalu sferycznego są niemal identyczne zarówno w przypadkach diagonalnych, takich jak np. $1 \rightarrow 1$, co jest widoczne na schemacie 5.1, jak i niediagonalnych np. $1 \rightarrow 2$. Wynika to z faktu, że analizowane jądra są niemal sferyczne. W takim przypadku rozszczepienie orbitali sferycznych jest bardzo niewielkie, a mieszanie się orbitali zaniedbywalne. W konsekwencji, porównanie jednocząstkowych elementów macierzowych pomiędzy modelami MR DFT i NSM oraz sferycznymi jednocząstkowymi elementami macierzowymi jest zasadne i stanowi znakomity test dla teorii MR DFT.

W celu wyznaczenia jednocząstkowych elementów macierzowych Gamowa-Tellera w sferycznej bazie $|nljs\rangle$ należy skorzystać z twierdzenia Wignera-Eckarta oraz z twierdzenia o zredukowanym elemencie macierzowym iloczynu skalarnego dwóch komutujących tensorów sferycznych [44]:

$$(j_1 j_2 j || \mathbf{T}_L \mathbf{S}_L || j'_1 j'_2 j') = \delta_{jj'} (-1)^{j_2+j+j'_1} \sqrt{2j+1} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j'_2 & j'_1 & L \end{Bmatrix} (j_1 || \mathbf{T}_L || j'_1) (j_2 || \mathbf{S}_L || j'_2). \quad (5.16)$$

Dokonując w powyższym wzorze podstawienia $\sigma = [\mathbf{1}\sigma]_1$, a następnie korzystając z równości:

$$(j' || \mathbf{1} || j) = \delta_{jj'} \sqrt{2j+1}; \quad (j' || \sigma || j) = \sqrt{6}, \quad (5.17)$$

otrzymujemy ostateczny wzór:

$$\mathcal{M}_{fi}^{\text{GT}} \equiv (n_f l_f j_f || \sigma || n_i l_i j_i) = \sqrt{6} \delta_{n_i n_f} \delta_{l_i l_f} \sqrt{2j_i+1} \sqrt{2j_f+1} (-1)^{l_f+j_f+\frac{3}{2}} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ j_i & j_f & l_i \end{Bmatrix}. \quad (5.18)$$

Wartości interesujących nas 5 elementów macierzowych $\mathcal{M}^{\text{GT}}$ w bazie sferycznej (sph) obliczonych na podstawie wzoru (5.18) przedstawiono w Tab. 5.1 wraz z wynikami obliczeń w modelach MR DFT oraz NSM.

Tabela 5.1: Jednocząstkowe elementy macierzowe Gamowa-Tellera w powłoce *sd* wyznaczone w bazie sferycznej według wzoru (5.18), obliczone w modelu MR DFT oraz w modelu powłokowym (NSM) z efektywnym operatorem Gamowa-Tellera dla jąder zwierciadlanych o $A = 17$ oraz $A = 39$.

$j \rightarrow j'$	sph	MR DFT		NSM eff	
		$A = 17$	$A = 39$	$A = 17$	$A = 39$
$0d_{5/2} \rightarrow 0d_{5/2}$	2.898	2.894	2.890	2.880	2.655
$0d_{5/2} \rightarrow 0d_{3/2}$	-3.098	-2.942	-3.080	-2.966	-2.687
$0d_{3/2} \rightarrow 0d_{3/2}$	-1.549	-1.548	-1.547	-1.521	-1.395
$1s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	2.449	2.444	2.444	2.430	2.238
$1s_{1/2} \rightarrow 0d_{3/2}$	0	0	0	0.038	0.050

Wszystkie elementy macierzowe obliczone w modelu MR DFT dotyczące przejść w jądrach $A = 17$ z jedną cząstką walencyjną oraz $A = 39$ z jedną dziurą są zgodne z wartościami obliczonymi w bazie sferycznej. Drobne różnice, największe dla przejścia $0d_{5/2} \rightarrow 0d_{3/2}$ w $A17$, można wytłumaczyć poprawkami izowektorowymi uwzględnionymi w modelu MR DFT. Zarówno wartości NSM jak i jednociłowe elementy macierzowe zostały wyznaczone przy założeniu pełnej symetrii izospinowej. Wartości obliczone w przejściu $A = 17$ są zgodne w modelu MR DFT jak i w podejściu NSM z efektywnym operatorem Gamowa-Tellera. Różnice widać jednak w przejściu $A = 39$, gdzie rachunki modelu NSM nie są zgodne z rachunkami w bazie sferycznej. Autorzy tłumaczą tę różnicę brakiem korelacji wysokoenergetycznych wzbudzeń rdzenia, podając ten argument jako wiodący w wyjaśnieniu zjawiska redukcji elementu macierzowego Gamowa-Tellera lub równoważnie konieczności renormalizacji stałej sprzężenia prądów osiowowektorowych w ośrodku.

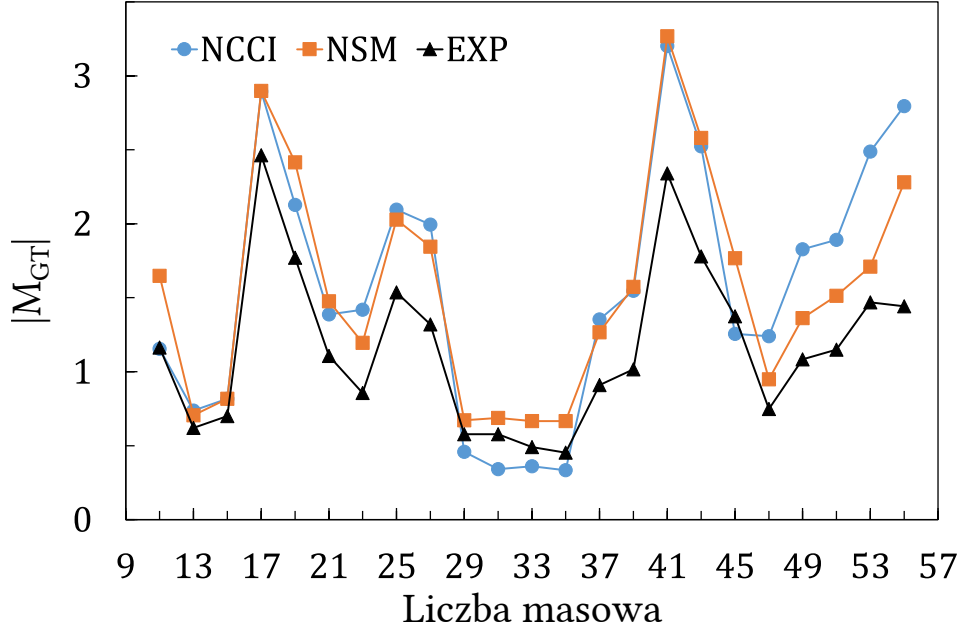
§2. Efekt *quenchingu* w modelu MR DFT

Badanie przejść beta typu Gamowa-Tellera jest o tyle ekscytujące, iż po dzień dzisiejszy nie wyjaśniono w pełni fenomenu redukcji elementu macierzowego w ośrodku jądrowym popularnie zwanego efektem *quenchingu*. Na podstawie obliczeń modelu powłokowego [169, 172, 173, 174, 175] od lat stawia się tezę, według której ograniczenie obliczeń do mieszania konfiguracji w obrębie poszczególnych powłok stanowi główne źródło systematycznego przeszacowania elementu macierzowego względem wartości doświadczalnych. Wprowadzenie efektywnego operatora Gamowa-Tellera (5.13) i (5.14), którego wolne parametry dopasowane były do eksperymentalnych elementów macierzowych miało za zadanie uchwycenie brakujących korelacji związanych, jak przypuszczano, z wysokoenergetycznymi wzbudzeniami rdzenia. Obliczenia elementu przejścia Gamowa-Tellera w bezrdzeniowym modelu jądrowym, jakim jest prezentowany w niniejszej rozprawie model bazujący na teorii jądrowego, wieloreferencyjnego funkcjonału gęstości stanowią zatem doskonałą okazję do weryfikacji tej hipotezy. Funkcja falowa skonstruowana w naszym modelu zawiera bowiem domieszki pochodzące od wyżej położonych powłok aż do zadanego obciążenia bazy. W przypadku prezentowanych poniżej rachunków jako bazy użyto 12 powłok sferycznego oscylatora harmonicznego.

Warto podkreślić, że właściwe zrozumienie efektu redukcji jest istotne nie tylko z perspektywy badań strukturalnych jąder atomowych, ale również w modelowaniu procesów astrofizycznych zachodzących w gwiazdach, czy we właściwym oszacowaniu czasu życia ze względu na przewidywany podwójny rozpad beta w kanale bezneutrinowym.

Na Rys. 5.2 przedstawiono systematyczne obliczenia elementu macierzowego Gamowa-Tellera w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ z powłok p , sd i dolnej części powłoki pf . Wyniki modelu DFT-NCCI porównano z danymi doświadczalnymi i rachunkami w modelu powłokowym. Wyniki modelu powłokowego są kompilacją wyników z kilku prac. Dla powłoki p wzięto je z prac [174, 175], wyniki w powłoce sd pochodzą z obliczeń [169] z oddziaływaniem USDb, a wyniki w dolnej części powłoki pf z prac [172, 173]. Rachunki DFT-NCCI obejmują mieszanie 4-5 energetycznie najniżej leżących wzbudzeń $1p-1h$. Okazuje się, że poza przejściem $^{45}\text{V} \rightarrow ^{45}\text{Ti}$ obliczenia DFT-NCCI nie różnią się zasadniczo od znacznie prostszego rachunku metodą MR DFT, który uwzględnia wyłącznie konfiguracje stanu podstawowego.

Obliczenia obu modeli systematycznie przeszacowują eksperymentalnie wyznaczony



Rys. 5.2: Element macierzowy Gamowa-Tellera dla przejść pomiędzy jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ z zakresu mas $A = 11 - 55$ wyznaczony na podstawie danych eksperymentalnych (czarne trójkąty), w modelu powłokowym NSM (pomarańczowe kwadraty) oraz w modelu DFT-NCCI (niebieskie kółka).

element macierzowy poza obszarem jąder trójosiowych $A = 29 - 35$ w modelu DFT-NCCI, natomiast w pełni odwzorowują trend eksperymentalny. Obserwujemy również zaskakującą zgodność obliczeń między obydwoma modelami. Wartości dla przejść z zakresu $A = 13 - 27$ oraz $A = 37 - 43$ są niemal identyczne. Stłumiony element macierzowy w rejonie $A = 29 - 35$ jest efektem silnego mieszania orbitali $s_{1/2}$ oraz $d_{3/2}$ generującego trójosiowość w tych jądrami. W przypadku elementu macierzowego Gamowa-Tellera procedura DFT-NCCI wydaje się nie rekompensować niedoskonałości struktury jądrowej wyznaczonej przez funkcjonal SV_{SO} . Największą różnicę między modelami obserwujemy w jądrami z powłoki pf , a szczególnie duży element macierzowy dla przejść między jądrami $A = 53$ oraz $A = 55$. Anomalne zachowanie w ostatnich dwóch przypadkach widoczne również w energiach wiązania oraz w poprawce izospinowej można prawdopodobnie wytłumaczyć niedopasowaniem do danych doświadczalnych oddziaływaniem tensorowym szczególnie aktywnym dla tych jąder.

Eksperymentalne wartości elementu macierzowego Gamowa-Tellera przedstawione na wykresie 5.2 można wyznaczyć na podstawie wzorów (2.55) i (2.56) oraz teoretycznej wartości elementu macierzowego Fermiego. Mianowicie:

$$M_{GT}^{EXP} = \frac{g_V}{g_A} M_F \sqrt{\frac{f_V}{f_A} \left(2 \frac{\mathcal{F}t^{0^+ \rightarrow 0^+}}{\mathcal{F}t^{mirror}} - 1 \right)} \quad (5.19)$$

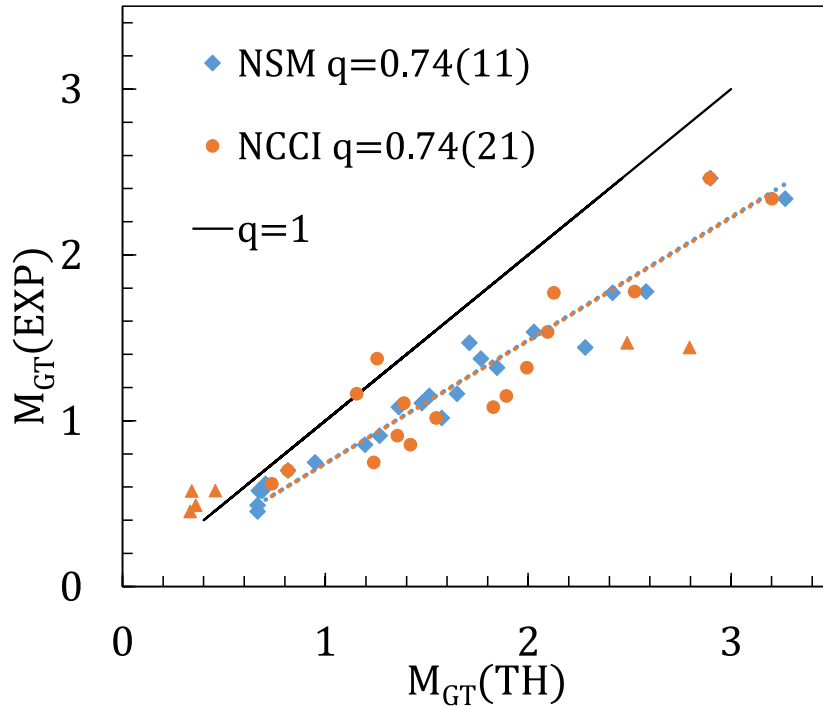
Wprowadzie powyższa wartość zależy od wielu teoretycznych poprawek (patrz rozdział IV§2), to kluczowe są niepewności eksperymentu dotyczące czasu życia rozpadającego się jądra oraz współczynnik rozgałęzienia.

Systematyczne przeszacowanie elementu macierzowego Gamowa-Tellera jest znane w

literaturze pod nazwą efektu redukcji (*quenching*) stałej sprzężenia prądów osiowowektrowych. W rzeczywistości, jak pokazują najnowsze wyniki badań, redukcji ulega nie stała sprzężenia g_A , lecz element macierzowy przejścia. Zatem:

$$M_{GT}^{\text{EXP}} = q M_{GT}^{\text{TH}} \quad (5.20)$$

Wartość czynnika skalującego q w obliczeniach wykonanych przy pomocy modelu powłokowego zależy od A i wynosi $q \approx 0.82$ [174, 175], $q \approx 0.77$ [169] oraz $q \approx 0.74$ [172] w powłokach, odpowiednio, $p-$, $sd-$ oraz $pf-$. W cięższych jądrach $A = 100 - 134$ [176, 177, 178] wartość elementu macierzowego jest nawet dwukrotnie większa niż przewidywania eksperymentalne, a średni czynnik $q \approx 0.48$.



Rys. 5.3: Wartości elementów macierzowych Gamowa-Tellera wyznaczonych w ramach modelu powłokowego NSM (niebieskie romby) oraz modelu DFT-NCCI (pomarańczowe kółka). Pomarańczowymi trójkątami oznaczono elementy macierzowe Gamowa-Tellera nieuwzględnione w analizie wartości parametru skalującego q w przejściach między jądrami trójosiowymi $A = 29 - 35$ oraz jądrami $A = 53 - 55$. Szczegóły analizy opisane są w tekście. Przerywane linie przedstawiają krzywą regresji liniowej w modelu NSM (prosta niebieska) oraz w modelu DFT-NCCI (prosta pomarańczowa). Odstępstwo prostych regresji od linii czarnej odzwierciedla wielkość efektu redukcji elementu macierzowego wyznaczonego teoretycznie względem wartości doświadczalnej.

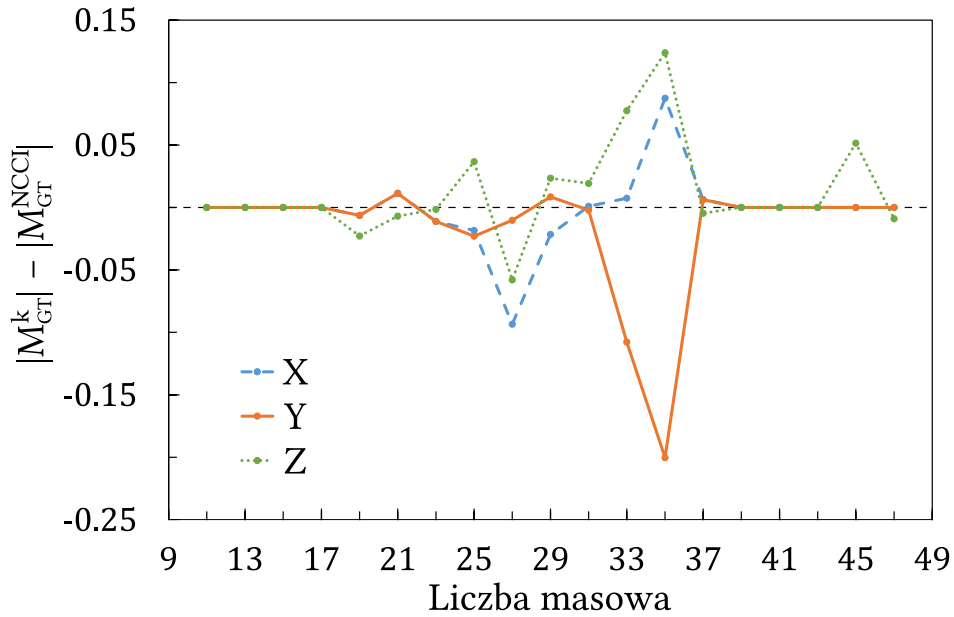
Dla przejść w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 55$ przedstawionych na wykresie 5.3 wartość czynnika skalującego q w regresji liniowej wynosi $q = 0.74(11)$ w przypadku wartości uzyskanych w ramach modelu powłokowego oraz $q = 0.74(21)$ w modelu DFT-NCCI. Należy podkreślić, że wartość q^{NCCI} uzyskano, wykluczając kłopotliwe przypadki $A = 29 - 35$ oraz $A = 53 - 55$ zaznaczone na wykresie pomarańczowymi trójkątami. Zarówno w modelu powłokowym jak i w modelu jądrowego funkcjonału gęstości

rozkład wartości reszt wokół zera:

$$\text{res}_i = M_{\text{GT},i}^{\text{EXP}} - \bar{q}^{\text{TH}} M_{\text{GT},i}^{\text{TH}} \quad (5.21)$$

jest w bardzo dobrym przybliżeniu normalny. Wobec tego regresja liniowa jest uzasadniona. Niemal dwukrotnie większy niż w modelu powłokowym rozrzut pochodzi przede wszystkim od wartości przejść w jądrach z powłoki *pf*.

Jest niezwykle interesujące, iż wartości parametru q wyznaczone w dwóch różnych modelach są identyczne. Taka informacja sugeruje, że za efektem *quenchingu* nie stoją korelacje związane ze wzbudzeniami rdzenia sugerowane przez autorów rachunków modelu powłokowego. Taką hipotezę można wykluczyć ze względu na oczywiste różnice pomiędzy prezentowanymi modelami. W podejściu jądrowego funkcjonału gęstości funkcja falowa posiada korelacje związane z tzw. polaryzacją rdzenia, jak również domieszki z wyżej leżących powłok. To spostrzeżenie oraz fakt, iż pokazano, że wpływ kanału rozpadu Gamowa-Tellera przez rezonans Δ na efekt *quenchingu* jest zanedbywalny [50] pozwoliły odrzucić stawiane hipotezy. Takie wykluczenie sugeruje zatem wpływ wielociałowych prądów. W istocie, w 2019r. w *Nature* ukazała się praca [47], w której przedstawiono rachunki *ab initio* na podstawie których pokazano, że dodanie dwuciałowych prądów naładowanych konsystentnie z oddziaływaniem trójciałowym, którego brakowało w obliczeniach modelu powłokowego jak i w rachunkach jądrowego funkcjonału gęstości, powoduje zwiększenie parametru q z $q = 0.80$ do $q = 0.96$ w powłoce *sd* oraz z $q = 0.75$ do $q = 0.92$ w dolnej powłoce *pf*.



Rys. 5.4: Residua elementów macierzywych Gamowa-Tellera wyznaczonych dla rozwiązań z orientacją prądu cząstki walencyjnej wzdłuż osi *OX* (niebieska przerywana linia), wzdłuż osi *OY* (pomarańczowa linia ciągła) oraz wzdłuż osi *OZ* (zielona linia kropkowa) względem wartości elementu macierzowego Gamowa-Tellera wyznaczonego w ramach zmieszania konfiguracji o różnych orientacjach metodą DFT-NCCI

Prezentowane wyżej wyniki obliczeń teoretycznych obarczone są oczywiście niepewnością teoretyczną. Podobnie jak w przypadku obliczeń związanych z poprawką izospinową,

δ_{ISB} , teoretyczny błąd elementu macierzowego Gamowa-Tellera ma co najmniej trzy źródła:

1. wybór rozwiązania HF, w którym orientacja prądu generowanego przez cząstkę walencyjną jest ustawiona wzdłuż osi OY
2. ograniczenie bazy do 12 powłok oscylatora harmonicznego
3. ograniczenie przestrzeni konfiguracyjnej w modelu DFT-NCCI do 3-5 najniżej leżących wzbudzeń

Na wykresie 5.4 przedstawiono residua elementów macierzowych Gamowa-Tellera obliczane między konfiguracjami o określonym kierunku prądu (momentu pędu) generowanego przez cząstkę walencyjną $M_{\text{GT}}^{k=X,Y,Z}$ a rezultatem zmieszania wszystkich dostępnych konfiguracji stanu podstawowego $M_{\text{GT}}^{\text{NCCI}}$. Poza szczególnymi przypadkami przejść w jądrach $A = 33$ oraz $A = 35$ najmniejsze odchylenia od wartości $M_{\text{GT}}^{\text{NCCI}}$ obserwujemy dla M_{GT}^Y . Ograniczając się do tak zorientowanych konfiguracji, popełniamy błąd wynoszący średnio ok. 0.5% wartości elementu macierzowego.

Błąd ze względu na ograniczenie bazy do 12 powłok oscylatora harmonicznego jest niemal pomijalny i nie przekracza 1%.

Uwzględnienie niskoleżących wzbudzeń 1p-1h w procedurze DFT-NCCI w niewielkim stopniu, w zakresie nie przekraczającym 5% wartości elementu macierzowego, zmienia wyniki MR DFT. Wyjątkiem są dwa przejścia: $^{35}\text{Ar} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$ gdzie uwzględnienie mieszania konfiguracji powoduje wzrost elementu macierzowego o ok. 13% oraz przejście $^{45}\text{V} \rightarrow ^{45}\text{Ti}$. W tym drugim przypadku zmieszanie stanu podstawowego z najniżej leżącym wzbudzeniem cząstka-dziura powoduje wzrost elementu macierzowego z wartości 0.895 do 1.256. Reasumując, przeprowadzone obliczenia sugerują, że średni błąd z tytułu ograniczenia przestrzeni konfiguracyjnej do 3-5 konfiguracji nie powinien przekroczyć kilku procent.

W chwili obecnej nie da się oszacować w sposób wiarygodny systematycznej niepewności wynikającej z przyjęcia konkretnej parametryzacji SV oddziaływania Skyrme'a ze względu na brak możliwości użycia alternatywnego oddziaływania.

§3. Funkcja odpowiedzi na wymuszenie spinowo-izospinowe

Model DFT-NCCI, pod względem funkcjonalnym, jest zbliżony do modelu powłokowego. Jego niewątpliwą zaletą w stosunku do modelu powłokowego jest możliwość zastosowania do badania struktury dowolnego jądra z tablicy nuklidów. Ta uniwersalność wynika z użycia do jego konstrukcji funkcjonału gęstości ze spontanicznie naruszonymi symetriami, generowanego stosunkowo prostym oddziaływaniem, którego parametry dopasowane są globalnie. To samo oddziaływanie jest używane zarówno na poziome budowania przestrzeni konfiguracyjnej modelu jak i diagonalizacji w procedurze mieszania konfiguracji. W tym sensie zaprezentowane podejście jest wolne od parametrów. Cena jaką płacimy za uniwersalność to mniejsza dokładność przewidywań w porównaniu z przewidywalnością modelu powłokowego, który jest z dużą precyzją dopasowany lokalnie do określonej

przestrzeni walencyjnej.

Modele DFT-NCCI i powłokowy są modelami o zbliżonej funkcjonalności, ale zbudowane są na zupełnie innych zasadach. W tym sensie można je uznać za komplementarne. W tym kontekście analiza porównawcza obu modeli jest niezwykle cenna. Przykładem takiej analizy są prezentowane wcześniej obliczenia dla superdozowlonych przejść beta. Zgodność przewidywań modelu DFT-NCCI i modelu powłokowego w kontekście analizy elementu macierzowego V_{ud} uwiarygadnia teoretyczne rachunki poprawek izospinowych i w konsekwencji testy Modelu Standardowego metodami jądrowymi. Innym przykładem są badania nad efektem redukcji elementu macierzowego Gamowa-Tellera zaprezentowane w poprzednim paragrafie. Analiza porównawcza obu modeli pozwoliła wykluczyć stawiane wcześniej hipotezy, wedle których za *quenching* odpowiedzialne jest zawężenie przestrzeni modelowej i jednocześnie przychyliła się do wytłumaczenia tego efektu brakiem prądów wielociałowych.

W niniejszym paragrafie przedstawione zostaną pierwsze wyniki obliczeń w modelu DFT-NCCI funkcji odpowiedzi jądra na wymuszenie spinowo-izospinowe. Funkcja odpowiedzi spinowo-izospinowej, inaczej odpowiedzi Gamowa-Tellera, dostarcza wartościowych informacji zarówno dotyczących oddziaływań elektroslabych jak i bezpośrednio struktury jądrowej. U podstaw modelu DFT-NCCI leży efekt spontanicznego naruszenia symetrii, co otwiera możliwość dyskusji złożonych schematów wynikających ze struktury funkcji odpowiedzi w języku prostych zdeformowanych stanów jednocząstkowych Nilssona, będących fundamentem modelu DFT-NCCI. W tym sensie rachunki modelu DFT-NCCI mogą być potraktowane jako komplementarne do modelu powłokowego [179, 180, 181], modelu *coupled cluster* [171], czy też kwazicząstkowego przybliżenia faz przypadkowych (QRPA) [182, 183, 184, 185, 186, 187]. W kontekście obliczeń funkcji odpowiedzi Gamowa-Tellera należy przywołać jeszcze rachunki dotyczące rozpadu beta w powłoce pf w modelu VAM-PIR [188, 189, 190], w którym wykorzystuje się funkcje falowe pola średniego z przywróconymi symetriami. Pomimo pewnego podobieństwa pomiędzy modelami DFT-NCCI oraz VAMPIR wynikającego z zastosowania technik rzutowych do zdeformowanych stanów pola średniego ich całościowa konstrukcja tj. przestrzeń modelowa oraz sposób korelowania układu kwantowego różni się w sposób znaczący.

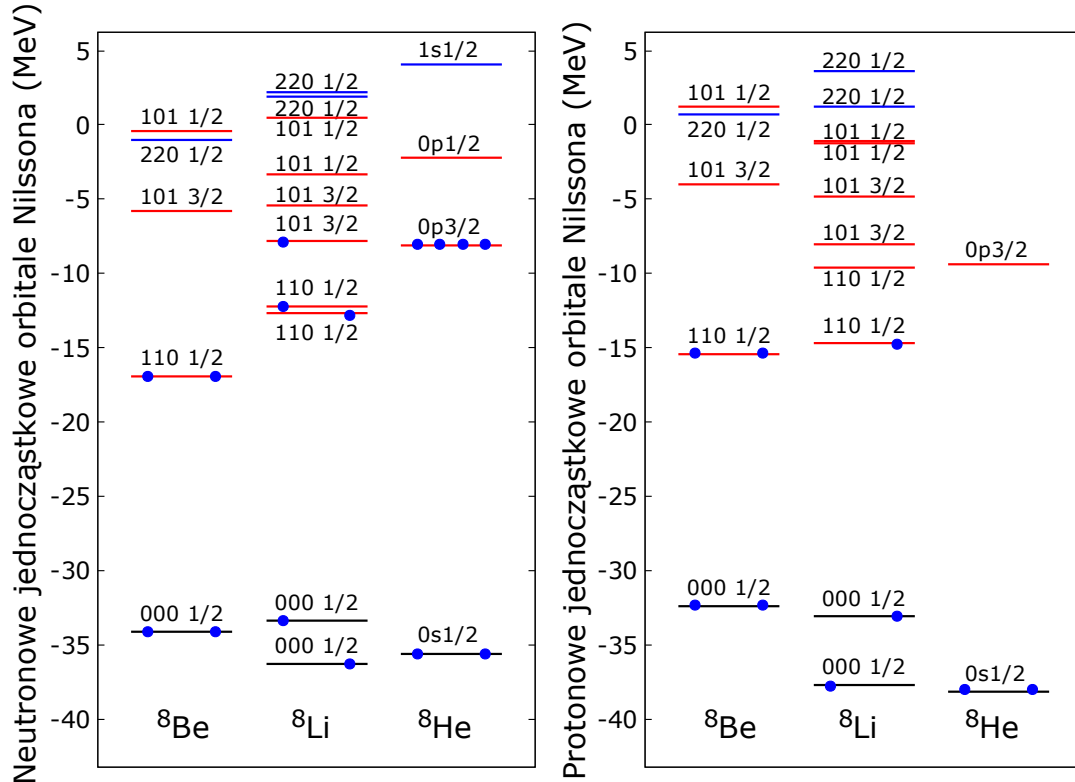
W niniejszym paragrafie przedstawimy dyskusję funkcji odpowiedzi Gamowa-Tellera:

1. w bardzo lekkich jądrach o liczbie masowej $A = 8$. Ze względu na niewielką liczbę konfiguracji wzbudzonych w powłoce p jest to świetna okazja do przedyskutowania reguły sum Ikedy.
2. w jądrze ^{24}Mg ze środka powłoki sd
3. oraz w superdozwołonym przejściu $^{100}\text{Sn} \rightarrow ^{100}\text{In}$, dla którego zmierzono największy element Gamowa-Tellera w całej tablicy nuklidów.

We wszystkich przypadkach przeprowadzono również dyskusję, w której funkcje falowe reprezentujące poszczególne elementy widma rozłożono w bazie rozpinającej przestrzeń konfiguracji dostępnych w mieszanii DFT-NCCI. Taki rozkład pozwala na interpretację poszczególnych elementów widma w języku wzbudzeń w obrębie nilssonowskich stanów jednocząstkowych.

3.1 Niskoenergetyczna struktura jądrowa oraz rozkład nasilenia rozpadu Gamowa-Tellera w jądrach o liczbie masowej $A = 8$

W poniższej dyskusji uwagę skupimy na strukturze oraz własnościach rozpadu beta w bardzo lekkich jądrach ${}^8\text{Be}$, ${}^8\text{Li}$ oraz ${}^8\text{He}$. Jądra z powłoki p stanowią doskonały materiał do przetestowania zależności modelu od przestrzeni konfiguracyjnej używanej w podejściu DFT-NCCI. Z drugiej strony należy zwrócić uwagę, że bezpośrednie porównanie do danych doświadczalnych może być mylące. Otóż wyznaczona w przybliżeniu pola średniego funkcja falowa jest rozłożona w bazie oscylatora harmonicznego. W konsekwencji nie opisuje korelacji właściwych dla tzw. układów otwartych, dla których sprzężenie do *continuum* może mieć kluczowe znaczenie w opisie struktury jądrowej [191, 192]. Do takich efektów należą: klasteryzacja cząstek w jądrze, niskoleżące stany rezonansowe, czy też rozpady jąder w kanale emisji cząstek konkurującym z elektroslabym rozpadem beta. Naturalnie ma to wpływ na eksperymentalne widmo stanów i na rozkład nasilenia Gamowa-Tellera.



Rys. 5.5: Lewy (prawy) panel przedstawia neutronowe (protonowe) poziomy jednocząstkowe Nilssona w stanach podstawowych jąder ${}^8\text{Be}$, ${}^8\text{Li}$ oraz ${}^8\text{He}$. Orbitale są oznaczone przybliżonymi liczbami kwantowymi Nilssona. Pełne kółka oznaczają stany obsadzone a kolory różnicują orbitale pochodzące z różnych podpowłok sferycznych.

Zacznijmy dyskusję od budowy przestrzeni konfiguracyjnej. Tak jak w poprzednich przypadkach obliczamy w procedurze samozgodnej stan podstawowy. Uzyskane w ten sposób jednocząstkowe poziomy Nilssona numerowane dodatkowo za pomocą liczby kwantowej symetrii sygnatury służą do konstrukcji stanów wzbudzonych. W pierwszej kolejności, zgodnie z przepisem podanym w rozdz. III§8, budujemy przestrzeń konfiguracyjną ze wzbudzeń $1p-1h$ następnie, jeżeli trzeba, uzupełniamy ją niskoleżącymi wzbudzeniami

2p-2h.

Na Rys. 5.5 pokazano neutronowe (po lewej) oraz protonowe (po prawej) jednocząstkowe stany Nilssona wyznaczone dla stanów podstawowych w ^8Be , ^8Li oraz ^8He . Należy zwrócić uwagę, że konfiguracje stanów podstawowych w ^8Be i w ^8Li są zdeformowane, podczas gdy kształt jądra ^8He jest sferyczny. Zniesienie degeneracji Kramersa w ^8Li jest spowodowane złamaniem symetrii odwrócenia w czasie w polu średnim.

W przypadku jądra ^8Be o równej liczbie protonów i neutronów przestrzeń konfiguracyjną budujemy ze stanu podstawowego oraz z 4 dostępnych $|N=1n_z\Lambda\Omega\pm\rangle$ uszeregowanych oraz antyuszeregowanych wzbudzeń 1p-1h, gdzie $\pm$ oznacza sygnaturę $r = \pm i$. Okazuje się jednak, że jedna z tych konfiguracji – antyuszeregowane wzbudzenie do pierwszego nilssonowskiego stanu jednocząstkowego $|101\ 3/2\rangle$ – nie zbiega się w procedurze iteracyjnej Hartree’ego-Focka. Ten brak, jak się okaże można jednak zastąpić przez skorelowanie układu dodatkowymi wzbudzeniami typu 2p-2h. Zatem przestrzeń konfiguracyjna jądra ^8Be składa się ze stanu podstawowego, 2 uszeregowanych wzbudzeń 1p-1h, 1 antyuszeregowanego wzbudzenia 1p-1h oraz 3 energetycznie najniższych leżących wzbudzeń 2p-2h.

W magicznym jądrze ^8He przestrzeń konfiguracyjna składa się ze stanu podstawowego oraz z 4 neutronowych wzbudzeń 1p-1h.

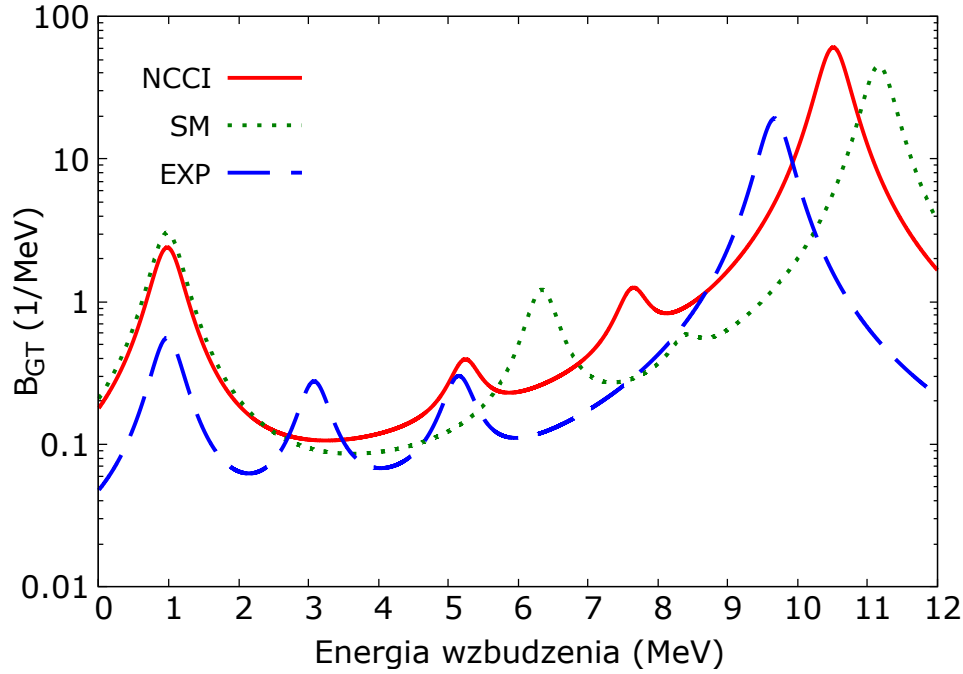
W nieparzysto-nieparzystym jądrze ^8Li stan podstawowy reprezentowany jest przez dwa stany uszeregowany oraz antyuszeregowany zbudowane przez obsadzenie najniższych stanów w studni potencjału do poziomu Fermiego. Następnie, trzymając dwa neutrony z odwrotną sygnaturą (sparowane) na najniższym dostępnym orbitalu Nilssona, wyznaczamy konfiguracje $|\nu\rangle \otimes |\pi\rangle$, wzbudzając niesparowany neutron lub proton na wszystkie orbitale Nilssona z powłoki p . W kolejnym kroku rozrywamy parę neutronową i budujemy całkowicie niesparowane konfiguracje wzbudzone. Takie konfiguracje okazują się być wysoko wzbudzone przez co trudniejsze do uzbieżnienia w procedurze iteracyjnej. W dyskusji związanej z regułą sum Ikedy, czy też rozkładem nasilenia Gamowa-Tellera kluczową rolę pełnią konfiguracje o niewielkiej liczbie kwantowej K . Uzbieżniliśmy dwa rozwiązania z rozerwaną parą spełniające ten warunek. Jak się okaże w dalszej dyskusji wpływ tych konfiguracji na niskoenergetyczną strukturę jądrową jest zaniedbywalny, jednak przy dyskusji rezonansu Gamowa-Tellera bardzo istotny.

Wszystkie konfiguracje zawarte w przestrzeniach konfiguracyjnych jąder ^8Be , ^8Li , and ^8He zostały wyszczególnione w Tab. 5.2 i oznaczone przy użyciu sygnatury oraz liczb kwantowych Nilssona $|Nn_z\Lambda\Omega\pm\rangle$ odnoszących się do niesparowanych nukleonów walencyjnych. W tabeli przedstawiono również deformację kwadrupolową poszczególnych konfiguracji sparametryzowaną przez β_2 oraz γ . Wartości $\gamma \neq 0^\circ$ i $\gamma \neq 60^\circ$ oznaczają rozwiązanie trójosiowe. Liczb kwantowych Nilssona używamy nie tylko do zdeformowanych konfiguracji, ale również do tych bliskich kształtowi sferycznemu. W lekkich jądrach, w szczególności w ^8Li , jest to uzasadnione ze względu na wykazywanie przezeń bardzo osobliwego izowektorowego kształtu. Mianowicie, weźmy za przykład niemalże sferyczną konfigurację nr 6. Jest ona superpozycją rozkładu gęstości neutronowej w kształcie *oblate* oraz gęstości protonowej w kształcie *prolate*. W przypadku konfiguracji nr 5 oraz 8 rozkład gęstości ma kształt *prolate* dla neutronów oraz *oblate* dla protonów. Konfiguracje nr 7, 9 oraz 10 są z kolei zbudowane na prawie sferycznym rozkładzie gęstości protonowej

Tabela 5.2: Samozgodne konfiguracje średniopolowe w jądrach ^8He , ^8Be oraz ^8Li . Konfiguracje wyszczególniono zgodnie z ich energią (indeks i) i oznaczono przybliżonymi liczbami kwantowymi Nilssona wraz z sygnaturą niesparowanej cząstki i dziury walencyjnej. Następne 4 kolumny zawierają informacje na temat własności poszczególnych konfiguracji: energię HF w MeV, deformację kwadрупolową przedstawioną przy użyciu parametrów β_2 oraz γ oraz całkowite uszeregowanie $\langle j \rangle$ wraz z orientacją w układzie wewnętrznym.

i	$ ^8\text{He}; \varphi_i\rangle$	E_{HF}	β_2	γ	$\langle j \rangle$
1	$\nu p_{3/2} \otimes \pi s_{1/2}$	-37.26	0	0°	0
2	$ \nu 101\ 3/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 1/2 +\rangle^1$	-32.47	0.14	0°	2_Z
3	$ \nu 101\ 3/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 1/2 -\rangle^1$	-30.81	0.03	60°	1_Y
4	$ \nu 110\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 1/2 +\rangle^1$	-30.04	0.03	60°	0_Y
5	$ \nu 110\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 1/2 -\rangle^1$	-29.13	0.02	0°	1_Z
i	$ ^8\text{Be}; \varphi_i\rangle$	E_{HF}	β_2	γ	$\langle j \rangle$
1	$ \nu 110\ 1/2\rangle^2 \otimes \pi 110\ 1/2\rangle^2$	-48.66	0.68	0°	0_Z
2	$ \nu 110\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 3/2 +\rangle^1$	-38.87	0.40	0°	1_Z
3	$ \nu 110\ 1/2 -\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 1/2 +\rangle^1$	-34.08	0.39	0°	1_Y
4	$ \nu 110\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 1/2 +\rangle^1$	-31.63	0.27	3°	0.7_Z
5	$ \nu 110\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 3/2 +\rangle^1$	-36.81	0.20	60°	0_Z
	$ \pi 110\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \pi 101\ 3/2 +\rangle^1$				
6	$ \nu 110\ 1/2\rangle^{-2} \otimes \nu 101\ 3/2\rangle^2$	-35.74	0.11	5°	0_Z
7	$ \nu 110\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \nu 101\ 3/2 +\rangle^1$	-34.28	0.12	0°	2_Z
	$ \pi 110\ 1/2 +\rangle^{-1} \otimes \pi 101\ 3/2 +\rangle^1$				
i	$ ^8\text{Li}; \varphi_i\rangle$	E_{HF}	β_2	γ	$\langle j \rangle$
1	$ \nu 101\ 3/2 +\rangle \otimes \pi 110\ 1/2 +\rangle$	-39.08	0.38	0°	1_Z
2	$ \nu 101\ 3/2 +\rangle \otimes \pi 110\ 1/2 -\rangle$	-39.03	0.36	0°	2_Z
3	$ \nu 101\ 1/2 +\rangle \otimes \pi 110\ 1/2 +\rangle$	-34.04	0.36	0°	1_Z
4	$ \nu 101\ 1/2 -\rangle \otimes \pi 110\ 1/2 +\rangle$	-33.44	0.35	0°	0_Z
5	$ \nu 110\ 1/2 +\rangle \otimes \pi 110\ 1/2 -\rangle$	-36.51	0.07	60°	0_Z
6	$ \nu 101\ 3/2 +\rangle \otimes \pi 101\ 3/2 +\rangle$	-35.68	0.03	0°	0_Y
7	$ \nu 101\ 3/2 +\rangle \otimes \pi 101\ 1/2 -\rangle$	-32.34	0.12	0°	2_Z
8	$ \nu 101\ 1/2 +\rangle \otimes \pi 110\ 1/2 +\rangle$	-31.19	0.06	60°	1_Z
9	$ \nu 101\ 3/2 +\rangle \otimes \nu 110\ 1/2 +\rangle$	-29.25	0.04	60°	0_Y
	$\otimes \nu 101\ 1/2 -\rangle \otimes \pi 101\ 3/2 -\rangle$				
10	$ \nu 101\ 3/2 +\rangle \otimes \nu 110\ 1/2 +\rangle$	-29.06	0.07	60°	1_Y
	$\otimes \nu 101\ 1/2 +\rangle \otimes \pi 101\ 3/2 -\rangle$				

(nr 7), neutronowej (nr 9 i 10) oraz zdeformowanej gęstości odpowiednio neutronowej lub protonowej. Należy zwrócić uwagę, że dyskutowany izowektorowy efekt kształtu prowadzi do różnego uporządkowania względem liczby kwantowej Ω neutronowych i protonowych poziomów jednocząstkowych.



Rys. 5.6: Rozkład nasilenia Gamowa-Tellera stanów 1^+ w jądrze ^8Li w skali logarytmicznej przedstawiony przy użyciu funkcji Lorentza z szerokością połówkową $\Gamma = 0.5\text{MeV}$. Przerywana linia przedstawia dane doświadczalne uzyskane przy użyciu teorii macierzy R [193, 194]. Linia kropkowaną oznaczono wyniki uzyskane w modelu powłokowym [193], natomiast linią ciągłą obliczenia w modelu DFT-NCCI.

Rozpad beta ze stanu podstawowego 0^+ jądra ^8He populuje 4 stany 1^+ w ^8Li w oknie energetycznym zdeterminowanym przez eksperymentalną wartość Q_β . Poza energetycznie najniższym leżącym stanem 1^+ , pozostałe 3 rozpadają się w różnych procesach emisji cząstek. Fakt ten sprawia, że eksperymentalne wyznaczenie zarówno energii jak i wartości B_{GT} rozpadającego się jądra będącego w jednym z tych stanów jest niezwykle skomplikowane. W istocie, doświadczalne wyznaczenie charakterystyki rozpadu beta jądra ^8He oparte jest o wieloparametrowy formalizm macierzy R , którego początkowe wartości parametrów wyznaczane są przy użyciu rachunków modelu powłokowego. Parametry są wariowane tak, aby najlepiej dopasować się do danych czasu życia, współczynnika rozgałęzienia oraz widma energetycznego cząstek opóźnionych [193, 195, 196]. Uwzględnienie kanału emisji cząstek redukuje eksperymentalną wartość B_{GT} stanów rezonansowych 1^+ w ^8Li i przesunę ich energie (centroidy) w porównaniu z początkowymi wartościami wyznaczonymi w modelu powłokowym. Największy efekt widoczny jest dla rezonansu Gamowa-Tellera p. Rys. 5.6 – 4 stanu 1^+ , który rozpada się zarówno w kanale emisji neutronu jak i, z mniejszym prawdopodobieństwem, trytu.

Na wykresie 5.6 przedstawiono funkcję odpowiedzi Gamowa-Tellera dla rozpadu stanu podstawowego 0^+ ^8He standardowo uciągniętą rozkładem Lorentza o szerokości połówkowej

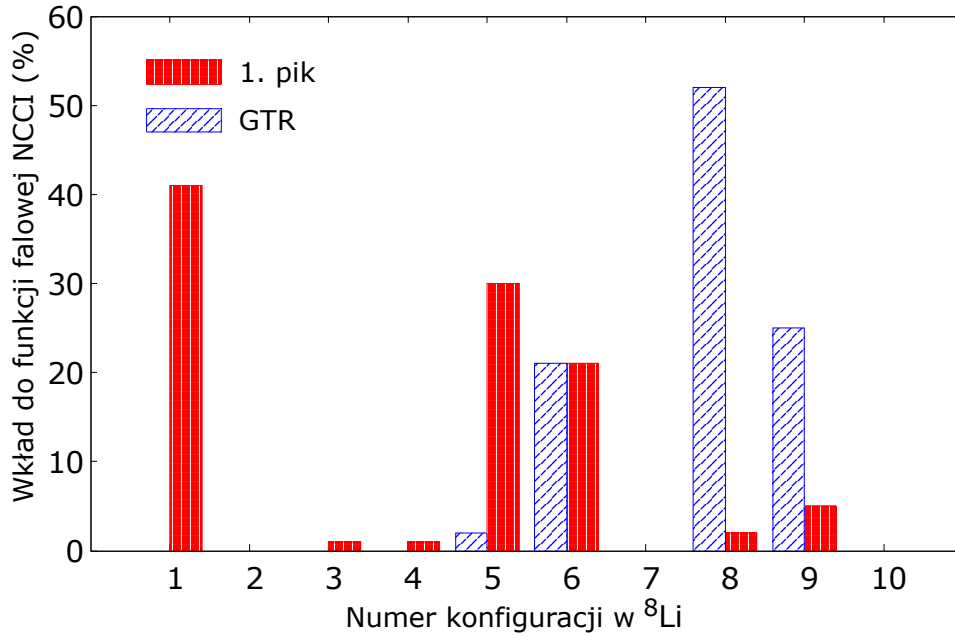
$\Gamma = 0.5$ MeV. Maksima lokalne rozkładu odzwierciedlają energie stanów wzbudzonych 1^+ populowanych przez rozpad Gamowa-Tellera stanów w jądrze ^8Li . Rozkład został znormalizowany do pierwszego, związanego stanu 1^+ . Taką normalizację przyjmuje się ze względu na brak dodatkowych kanałów rozpadu tego stanu.

Model DFT-NCCI przewiduje, że energia stanu podstawowego 2^+ w jądrze ^8Li wynosi -41.9 MeV, co różni się od wartości doświadczalnej jedynie o ~ 0.6 MeV. Rezonansowe maksimum w widmie DFT-NCCI jest przesunięte o ~ 1 MeV w kierunku wyższych energii w porównaniu z widmem eksperymentalnym. Podobnie z drugim i trzecim maksimum przesuniętym mniej więcej o 2 MeV względem energii doświadczalnych. Wysokość maksimów jest przeszacowana w szczególności w przypadku rezonansu Gamowa-Tellera. Naturalnie tak dużej różnicy nie da się wyjaśnić na gruncie opisanej w poprzednim paragrafie teorii redukcji elementu macierzowego przez uwzględnienie prądów wielociałowych, tym bardziej, że w lekkich jądrach ich wkład jest niewielki a parametr *quenchingu* jedynie nieznacznie różni się od $q = 1$. Obserwowaną rozbieżność w większości można wytłumaczyć brakiem sprzężenia w modelu DFT-NCCI do kanałów emisji cząstek. W tym sensie prezentowane wyniki mogą służyć jako dane wejściowe do macierzy R i bezpośrednio porównane z rachunkami modelu powłokowego używanymi w analizie danych doświadczalnych. Takie porównanie, patrz Rys. 5.6, pokazuje, że rozkład nasilenia Gamowa-Tellera uzyskany w obu modelach jest bardzo zbliżony. Jest to bardzo optymistyczny wniosek w szczególności ze względu na fakt, iż w modelu DFT-NCCI nie ma wolnych parametrów dopasowywanych do danych doświadczalnych w przeciwieństwie do rachunków modelu powłokowego [197]. Ponadto, najlżejszym jądrem podwójnie magicznym służącym do dopasowania parametrów Skyrme’a jest jądro ^{16}O a same rachunki DFT są uważane za niedokładne dla lżejszych jąder. Naturalnie, dyskutowana rozbieżność może mieć również swoje źródło w nieuwzględnieniu oddziaływań trójciałowych w modelu NCCI ¹. Jak pokazano w rachunkach *ab initio* siły trójciałowe odgrywają kluczową rolę w wyjaśnieniu zjawiska redukcji elementu macierzowego Gamowa-Tellera w jądrze ^{14}C [198].

Podejście NCCI bazujące na formalizmie DFT daje unikalną możliwość interpretacji rozkładu nasilenia Gamowa-Tellera w języku intuicyjnych średniopolowych konfiguracji. Taka analiza może być szczególnie użyteczna w przypadku jąder zdeformowanych, które można opisać przy użyciu nilssonowskich liczb kwantowych. Zawartość n -tej *hartreefockowskiej* konfiguracji w k -tym stanie własnym modelu DFT-NCCI o danym I oraz T_z , a zatem w k -tym lokalnym maksimum funkcji odpowiedzi dana jest wyrażeniem (3.100).

Wykres 5.7 przedstawia rozkład funkcji falowej pierwszego oraz czwartego stanu 1^+ w ^8Li w języku wszystkich średniopolowych konfiguracji, które zostały wyszczególnione w tabeli 5.2. Jak pokazano na wykresie, pierwszy stan 1^+ jest mieszaniną silnie zdeformowanego uszeregowanego stanu podstawowego $|^8\text{Li}; \varphi_1\rangle$ z dwoma słabo zdeformowanymi wzbudzeniami protonowymi $i = 5, 6$. Pierwsze z tych wzbudzeń ma kształt *oblate*, drugie zaś kształt *prolate*. Stan rezonansowy jest skoncentrowany wokół słabo zdeformowanej konfiguracji o kształcie *oblate* $|^8\text{Li}; \varphi_8\rangle$. Konfiguracja ta odpowiada uszeregowanemu wzbudzeniu ze stanu podstawowego, w którym neutron obsadza $|\nu 101\ 3/2\ +\rangle$ do spinorbitalnego partnera $|\nu 101\ 1/2\ +\rangle$. Wzbudzenie powoduje drastyczną zmianą kształtu gęstości neutronowej ze zdeformowanej osiowo na niemal sferyczną. W tym miejscu warto przypo-

¹W funkcjonale brakuje jawnych członów opisujących oddziaływania trójciałowe. Naturalnie korelacje związane z tymi siłami są uwzględniane w parametrach Skyrme’a.



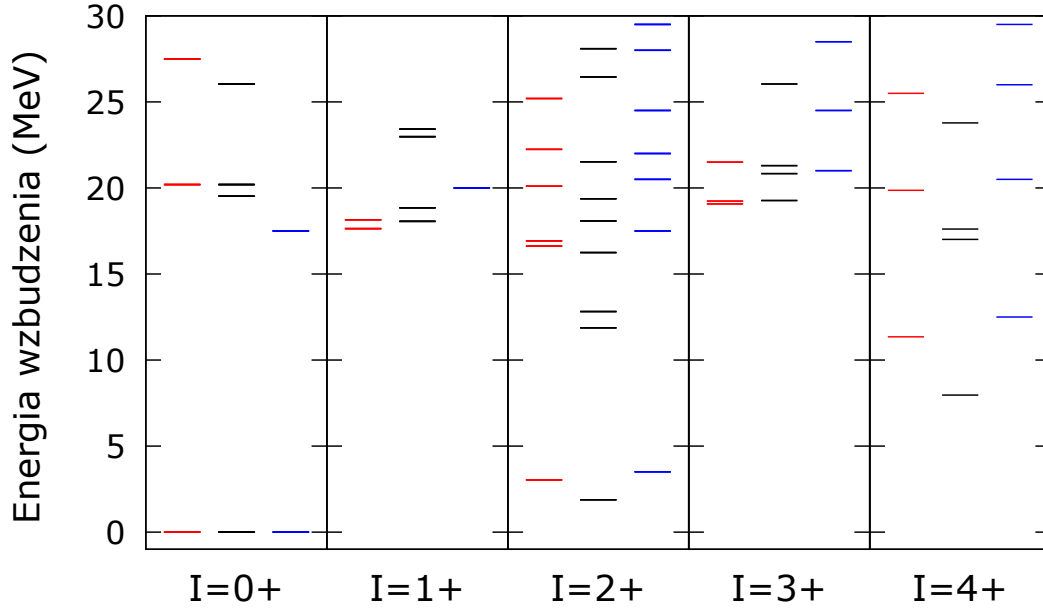
Rys. 5.7: Rozkład funkcji falowej pierwszego i czwartego stanu (rezonansu GT) 1^+ w ^8Li w języku konfiguracji średniopolowych HF, φ_n , uwzględnionych w przestrzeni konfiguracyjnej. Na osi odciętych podano numery konfiguracji wyszczególnionych w tabeli 5.2.

mniej, że kształt gęstości neutronowej rozpadającego się jądra ^8He jest sferyczny wobec czego cała przekrycia w rozpadzie Gamowa-Tellera pomiędzy tymi dwoma stanami będzie duża. Wyróżnienie konfiguracji $|^8\text{Li}; \varphi_8\rangle$ jest zatem zrozumiałe w kontekście dużego elementu macierzowego w rozpadzie beta. Domieszka stanu z rozerwaną parą $|^8\text{Li}; \varphi_9\rangle$ daje wkład do rezonansu na poziomie 25%, a 20% pochodzi od energetycznie najniższego wzbudzenia protonowego $|^8\text{Li}; \varphi_6\rangle$.

Przejdźmy do jądra ^8Be , którego stan podstawowy jest stanem rezonansowym zbudowanym z dwóch cząstek α . Jego molekularna struktura charakteryzuje się bardzo wydłużonym rozkładem gęstości, który, jak się okazuje, jest świetnie odtworzony przez rachunki pola średniego przewidujące nagły wzrost deformacji z $\beta_2 = 0.38$ w ^8Li do $\beta_2 = 0.68$ w ^8Be . Jednakże, ani model pola średniego, ani jego rozszerzenie w postaci modelu DFT-NCCI nie odtwarzają w pełni korelacji związanych z klasteryzacją tego stanu. Otóż wyznaczony w rachunkach DFT-NCCI stan podstawowy ma energię równą -52.8 MeV, wyższą o 3.7 MeV w porównaniu z wartością eksperymentalną. Dla porównania, różnica między teoretyczną i doświadczalną energią stanu podstawowego w sąsiednim ^8Li to jedynie 0.6 MeV.

Na wykresie 5.8 przedstawiono niskoenergetyczną strukturę jądrową ^8Be . Poza danymi eksperymentalnymi oraz rachunkami DFT-NCCI, naniesiono również rachunki modelu NCCI bazującego na rachunkach *ab initio* [199] z oddziaływaniem JISP16. Obliczenia *ab initio* przewidują energię stanu podstawowego -57.5 MeV, a zatem 1 MeV poniżej wartości eksperymentalnej.

Jak pokazano na wykresie, rachunki DFT-NCCI całkiem dobrze odtwarzają energie stanów z nieparzystymi spinami. Poziom zgodności jest porównywalny, o ile nie lepszy,

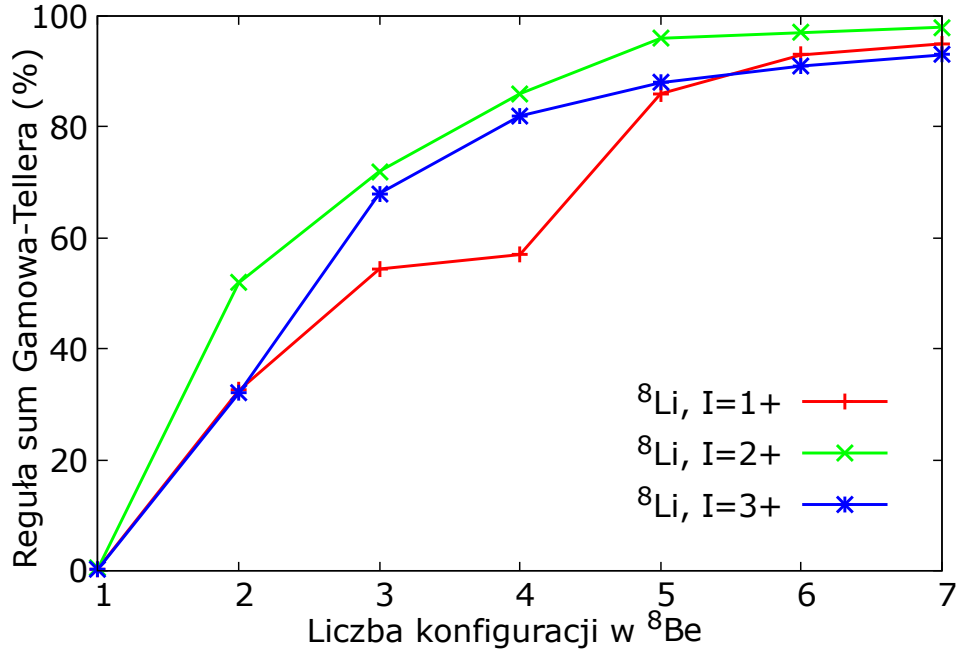


Rys. 5.8: Struktura jądrowa w jądrze ${}^8\text{Be}$ poniżej 30 MeV. Poszczególne rysunki, licząc kolejno od lewej strony, przedstawiają poziomy energetyczne o spinie $I^\pi = 0^+, 1^+, 2^+, 3^+$ oraz 4^+ . Na każdym panelu podano widma eksperymentalne (po lewej), wyznaczone w modelu DFT-NCCI (w środku) oraz w modelu *ab-initio* NCCI (po prawej) znormalizowane do stanu podstawowego.

z obliczeniami *ab initio* NCCI. Wyznaczony dublet izospinowy stanów 1^+ o energii bliskiej 24 MeV może reprezentować eksperymentalnie obserwowane dwa leżące blisko siebie stany o energii ok. 23 MeV. Nie przypisano jednak jeszcze spinów do tych stanów. Z drugiej strony stany z parzystymi spinami w naszym modelu są systematycznie związane zbyt silnie. Najniżej leżące stany 2_1^+ i 4_1^+ interpretuje się jako stany wchodzące w skład pasma rotacyjnego zbudowanego na stanie podstawowym. Wszystkie trzy mają wysokie prawdopodobieństwo rozpadu w kanale emisji cząstki α . Empiryczna wartość współczynnika $R_{4/2} \equiv E_{4_1^+}/E_{2_1^+}$ wynosi 3.75 i zalicza się tym samym do największych w całej tablicy nuklidów. W rachunkach DFT-NCCI ten stosunek wynosi $R_{4/2} = 3.77$, a zatem model odtwarza tę wartość bardzo dobrze. Oznacza to, że teoria odtwarza zmianę momentu bezwładności w paśmie z dobrą dokładnością a jednocześnie, co widać po położeniu stanów 2^+ i 4^+ , silnie przeszacowuje jego wartość.

Problemy ze zbyt dużym momentem bezwładności (stany 2_1^+ i 4_1^+ są zbyt nisko w energii) oraz z brakującymi korelacjami w wyznaczonym stanie podstawowym są widoczne w rozkładzie nasilenia Gamowa-Tellera rozpadu ${}^8\text{Li}, 2_{\text{g.s.}}^+ \rightarrow {}^8\text{Be}, 2_i^+$. Porównanie rachunków DFT-NCCI w przestrzeni 1p-1h oraz danych doświadczalnych zestawiono w Tab. 5.3. Wkład konfiguracji wzbudzonych 2p-2h jest zaniedbywalny. Nasilenie przejścia do stanów 2^+ jest wyraźnie przeszacowane. Należy jednak mieć na uwadze, że stan 2_2^+ o izospinie $T = 0$ jest stanem rezonansowym w związku z czym może silnie oddziaływać z energetycznie blisko leżącym stanem $T = 1$ 2_3^+ i w konsekwencji wpływać na nasilenie przejścia.

Reguła sum Ikedy lub reguła sum Gamowa-Tellera jest powszechnie używana jako wskaźnik poziomu zupełności używanej przestrzeni konfiguracyjnej. Przy założeniu zu-



Rys. 5.9: Reguła sum Gamowa-Tellera dla najniższych stanów $I^\pi = 0^+, 1^+, 2^+, 3^+$ w ^8Li względem ilości konfiguracji uwzględnionych w ^8Be . Konfiguracje zostały wyszczególnione w tabeli 5.2.

Tabela 5.3: Doświadczalne oraz teoretyczne energie stanów wzbudzonych trzech energetycznie najniżej położonych stanów 2^+ w ^8Be oraz odpowiadające im wartości $\log ft$. Dane doświadczalne zaczerpnięto z [200].

stan	Eksperyment		DFT-NCCI	
	E (MeV)	$\log ft$	E (MeV)	$\log ft$
$2_1^+ T = 0$	3.030	5.36	2.698	4.74
$2_2^+ T = 0$	16.626	2.93	11.869	3.54
$2_3^+ T = 1$	16.922	—	12.812	4.13

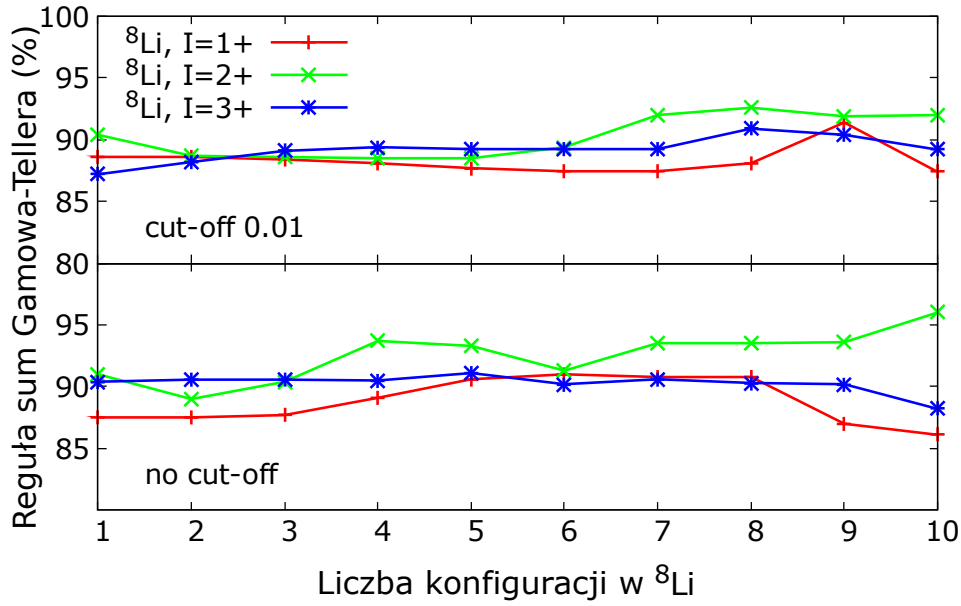
pełności przestrzeni reguła sum Ikedy jest równa:

$$\frac{1}{g_A^2} \sum_f \left[B_{\text{GT}}^-(I_i^\pi \rightarrow I_f^\pi) - B_{\text{GT}}^+(I_i^\pi \rightarrow I_f^\pi) \right] = 3(N - Z), \quad (5.22)$$

gdzie suma przebiega przez wszystkie dostępne stany $I_f = I_i + k$ z $k = 0, \pm 1$. Zredukowane prawdopodobieństwo przejścia B_{GT} , zgodnie ze wzorem (2.27), jest zdefiniowane jako:

$$B_{\text{GT}}^\pm(I_i^\pi \rightarrow I_f^\pi) = g_A^2 \frac{|M_{\text{GT}}^\pm|^2}{2I_i + 1} \quad (5.23)$$

gdzie $M_{\text{GT}}^\pm$ oznacza zredukowany element macierzowy Gamowa-Tellera. W kolejnych paragrafach przedyskutujemy regułę sum Ikedy w jądrze ^8Li w kontekście zależności od przestrzeni konfiguracyjnej w modelu DFT-NCCI. Wszystkie średniopolowe konfiguracje zostały przedstawione w Tab. 5.2. Przypomnijmy w tym miejscu, że przestrzeń kolektywna modelu jest rozpięta przez liniowo niezależne *stany naturalne* o wartościach własnych macierzy norm n_i , większych niż zadany parametr obciążenia ε , p. dyskusja w rozdz. III §8, co

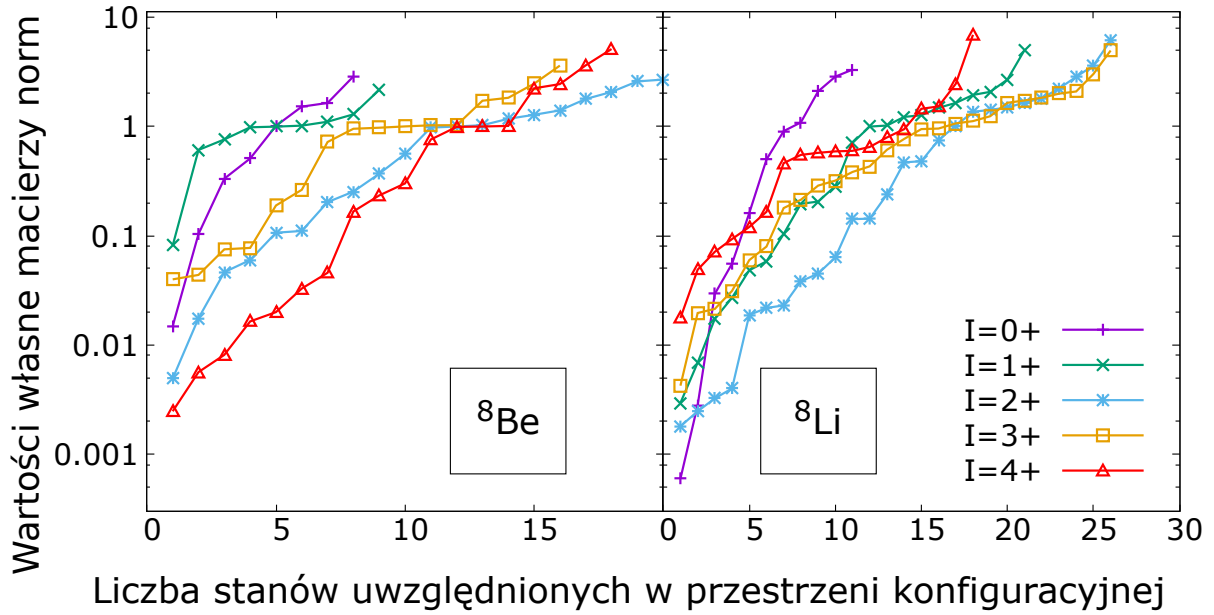


Rys. 5.10: Reguła sum Ikedy dla stanów 1_1^+ , 2_1^+ oraz 3_1^+ w ^8Li w funkcji ilości konfiguracji uwzględnionych w przestrzeni konfiguracyjnej ^8Li . Dolny (górny) panel przedstawia regułę sum wyznaczoną przy parametrze obciążenia $\varepsilon = 0$ (0.01). Szczegóły opisano w tekście.

determinuje jej wymiar.

Na wykresie 5.9 przedstawiono poziom wysycenia reguły sum Ikedy dla stanów początkowych 1_1^+ , 2_1^+ oraz 3_1^+ w jądrze ^8Li względem ilości konfiguracji w przestrzeni konfiguracyjnej stanu końcowego w ^8Be . Wartość B_{GT}^+ ustalono przy przestrzeni konfiguracyjnej zbudowanej ze wszystkich dostępnych wzbudzeń 1p-1h w jądrach ^8He oraz ^8Li p. Tab. 5.2. Z wykresu możemy wyciągnąć wniosek, że już przy 5 konfiguracjach w jądrze ^8Be reguła sum Ikedy osiąga 90% poziom wysycenia. Pozostałe konfiguracje, zbudowane na energetycznie niskoleżących wzbudzeniach 2p-2h, dostarczają kolejnych 5%. Dodatkowo przedstawione wyniki wydają się być interesujące z perspektywy nieuzbieźnionej konfiguracji 1p-1h na poziomie rozwiązania równania Hartree’ego-Focka. Okazuje się, że dyskutowane wzbudzenie do nilssonowskiego orbitalu $|101\ 3/2\rangle$ można z powodzeniem zastąpić wzbudzeniem 2p-2h do tego orbitalu.

Wykres 5.10 przedstawia regułę sum Ikedy w jądrze ^8Li i jej zachowanie ze względu na używany w procedurze DFT-NCCI parametr obciążenia ε niskich wartości własnych macierzy norm. Rachunek został przeprowadzony dla stanów 2_1^+ , 1_1^+ oraz 3_1^+ w jądrze ^8Li . Przestrzeń konfiguracyjna w jądrach ^8Be oraz ^8He zawiera wszystkie wzbudzenia 1p-1h oraz, w przypadku ^8Be , jedno dodatkowe wzbudzenie typu 2p-2h zastępujące nieuzbieźnione wzbudzenie jednocząstkowe. Wysycenie reguły sum Ikedy badano, dodając kolejne konfiguracje w jądrze ^8Li . Na dolnym rysunku przedstawiono wyniki, w których nie zastosowano żadnego obciążenia wartości własnych macierzy norm. Jak widać, do odtworzenia 90% reguły sum, niezależnie od spinu, wystarcza jedna konfiguracja reprezentująca stan podstawowy w jądrze ^8Li . Reguła sum wydaje się być nieczuła na uwzględnianie kolejnych wzbudzeń przedstawionych w Tab. 5.2. Na tej podstawie można wnioskować, że najniżej leżące stany 2_1^+ , 1_1^+ oraz 3_1^+ bardzo dobrze opisuje jedna konfiguracja reprezentująca stan



Rys. 5.11: Wartości własne macierzy norm dla stanów 0^+ , 1^+ , 2^+ , 3^+ , oraz 4^+ w jądrze ^8Be (po lewej) oraz w ^8Li (po prawej).

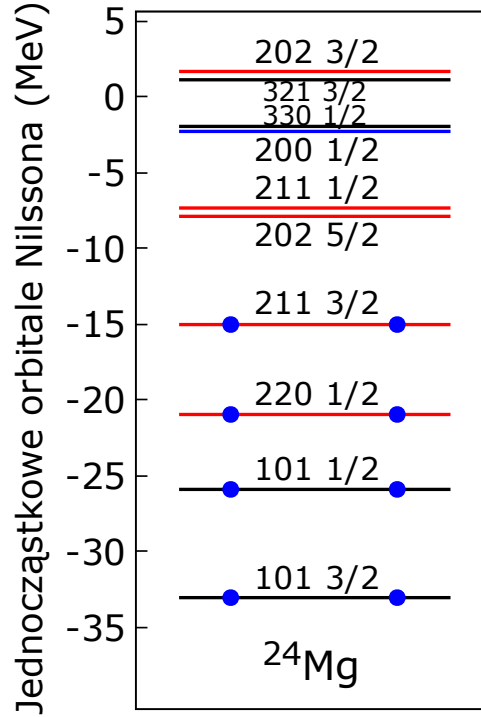
podstawowy.

W wielu przypadkach *stany naturalne* o bardzo niewielkich wartościach własnych macierzy norm prowadzą do niestabilności rachunków DFT-NCCI. Te można kontrolować przy użyciu parametru obcięcia ε . Wartość tego parametru nie jest jednak jednoznaczna. Wyboru dokonujemy na podstawie zachowania wartości własnych macierzy norm, obcinając je zgodnie z obserwowanymi nieciągłościami (skokami). W ^8Li , p. Rys. 5.11, najbardziej naturalnym wyborem jest obcięcie $\varepsilon \approx 0.01$. Taki wybór nie wpływa znacząco na regułę sum Ikedy. Można zauważyć jednak, że rachunki z parametrem obcięcia są bardziej stabilne z dodawaniem kolejnych konfiguracji w porównaniu z rachunkami bez parametru ε .

3.2 Funkcja odpowiedzi Gamowa-Tellera w jądrze ^{24}Mg

W tym podrozdziale prezentujemy wyniki dotyczące rozkładu nasilenia Gamowa-Tellera (*Gamow-Teller strength distribution*, GTSD) w jądrze ^{24}Mg populowanym w rozpadzie beta stanu podstawowego ^{24}Al o $I_{\text{g.s.}}^\pi = 4^+$.

W terminologii używanej standardowo w modelu powłokowym, ^{24}Mg jest jądrem z powłoki *sd* z ośmioma cząstkami walencyjnymi powyżej rdzenia ^{16}O . Rachunki w modelu pola średniego przewidują z drugiej strony, że jest to jądro silnie zdeformowane o parametrze $\beta_2 = 0.42$. Do opisu takiego układu idealnie nadają się zdeformowane stany jednocząstkowe Nilssona. Widmo jednocząstkowe w stanie podstawowym ^{24}Mg pokazuje Rys. 5.12. Przestrzeń konfiguracyjną skonstruujemy w oparciu o wzbudzenia pomiędzy aktywnymi poziomami Nilssona z powłoki *sd* uwzględniając stany $|220\ 1/2\rangle$, $|211\ 3/2\rangle$ oraz $|202\ 5/2\rangle$ pochodzące z podpowłoki sferycznej $d_{5/2}$, poziom $|200\ 1/2\rangle$ pochodzący ze sferycznego stanu $s_{1/2}$ oraz stany $|211\ 1/2\rangle$ i $|202\ 3/2\rangle$ pochodzące ze sferycznej podpowłoki $d_{3/2}$.



Rys. 5.12: Neutronowe poziomy jednocząstkowe w stanie podstawowym ^{24}Mg . Poziomom zostały przypisane przybliżone liczby kwantowe Nilssona. Kółkami oznaczono stany obsadzone.

Przestrzeń konfiguracyjna parzysto-parzystego jądra ^{24}Mg zbudowana według standardowych reguł. W jej skład wchodzi: stan podstawowy oraz wszystkie wzbudzenia cząstka-dziura w obrębie aktywnych poziomów Nilssona. Rzutowanie na izospin pozwala na dalsze zawężenie przestrzeni w jądrze $N = Z$ do wzbudzeń 1p-1h nukleonu jednego typu, co zwerifikowano, uwzględniając w obliczeniach konfigurację najniżej leżącego wzbudzenia protonu (konfiguracja nr 18). W rozważanym jądrze istnieje zatem 16 różnych wzbudzeń typu 1p-1h, z uszeregowanymi oraz antyuszeregowanymi spinami niesparowanych nukleonów. Dodatkowo, celem sprawdzenia stabilności rachunków, w przestrzeni uwzględniono dwa energetycznie najniżej leżące wzbudzenia 2p-2h. Wszystkie konfiguracje zostały wyszczególnione w Tab. 5.4. Wszystkie są osiowo zdeformowane, a moment pędu niesparowanych cząstek walencyjnych jest zorientowany wzdłuż osi OZ .

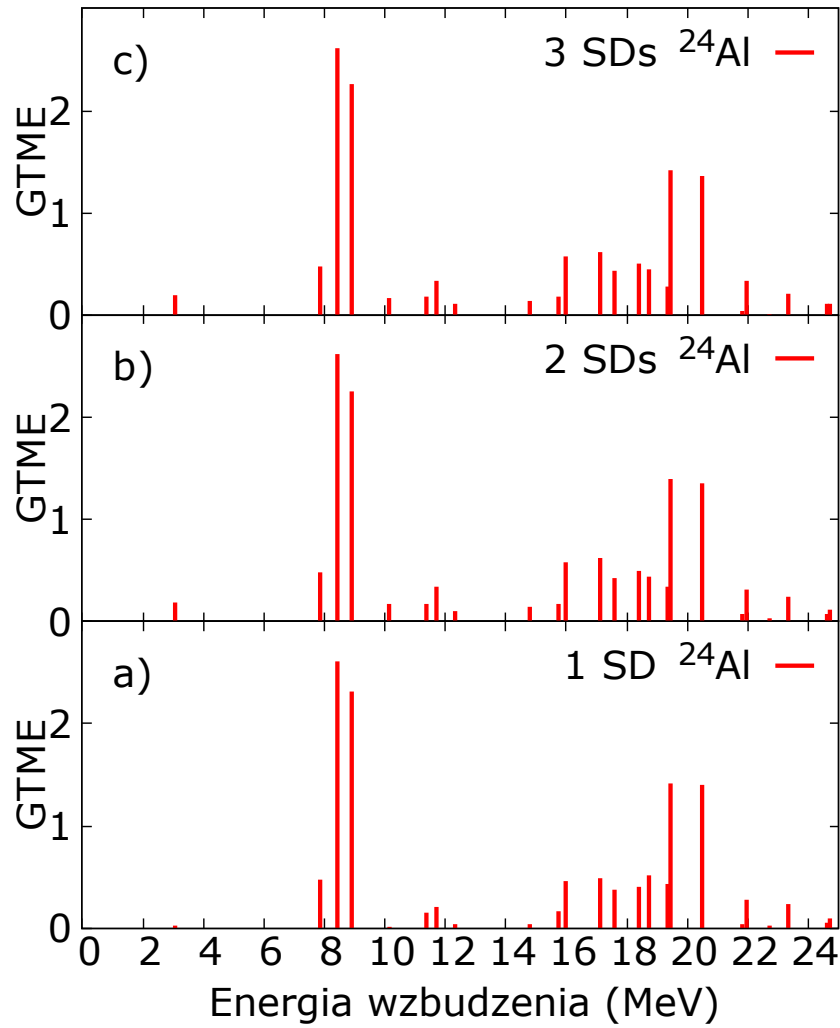
Systematyczne rachunki elementów macierzowych Gamowa-Tellera w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ pokazały, że jego wartość obliczona ze stanu podstawowego do stanu podstawowego $I^\pi \rightarrow I^\pi$ jest praktycznie nieczuła ze względu na mieszanie konfiguracji. Podobne zachowanie ujawnia się w przypadku badania rozkładu nasilenia Gamowa-Tellera zaprezentowanym na wykresie 5.13. Rysunek przedstawia obliczenia elementu macierzowego Gamowa-Tellera w rozpadzie jądra $^{24}\text{Al}, 4_{\text{g.s.}}^+ \rightarrow ^{24}\text{Mg } 4_i^+$ w modelu DFT-NCCI z 17. konfiguracjami przestrzeni modelowej w ^{24}Mg , obejmującej stan podstawowy oraz wszystkie dostępne wzbudzenia 1p-1h. Każdy panel różni się przestrzenią konfiguracyjną użytą do wyznaczenia stanu podstawowego ^{24}Al . Na rysunku (a), funkcję falową ^{24}Al wyznacza się z jednej konfiguracji uszeregowanego stanu podstawowego, następnie przestrzeń konfi-

Tabela 5.4: Konfiguracje wchodzące w skład przestrzeni konfiguracyjnej jądra ^{24}Mg . Konfiguracje oznaczono liczbami kwantowymi Nilssona. W tabeli podano również własności poszczególnych konfiguracji: ich energię HF podaną w MeV, energię względem stanu podstawowego podaną w MeV, parametr deformacji β_2 oraz magnetyczną liczbę kwantową w układzie wewnętrznym K wraz z jej orientacją.

i	$ ^{24}\text{Mg}; i\rangle$	E_{HF}	ΔE	β_2	K
1	g.s.	-194.33	0	0.42	0
2	$ \nu 211\ 3/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 5/2-\rangle^1$	-187.92	6.41	0.34	1_Z
3	$ \nu 211\ 3/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 5/2-\rangle^1$	-187.25	7.08	0.34	4_Z
4	$ \nu 211\ 3/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 211\ 1/2-\rangle^1$	-187.46	6.87	0.43	2_Z
5	$ \nu 211\ 3/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 211\ 1/2-\rangle^1$	-184.89	9.44	0.40	1_Z
6	$ \nu 220\ 1/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 5/2-\rangle^1$	-183.34	10.99	0.24	2_Z
7	$ \nu 220\ 1/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 5/2-\rangle^1$	-183.27	11.06	0.23	3_Z
8	$ \nu 211\ 3/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 200\ 1/2+\rangle^1$	-181.79	12.54	0.36	1_Z
9	$ \nu 211\ 3/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 200\ 1/2-\rangle^1$	-181.50	12.83	0.34	2_Z
10	$ \nu 220\ 1/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 211\ 1/2-\rangle^1$	-181.99	12.34	0.35	1_Z
11	$ \nu 220\ 1/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 211\ 1/2-\rangle^1$	-180.78	13.55	0.33	0_Z
12	$ \nu 211\ 3/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 3/2+\rangle^1$	-178.83	15.50	0.34	3_Z
13	$ \nu 211\ 3/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 3/2+\rangle^1$	-177.16	17.17	0.33	0_Z
14	$ \nu 220\ 1/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 200\ 1/2-\rangle^1$	-177.04	17.29	0.27	0_Z
15	$ \nu 220\ 1/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 200\ 1/2-\rangle^1$	-176.94	17.39	0.25	1_Z
16	$ \nu 220\ 1/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 3/2+\rangle^1$	-174.00	20.33	0.25	2_Z
17	$ \nu 211\ 3/2+\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 3/2+\rangle^1$	-173.47	20.86	0.24	1_Z
18	$ \pi 211\ 3/2-\rangle^{-1} \otimes \pi 202\ 5/2-\rangle^1$	-188.00	6.33	0.34	1_Z
19	$ \nu 211\ 3/2-\rangle^{-1} \otimes \nu 202\ 5/2-\rangle^1$	-184.29	10.04	0.10	1_Z
	$ \pi 211\ 3/2-\rangle^{-1} \otimes \pi 202\ 5/2-\rangle^1$				
20	$ \nu 211\ 3/2\rangle^{-2} \otimes \nu 202\ 5/2\rangle^2$	-183.13	11.20	0.26	0_Z

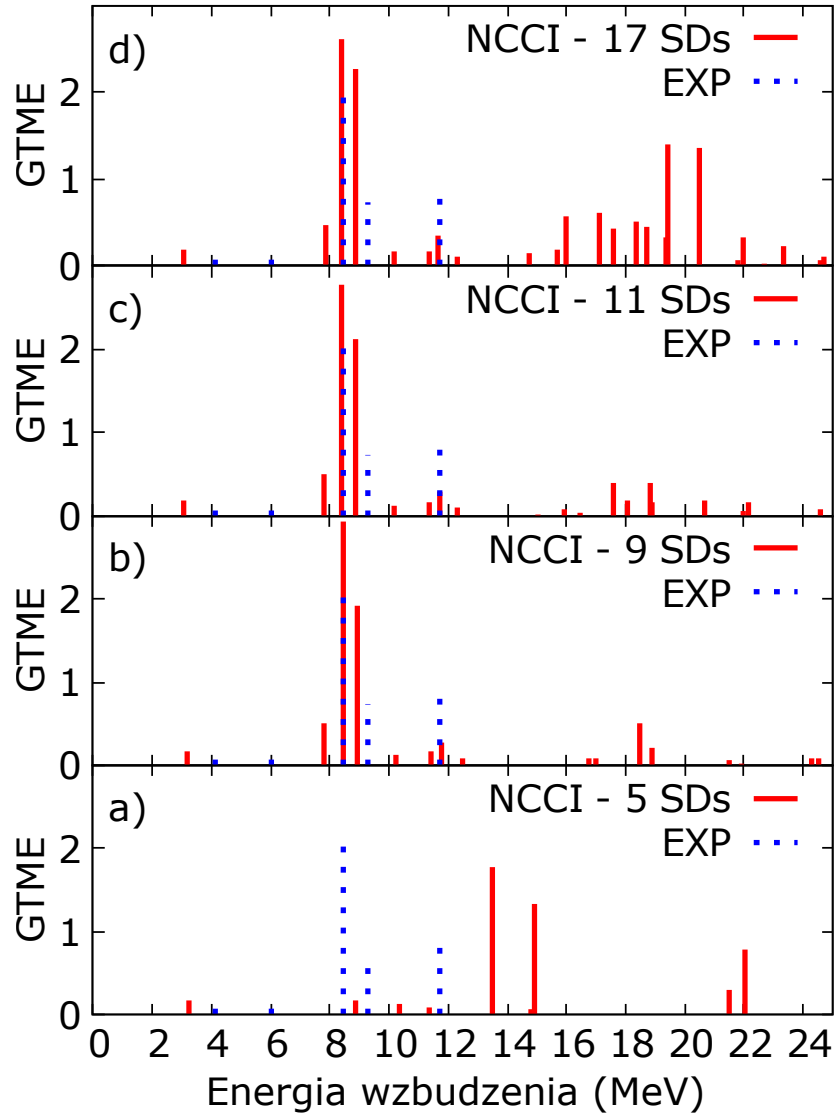
guracyjną rozbudowuje się o antyuszeregowany stan podstawowy (b) oraz o energetycznie najniżej leżące wzbudzenie 1p-1h (c). Porównanie wszystkich trzech rysunków ewidentnie wskazuje, że wyznaczone elementy macierzowe są niemal nieczułe na korelowanie funkcji falowej jądra ^{24}Al .

Podobną analizę można przeprowadzić, ustalając przestrzeń konfiguracyjną jądra ^{24}Al oraz sukcesywnie dodając kolejne wzbudzenia w jądrze ^{24}Mg . Taka dyskusja jest szczególnie istotna ze względu na fizyczną interpretację pojawiających się maksimów lokalnych w języku wzbudzeń między nilssonowskimi orbitalami. Wyniki przedstawiono na wykresie 5.14. W części (a) przedstawiono obliczenia rozkładu nasilenia Gamowa-Tellera, wyko-



Rys. 5.13: Stabilność elementu macierzowego Gamowa-Tellera względem wymiaru przestrzeni konfiguracyjnej modelu DFT-NCCI rozpadającego się jądra. Wykres przedstawia elementy macierzowe Gamowa-Tellera rozpadu $^{24}\text{Al}; 4^+_{\text{g.s.}} \rightarrow ^{24}\text{Mg}; 4^+$. Wyniki uzyskano przy użyciu 17 konfiguracji składających się na przestrzeń konfiguracyjną jądra ^{24}Mg . Ilość wyznaczników Slatera (SD) użytych do skorelowania układu jądra ^{24}Al zmienia się od jednego reprezentującego stan podstawowy (dolny panel) do trzech energetycznie najniższych leżących (górny panel).

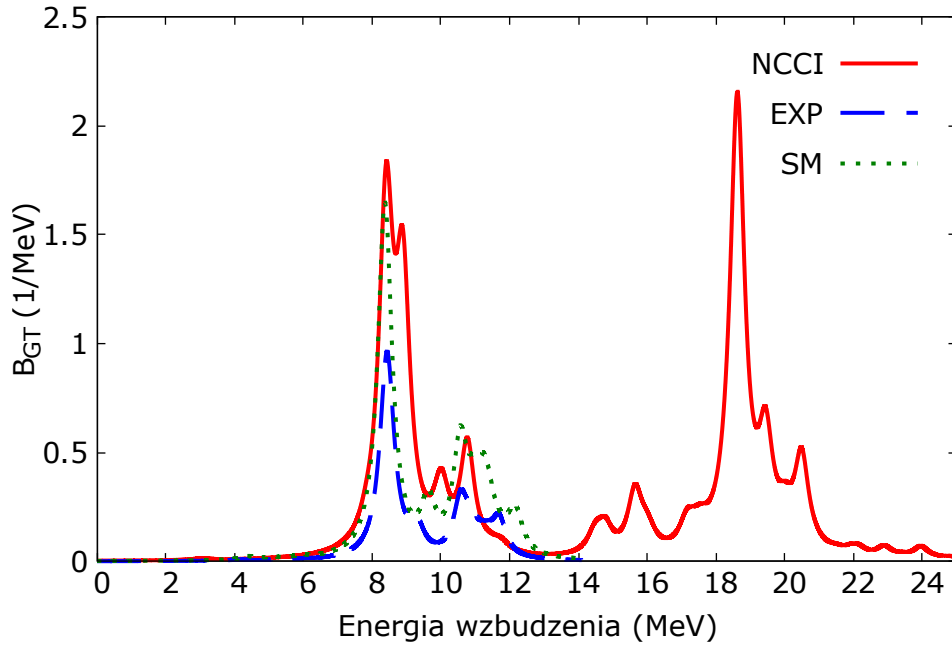
rzystując przestrzeń konfiguracyjną zbudowaną ze stanu podstawowego oraz pierwszych 4 wzbudzeń w obrębie stanów jednocząstkowych pochodzących z orbitalu $d_{5/2}$. Następnie, w części (b) do przestrzeni konfiguracyjnej dodano wzbudzenia neutronu do poziomu $|211\ 1/2\rangle$ pochodzącego ze sferycznego orbitalu $d_{3/2}$. Okazuje się, że ten stan odgrywa kluczową rolę przy odtworzeniu rozkładu nasilenia Gamowa-Tellera, a w szczególności w opisie pierwszego rezonansu Gamowa-Tellera (GTR) leżącego ~ 8 MeV ponad stanem podstawowym. Warto zwrócić uwagę, że energia centroidu jest identyczna z energią stanu $|211\ 1/2\rangle$ liczoną względem poziomu Fermiego. Ten przykład wskazuje na wysoką czułość rozkładu nasilenia Gamowa-Tellera na położenie orbitali jednocząstkowych. Na Rys. 5.14c przedstawiono rachunki z przestrzenią konfiguracyjną, w której rozwiązania HF o energii względem stanu podstawowego ΔE_{HF} są ograniczone przez eksperymentalną wartość Q_β tj. $\Delta E_{\text{HF}} \leq 14.5$ MeV. Na Rys. 5.14d przedstawiono rachunki z przestrzenią konfiguracyjną



Rys. 5.14: Elementy macierzowe Gamowa-Tellera rozpadu stanu podstawowego 4^+ jądra ^{24}Al do stanów 4^+ w jądrze ^{24}Mg względem wymiaru przestrzeni konfiguracyjnej jądra ^{24}Mg . Szczegóły w tekście.

uwzględniającą wszystkie dostępne wzbudzenia 1p-1h. Uwzględnienie tych wzbudzeń ma znacznie przede wszystkim dla wysokoenergetycznej części rozkładu nasilenia Gamowa-Tellera, powyżej okna energetycznego wyznaczonego przez wartość Q_β . Stąd brak w tej części widma poziomów eksperymentalnych.

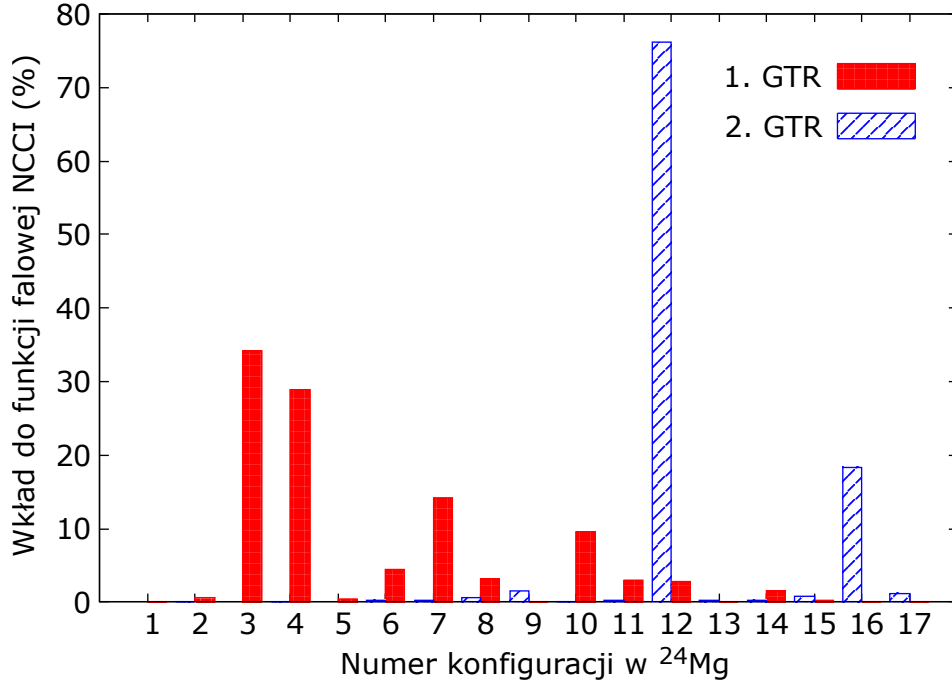
Na Rys. 5.15 przedstawiono ostateczny wynik obliczeń w modelu DFT-NCCI uwzględniający przejścia ze stanu podstawowego 4^+ w ^{24}Al do wszystkich dostępnych stanów 3^+ , 4^+ oraz 5^+ w jądrze ^{24}Mg . Wyznaczone widmo porównano z rachunkami modelu powłokowego z oddziaływaniem USDb oraz z wartościami eksperymentalnymi [169]. Zarówno rachunki modelu powłokowego jak i modelu DFT-NCCI idealnie oddają doświadczalne położenie centroidu wyznaczonego przez przejście $4^+ \rightarrow 4^+$ jednocześnie dwukrotnie przeszacowują jego wysokość. Ponadto w rachunkach DFT-NCCI pierwszy rezonans rozszczepia się na dwa blisko leżące maksima. Jest to efekt niewłaściwego mieszania się orbitali *sd*. Drugi rezonans widoczny w rachunkach DFT-NCCI położony jest poza doświadczal-



Rys. 5.15: Rozkład nasilenia Gamowa-Tellera w jądrze ^{24}Mg z rozpadu stanu podstawowego 4^+ w jądrze ^{24}Al . Rozkład nasilenia uwzględnia elementy macierzowe sprzęgające stany $3^+, 4^+$ oraz 5^+ w jądrze ^{24}Mg . Wynik DFT-NCCI porównano z wartościami eksperymentalnymi oraz rachunkami w modelu powłokowym [169]. Rozkład został uciążony przy użyciu funkcji Lorentza z szerokością połówkową równą $\Gamma = 0.5 \text{ MeV}$.

nym oknem energetycznym wyznaczonym przez wartość Q_β . Co ciekawe, jego położenie, podobnie jak w przypadku pierwszego rezonansu, jest zdeterminowane energią jednocząstkową poziomu $|202\ 3/2\rangle$ względem powierzchni Fermiego p.Rys. 5.12.

Podobnie jak w przypadku rozpadu $^8\text{He} \rightarrow ^8\text{Li}$ warto przyjrzeć się strukturze rezonansów w języku pierwotnych konfiguracji średniopolowych interpretowanych z użyciem jednocząstkowych orbitali Nilssona. Taki rozkład w przypadku jądra ^{24}Mg zaprezentowano na wykresie 5.16. Stan podstawowy rozpadającego się jądra ^{24}Al o spinie 4^+ jest zdominowany przez uszeregowaną średniopolową konfigurację, w której niesparowany proton obsadza poziom $|202\ 5/2\rangle$. Jak przedstawiono w Tab. 5.1 ten poziom ma bardzo duży element Gamowa-Tellera z poziomami $|202\ 5/2\rangle$ oraz jego partnerem spinorbitalnym $|202\ 3/2\rangle$ w jądrze córki ^{24}Mg . Stąd pierwszy rezonans widoczny na Rys. 5.15 powinien głównie pochodzić od uszeregowanego wzbudzenia neutronu do poziomu $|202\ 5/2\rangle$. W istocie wkład tej konfiguracji w pierwszy stan rezonansowy jest wiodący. Bardzo bliskie położenie orbitali $|202\ 5/2\rangle$ oraz $|211\ 1/2\rangle$ powoduje ich efektywne mieszanie w polu średnim. Rzeczywiście, uszeregowana konfiguracja ze wzbudzeniem neutronu do poziomu $|211\ 1/2\rangle$, patrz Tab. 5.4, daje porównywalny wkład do rezonansu. Zgodnie z dyskusją Rys. 5.14 w poprzednim paragrafie, wzbudzenie do orbitalu $|202\ 5/2\rangle$ powoduje pojawienie się rezonansowego maksimum w widmie. Jednak dopiero uwzględnienie wzbudzeń do stanu $|211\ 1/2\rangle$ stabilizuje jego położenie energetyczne. Niezaniedbywalny wkład do pierwszego rezonansu pochodzi również od wyżej wzbudzonych uszeregowanych konfiguracji nr 7 oraz 10, patrz Tab. 5.4, w których wzbudzony neutron obsadza stany $|202\ 5/2\rangle$ (7) oraz $|211\ 1/2\rangle$ (10).



Rys. 5.16: Rozkład funkcji falowej pierwszego (czerwony) oraz drugiego stanu rezonansowego Gamowa-Tellera w bazie konfiguracji średniopoloowych wyszczególnionych w tabeli 5.4

W przeciwieństwie do pierwszego rezonansu, drugi, leżący powyżej wartości Q_β , zdeteminowany jest przez uszeregowaną konfigurację nr 12 (p. Tab. 5.4) wzbudzenia neutronu do poziomu $|202\ 3/2\rangle$. Jej wkład wynosi niemal $\sim 80\%$. Pozostałe 20% pochodzi od energetycznie wyżej wzbudzonej uszeregowanej konfiguracji nr 16 powstałej również przez obsadzenie orbitalu $|202\ 3/2\rangle$. Brak energetycznie blisko leżących stanów Nilssona powoduje, że interpretacja drugiego rezonansu jest znacznie bardziej jednoznaczna.

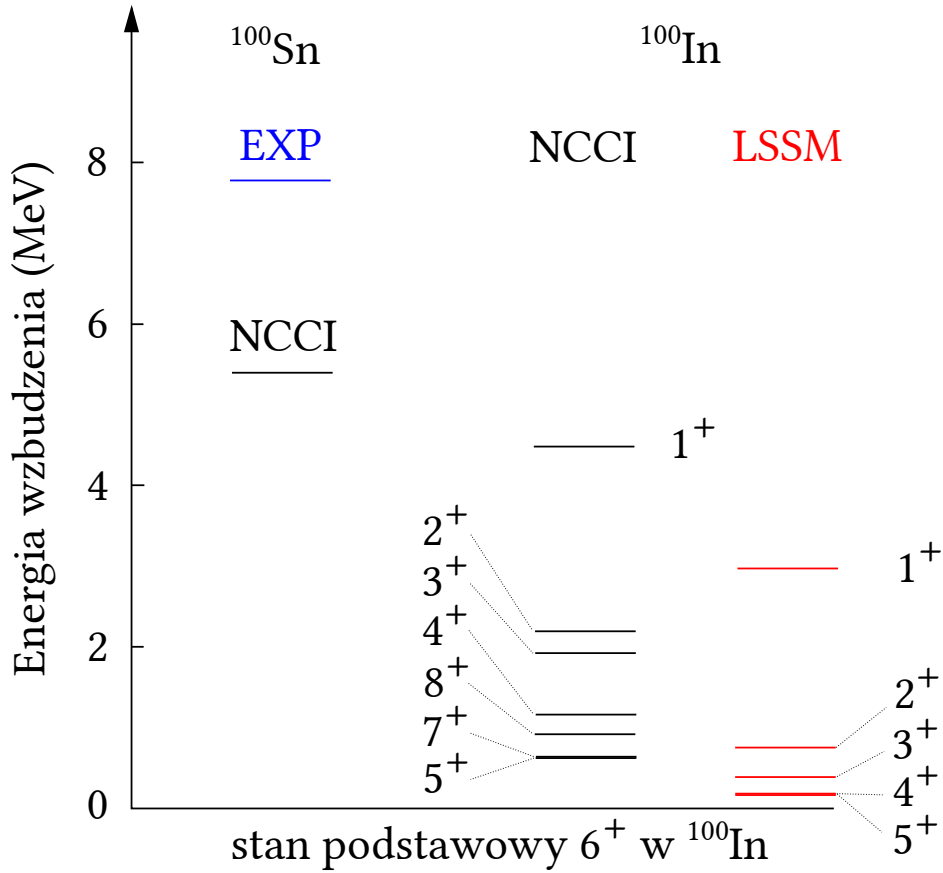
3.3 Superdozwolony rozpad Gamowa-Tellera w jądrze ^{100}Sn

W tym krótkim podrozdziale przedstawiamy wyniki modelu DFT-NCCI dotyczące superdozwolonego rozpadu beta jądra $^{100}\text{Sn}\ 0^+ \rightarrow ^{100}\text{In}\ 1^+$ oraz niskoenergetycznej struktury $I \leq 8$ w jądrze ^{100}In . Przypadek tych jąder jest interesujący z kilku względów. Zachodzący między nimi rozpad beta stanowi najszybszy rejestrowany rozpad Gamowa-Tellera, a zatem największy element macierzowy spośród całej tablicy nuklidów. Wartość $\log ft$ jest znacznie mniejsza od tej wyznaczonej dla superdozwolonego rozpadu Fermiego w tym jądrze. Stąd nazywa się go superdozwolonym rozpadem Gamowa-Tellera. Zgodnie ze wzorem (5.18) w bazie sferycznej przejście między $0g_{9/2}$ a $0g_{7/2}$ wynosi bowiem:

$$\mathcal{M}_{\text{GT}}(0g_{9/2} \rightarrow 0g_{7/2}) = -\frac{4}{3}\sqrt{10} \approx -4.216 \quad (5.24)$$

co przekłada się na wartość $B_{\text{GT}} = 28.67$ przy założeniu, że $g_A = -1.2701$. Ponadto dyskusja struktury jądra po rozpadzie ^{100}In stanowi doskonały test używanego oddziaływania oraz modelu DFT-NCCI w cięższych jądrach. Jest to region najcięższych jąder leżących na linii $N = Z$. Co więcej jądro ^{100}In jest niemal sferyczne, a w konsekwencji

mieszanie się niskoleżących orbitali jednocząstkowych nie jest bardzo efektywne. Naturalnie, punktem odniesienia nie może być spektrum wyznaczone na gruncie eksperymentu. Rozważany region tablicy nuklidów należy bowiem do egzotycznych jąder, dla których przypisanie nawet spinu stanu podstawowego nie jest pewne. Nasze rachunki struktury wobec tego zestawimy z rachunkami otrzymanymi w modelu powłokowym [201].



Rys. 5.17: Widmo niskoleżących stanów w jądrze ^{100}In wyznaczone przy użyciu modelu DFT-NCCI (na środku) oraz modelu powłokowego LSSM (po prawej). Z lewej strony wykresu przedstawiono wartość doświadczalną (linia kropkowana) oraz uzyskaną w modelu DFT-NCCI (linia ciągła) energii wiązania jądra ^{100}Sn . Szczegóły zawarto w tekście.

W przypadku podwójnie magicznego jądra ^{100}Sn układ kwantowy opisujemy przez średniopolową konfigurację stanu podstawowego. Energia wiązania tego jądra wynosi w naszych rachunkach 827.7 MeV, przeszacowując wartość eksperymentalną 825.3 ± 0.3 MeV jedynie o 0.3%.

Struktura jądra ^{100}In została wyznaczona przy użyciu dziewięciu osiowo zdeformowanych konfiguracji średniopolowych. Osiem z nich odpowiada konfiguracjom z dziurą protonową na orbitalu $g_{9/2}$ oraz ze wzbudzeniem neutronu do stanów pochodzących od sferycznych orbitali $d_{5/2} - \nu d_{5/2} \otimes \pi g_{9/2}^{-1}$ i $g_{7/2} - \nu g_{7/2} \otimes \pi g_{9/2}^{-1}$. Dziewiąta konfiguracja odpowiada energetycznie najniższemu wzbudzeniu $\pi p - \pi h$ przez powłokę $Z=50$. Została uwzględniona w rachunkach DFT-NCCI celem przetestowania stabilności zarówno struktury jądrowej w ^{100}In , jak i wartości elementu macierzowego superdozwolonego przejścia

Gamowa-Tellera. Rachunek pokazał, że skorelowanie układu przez uwzględnienie tej konfiguracji nie wpływa na żadne z tych wartości.

Wyznaczone w modelu DFT-NCCI widmo najniższych stanów o spinach $1^+ \leq I^\pi \leq 8^+$ w jądrze ^{100}In zostało przedstawione na wykresie 5.17, gdzie zaprezentowano również widmo najniższych stanów o spinach $1^+ \leq I^\pi \leq 6^+$ wyznaczone w modelu powłokowym [202, 203]. Rachunki zostały unormowane do stanu podstawowego, który zarówno w modelu DFT-NCCI jak i modelu powłokowym ma spin $I = 6^+$. Energia tak wyliczonego stanu podstawowego wyznaczona w modelu DFT-NCCI różni się jedynie o 9 keV w stosunku do wartości eksperymentalnej. Pomijając brak poziomów 7_1^+ oraz 8_1^+ w modelu powłokowym, kolejność występowania poszczególnych stanów wzbudzonych jest identyczna w obu modelach. W modelu DFT-NCCI energie wzbudzenia tych stanów są jednak systematycznie większe od tych otrzymanych w modelu powłokowym.

Wartość elementu macierzowego Gamowa-Tellera otrzymana w wyniku zmieszania opisanych wyżej konfiguracji w modelu DFT-NCCI niemal nie różni się od wartości uzyskanej w bazie sferycznej (5.24) i wynosi:

$$M_{\text{GT}}^{\text{NCCI}} = -4.191. \quad (5.25)$$

Uwzględniając fakt, że dla standardowo zdefiniowanego operatora Gamowa-Tellera (5.3), w jądrach o liczbie masowej $A = 100 - 132$ wartość parametru q (2.31) wynosi 0.6 [176], otrzymujemy $B_{\text{GT}}^{(\text{NCCI})} \approx 10.2$. Tak otrzymana wielkość bardzo dobrze zgadza się z wartością wyznaczoną eksperymentalnie $B_{\text{GT}}^{(\text{EXP})} = 9.1_{-3.0}^{+2.6}$.

Rozdział 6

Podsumowanie

Jednoreferencyjna metoda DFT w zastosowaniu do fizyki jądrowej ma bardzo ograniczoną funkcjonalność ze względu na efekt spontanicznego naruszenia symetrii. Może być ona z powodzeniem używana do opisu objętościowych własności jąder jak masy, energie separacji, promienie czy momenty kwadrupolowe. Naruszenie symetrii nie pozwala jednak na w pełni kwantowy opis struktury stanów wzbudzonych, przejść elektromagnetycznych czy też kluczowych w kontekście niniejszej rozprawy przejść beta. Takie badania wymagają skonstruowania teorii DFT z przywróconymi symetriami. Można to osiągnąć, stosując techniki rzutowania na podprzestrzenie o określonych liczbach kwantowych. Wykorzystanie, w kontekście rzutowania, uogólnionego twierdzenia Wicka prowadzi do uogólnionej teorii DFT, w której funkcjonal gęstości zachowuje swoją postać ale wyraża się za pomocą gęstości przejściowych, liczonych pomiędzy różnymi wyznacznikami Slatera – różnymi stanami referencyjnymi. Takie uogólnienie nosi nazwę wieloreferencyjnej metody DFT. W tej pracy zaproponowano dalsze uogólnienie metody MR DFT, polegające na uwzględnieniu w ramach tego formalizmu mieszania konfiguracji typu cząstka-dziura. Ta metoda, zwana DFT-NCCI (DFT-rooted No-Core Configuration-Interaction) stanowi podstawowe narzędzie teoretyczne, które rozwinięto, zaimplementowano kodzie numerycznym HFODD rozwijanym od dekad przez warszawską grupę teorii struktury jądra. Następnie metodę przetestowano w ramach prac składających się na niniejszą rozprawę. Formalizm DFT-NCCI pozwala prowadzić badania spektroskopowe w sposób w pełni poprawny z punktu widzenia mechaniki kwantowej, nadając tak uogólnionej teorii DFT funkcjonalność modelu powłokowego. Zachowana jest przy tym uniwersalność metody SR DFT, tj. model może być stosowany do dowolnego jądra z tablicy nuklidów. Przywrócenie symetrii rotacyjnej i poprawny sposób opisu jawnego naruszenia symetrii izospinowej umożliwia, w szczególności, przeprowadzenie analizy rozpadów beta z punktu widzenia fizyki jądrowej, jak również fizyki cząstek elementarnych, weryfikując podstawowe hipotezy Modelu Standardowego. Tego typu rachunki wymagają poprawnego opisu jawnego łamania symetrii izospinowej, której podstawowym źródłem jest oddziaływanie Coulomba, które, ze względu na swój długozasięgowy charakter, polaryzuje całe jądro. Opis teoretyczny efektu polaryzacji coulombowskiej wymaga zatem teorii, która nie operuje pojęciami rdzenia i przestrzeni walencyjnej. Ten warunek spełniają modele wywodzące się z DFT rozwijane w tej pracy.

Przedstawiona praca dotyczy badań podstawowych w dziedzinie fizyki jądrowej z zastosowaniami do badania wybranych aspektów fizyki cząstek elementarnych. Główne zadania badawcze jakie w niej postawiono i zrealizowano obejmowały:

1. implementację numeryczną metody DFT-NCCI z przywróconą symetrią rotacyjną i poprawnie opisaną symetrią izospinową, i jej zastosowanie do obliczeń strukturalnych w jądrach atomowych w celu przetestowania wyników w zależności m. in. od przyjętej przestrzeni konfiguracyjnej [2, 6]
2. przeprowadzenie systematycznych rachunków dla poprawek izospinowych do przejść superdozwolonych $0^+ \rightarrow 0^+$ między izospinowymi stanami analogowymi o $T \approx 1$, a w konsekwencji do analizy wartości wiodącego elementu macierzowego V_{ud} macierzy mieszania kwarków CKM [6];
3. implementację oraz przetestowanie elementu macierzowego Gamowa-Tellera (GTME) i przeprowadzenie obliczeń GTME w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu mas $A = 11 - 55$ w modelu NCCI [3] w celu przeanalizowania efektu *quenchingu* stałej sprzężenia prądów osiowo-wektorowych g_A . [3]
4. wyznaczenie funkcji odpowiedzi Gamowa-Tellera (GTR) dla pełnego spektrum stanów wzbudzonych jądra, dla wybranych układów o $N \sim Z$ i o masach z zakresu $A = 8 - 100$ z jednoczesną analizą struktury orbitali jednocząstkowych [2, 4];
5. implementację kontaktowego oddziaływania klasy III w rzędach LO i NLO w module związanym z przywracaniem symetrii izospinowej w kodzie HFODD [1];
6. analizę wpływu poszczególnych źródeł łamania symetrii izospinowej tj. oddziaływania Coulomba oraz efektywnego, kontaktowego oddziaływania klasy III na wartość parametru zmieszania izospinowego α_{ISB} oraz na wartość poprawki izospinowej δ_{ISB} do przejść Fermiego w jądrach zwierciadlanych o $T = 1/2$, a w konsekwencji na wartość elementu macierzowego V_{ud} oraz na test unitarności macierzy mieszania kwarków CKM [1];

W pracy uzyskano szereg ciekawych wyników teoretycznych. Obliczenia przeprowadzone w modelu DFT-NCCI dla 12. przypadków bardzo precyzyjnie zmierzonych rozpadów superdozwolonych wraz z analizą niepewności teoretycznych prowadzą do wartości:

$$V_{ud}^{0^+ \rightarrow 0^+} = 0.97396(25). \quad (6.1)$$

Powyższa wartość jest w pełni konsystentna z rachunkami modelu powłokowego z potencjałem Woodsa-Saxona, dla którego $V_{ud} = 0.97420(21)$. Wartości obu modeli wskazują na zachowanie unitarności macierzy CKM, choć w przypadku modelu DFT-NCCI test jest spełniony dopiero w przedziale 3σ .

Należy jednak podkreślić, że rachunki poprawek izospinowych do przejść superdozwolonych w modelu DFT-NCCI nie uwzględniają członów łamiących izospin przez efektywne oddziaływanie silne. Wynika to z faktu, że w jądrach z trypletu izospinowego aktywne są zarówno składowe izowektorowe jak i izotensorowe siły kontaktowej. Mieszanie protonów z neutronami wprowadzane przez oddziaływania klasy II wymaga zastosowania technik rzutowych w trzech wymiarach w izoprzestrzeni. W chwili obecnej trwają prace związane z zaimplementowaniem trójwymiarowego rzutowania na izospin w kodzie HFODD.

Alternatywną metodą jądrową sprawdzania unitarności macierzy CKM jest badanie rozpadu beta Fermiego w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2, I, T_z = \pm 1/2 \rightarrow T = 1/2, I, T_z = \mp 1/2$. Metoda pozwala obecnie na wyznaczenie wartości elementu V_{ud} z

podobną dokładnością jaką daje rozpad swobodnego neutronu. Powodem niższej dokładności w wyznaczaniu wiodącego elementu macierzowego V_{ud} jest stosunkowo niewielka liczba przejść, dla których zarówno czas życia, jak i niezbędny do analizy statystycznej parametr korelacji, są wyznaczane w doświadczeniu z wysoką precyzją. Jak dotąd do analizy włącza się 4 takie przejścia: mianowicie rozpady między jądrami o liczbie masowej $A = 19, 21, 35$ oraz 37 . Z drugiej strony badanie przejść Fermiego między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ stanowi doskonały test badania zależności członów łamiących izospin przez oddziaływanie silne. Uwzględnienie oddziaływania klasy III (3.51) nie łamie osiowej symetrii izospinowej, wobec czego jednowymiarowe rzutowanie na izospin jest w pełni wystarczające. W wyniku przeprowadzonych rachunków DFT-NCCI, w niniejszej pracy otrzymaliśmy wartość elementu macierzowego $V_{ud}^{\text{mirror}} = 0.9725(14)$ przy uwzględnieniu oddziaływania Coulomba jako jedyne źródła łamania symetrii izospinowej. Pokazaliśmy następnie, że włączenie klasy III znacząco wpływa na wartość elementu macierzowego, dając:

$$V_{ud}^{\text{mirror}} = 0.9736(14). \quad (6.2)$$

Powyższy wynik jest ciekawy z dwu względów. W pierwszej kolejności pokazuje, że uwzględnienie oddziaływań łamiących izospin przez efektywne oddziaływanie silne jest niezwykle istotne, nie tylko do odtworzenia anomalii Nolena-Shiffera w masach jąder zwierciadlanych, ale również ma duży, a nawet zaskakująco duży wpływ na takie wielkości jak poprawki izospinowe, a w konsekwencji na element V_{ud} . Ponadto wynik jest w pełni konsekwentny z obliczeniami modelu powłokowego oraz z wartością otrzymaną z rachunków dotyczących przejść superdozwolonych (6.1). Należy przypuszczać, że wraz ze zwiększającą się liczbą bardzo dokładnie zmierzonych przejść pomiędzy jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$, błąd statystyczny będzie spadać i w przyszłości metoda będzie konkurencyjna do tej, w której wykorzystuje się przejścia superdozwolone $0^+ \rightarrow 0^+$.

W teorii $V - A$ wyróżniamy dwa rodzaje rozpadów beta: rozpady typu Fermiego przy udziale wektorowych prądów elektorsłabych oraz typu Gamowa-Tellera (GT) przy udziale prądów osiowo-wektorowych. Te ostatnie charakteryzuje hipoteza częściowego zachowania prądu aksjalnego. Zakłada ona, że dywergencja aksjalnego pola wektorowego ma własności pseudoskalarne opisywane w Modelu Standardowym przez piony ulegające rozpadowi w obecności oddziaływań silnych. Osiowo-wektorową stałą sprzężenia $g_A = -1.2723(23)$ (2.30) można wówczas wyznaczyć przy użyciu relacji Goldbergera-Trimana. Z drugiej strony dokładnego opisu stałej dostarczają globalne rachunki rozpadów beta w kanale Gamowa-Tellera. Dotychczasowe badania w modelu powłokowym wskazują jednak, że g_A zmienia się w zależności od masy jądra atomowego, a element macierzowy Gamowa-Tellera jest systematycznie przeszacowywany przez teorię o pewien uśredniony czynnik (2.31):

$$g_A^{\text{eff}} = qg_A \quad (6.3)$$

Model DFT-NCCI daje możliwość opisu rozpadu GT bez użycia podziału na rdzeń i przestrzeń walencyjną, a więc z zupełnie innej perspektywy niż w dotychczas funkcjonującym modelu powłokowym. Analiza porównawcza obu metod wielociałowych dostarcza odpowiedzi na wiele pytań, które pojawiły się w fizyce jądrowej przez dekady korzystania z modelu powłokowego. Flagowym przykładem stały się rachunki dotyczące efektu *quenchingu* stałej sprzężenia prądów osiowo-wektorowych. Przedstawione w tej rozprawie

systematyczne rachunki elementu macierzowego Gamowa-Tellera między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$, poza nielicznymi, kłopotliwymi przypadkami związanymi prawdopodobnie z *niefizycznym* mieszaniem się orbitali, okazują się być w doskonałej zgodności z elementami macierzowym GT wyznaczonymi w ramach modelu powłokowego (a ściślej wielu różnych modeli powłokowych). Wyznaczony parametr skalujący tzw. parametr *quenchingu* jest identyczny w obu modelach i przyjmuje wartość:

$$q = 0.74(21) \quad (6.4)$$

Ponieważ konstrukcja obu modeli różni się fundamentalnie to przeprowadzone rachunki dotyczące rozpadów beta typu Gamowa-Tellera w modelu bazującym na teorii funkcjonalu gęstości pozwoliły na zawężenie stawianych hipotez dotyczących efektu *quenchingu* stałej sprzężenia prądów osiowo-wektorowych do wpływu prądów dwuciałowych. Wykluczono przede wszystkim przypuszczenia jakoby, przybliżenie rdzenia oraz ograniczenie przestrzeni walencyjnej, czyli główne mankamenty modelu powłokowego, odpowiadały za problem systematycznego przeszacowywania elementu macierzowego na rozpad beta w kanale osiowo-wektorowym. Rzeczywiście, najnowsze wyniki badań uwzględniających prądy dwuciałowe dopasowane do superdozwolonego rozpadu Gamowa-Tellera jądra ^{100}Sn znacznie redukują efekt *quenchingu* z $q = 0.74$ do $q = 0.92$.

W niniejszej rozprawie, dzięki skonstruowaniu modelu DFT-NCCI, wykonano pierwsze w historii obliczenia funkcji odpowiedzi Gamowa-Tellera metodami wywodzącymi się z metod funkcjonalnych bez stosowania przybliżeń. Obliczenia funkcji odpowiedzi Gamowa-Tellera zostały przeprowadzone w bardzo lekkich jądrami $A = 8$ oraz w jądrze ze środka powłoki $sd - ^{24}\text{Mg}$. Przeprowadzone rachunki okazały się być konkurencyjne z rachunkami modelu powłokowego ze względu na zgodność z danymi doświadczalnymi. Struktura modelu pozwoliła na interpretację rozkładu funkcji nasilenia GT w języku niezwykle intuicyjnych średniopolowych wyznaczników Slatera i zdeformowanych orbitali nilssonowskich.

Model DFT-NCCI jest modelem uniwersalnym, pozbawionym wolnych parametrów, z możliwością zastosowania do dowolnego jądra z tablicy nuklidów. W rozprawie wykonaliśmy obliczenia struktury i elementów macierzowych rozpadów beta w jądrami bardzo lekkich, o $A \approx 8$ jak i ciężkich o $A \approx 100$. W szczególności wykonaliśmy obliczenia dla superdozwolonego przejścia Gamowa-Tellera $^{100}\text{Sn} \rightarrow ^{100}\text{In}$. Jest to najszybszy rozpad Gamowa-Tellera spośród jąder z całej tablicy nuklidów. Jego eksperymentalnie zmierzona wartość B_{GT} przysłużyła się do dopasowania prądów dwuciałowych oddziaływania słabego. W tej pracy przedstawiam rachunki NCCI i porównuje je z rachunkami modelu powłokowego oraz z jednociłowym elementem macierzowym wyznaczonym w bazie sferycznej. Ponownie, rachunki okazują się przeszacowywać wartość B_{GT} w porównaniu z wartością doświadczalną, pozostając w pełnej zgodności z innymi modelami. Również kolejność poziomów w ^{100}In zgadza się z obliczeniami modelu powłokowego.

Niniejsza rozprawa otwiera szeroko wrota do dalszych badań. Przetestowanie modelu DFT-NCCI i jego przestrzeni konfiguracyjnej przy okazji badań nad funkcją odpowiedzi Gamowa-Tellera jest niesłychanie istotne ze względu na przyszłe badania m.in. nad bezneutrinowym podwójnym rozpadem beta. Jedną z metod oszacowania takiego elementu macierzowego jest bowiem wyznaczanie elementów macierzowych pojedynczego rozpadu z pośredniczącymi stanami wzbudzonymi z jednoczesnym zachowaniem zupełności przestrzeni konfiguracyjnej. Bezneutrinowy podwójny rozpad beta ($0\nu\beta\beta$) jest obecnie jednym

z najbardziej poszukiwanych przez naukowców w przyrodzie zjawiskiem fizycznym. Zaobserwowanie takiego przejścia świadczyłoby bowiem o istnieniu fizyki, w której niezachowanie liczby leptonowej byłoby dozwolone. Eksplorowany obecnie (zarówno przez naukowców fizyki teoretycznej i doświadczalnej cząstek elementarnych) model supersymetryczny (SUSY) rozszerzający symetrie Modelu Standardowego, zakłada istnienie neutralina - supersymetrycznego partnera neutrina - cząstki Majorany, wymaganej przez rozpad $0\nu\beta\beta$. Wobec czego badania na tym procesem doprowadziłyby do ogromnego postępu zarówno w dziedzinie fizyki jądrowej jak i fizyki cząstek elementarnych. Odkrycie oscylacji neutrin, a w konsekwencji potwierdzenie posiadania niezerowej masy przez te cząstki, zainspirowało do jeszcze bardziej wzmózonych badań nad rozpadem $0\nu\beta\beta$ zarówno w modelach teoretycznych jak i w coraz kosztowniejszych eksperymentach.

Dalsze prace nad modelem DFT-NCCI mogą przyczynić się do głębszego zrozumienia procesów elektroslabych w astrofizyce. Możliwe będzie bowiem wyznaczenie w prezentowanym modelu przekroju czynnego na rozpraszanie neutrina na jądrze. Zrozumienie oddziaływania neutrina-jądro jest ważne ze względu na badania procesu nukleosyntezy ciężkich pierwiastków – procesu, który może zachodzić w neutronowo nadmiarowym środowisku eksplodującej gwiazdy. Taka wiedza jest niesłychanie istotna w zrozumieniu zjawisk zachodzących w warunkach wybuchu gwiazd supernowych, i ze względu na ograniczone możliwości w przeprowadzaniu badań doświadczalnych, do realizacji symulacji komputerowych ich wybuchu.

Formalizm rzutowania DFT-NCCI nie jest pozbawiony mankamentów. Najistotniejszym z nich są numeryczne problemy związane z otrzymywanymi przy rzutowaniu osobliwościami. Pochodzą one z rzutowania z wyznacznika Slatera otrzymywanego w modelach DFT z oddziaływaniami zależnymi od gęstości. Obecnie wiadomo, że takie funkcjonały dobrze oddają charakterystykę oddziaływań trójciałowych wysycających siły jądrowe. Trwają obecnie intensywne badania nad regularyzacją funkcjonałów oraz nad tworzeniem funkcjonałów nowej generacji – funkcjonałów skończonego zasięgu, które w procedurze rzutowania byłyby wolne od problemów z biegunami. Istnieją realne przesłanki, że wykorzystanie funkcjonałów nowej generacji stworzyłoby szansę na odtworzenie danych doświadczalnych dotyczących struktury jąder atomowych z jeszcze większą precyzją niż dotychczas. Drugim z celów takich prac jest realistyczne oszacowanie niepewności teoretycznych do obliczonych poprawek izospinowych, czy elementów macierzowych Gamowa-Tellera spowodowanych zależnością od struktury funkcjonału.

Spis rysunków

3.1	Wartości MDE dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ oraz $T = 1$	47
3.2	Residua energii wiązania dla stanów podstawowych neutronowo-nadmiarowych jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 55$	52
3.3	Energia uzyskana w wyniku przywrócenia symetrii rotacyjnej w zależności od parametru deformacji β_2 dla neutronowo-nadmiarowych jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 55$	53
3.4	Współczynnik zmieszania izospinowego α_{ISB} obliczony w jądrach parzysto-parzystych przed rediagonalizacją i po rediagonalizacji.	57
3.5	Uśredniony współczynnik zmieszania izospinowego $\bar{\alpha}_{\text{ISB}}$ obliczony w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$	58
3.6	Energie wybranych konfiguracji w jądrze ^{24}Mg w podejściu SR-DFT, MR-DFT i DFT-NCCI	62
3.7	Porównanie doświadczalnego i teoretycznego widma w jądrach ^6Li oraz ^8Li	64
3.8	Energie stanów wzbudzonych multipletów izowektrowych oraz izoskalar-nych w jądrze ^{42}Sc względem stanu 0^+	65
3.9	Porównanie eksperymentalnego i teoretycznego pasma rotacyjnego w jądrze ^{48}Cr dla parzystych spinów od $I = 0$ do $I = 16$	67
3.10	Procentowy wkład poszczególnych konfiguracji w ^{48}Cr do stanów $I = 0$, $I = 4$, $I = 8$, $I = 12$ oraz $I = 16$	69
4.1	Wartości własne macierzy norm w rachunkach DFT-NCCI dla stanów $I = 0$ w jądrach nieparzysto-nieparzystych	73
4.2	Wpływ rzutowania na izospin na poprawkę izospinową w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 17 - 47$ w rachunkach z różnymi wariantami oddziaływania ISB	78
4.3	Residua poprawek izospinowych obliczanych pomiędzy konfiguracjami stanu podstawowego o różnych orientacjach prądu cząstek walencyjnych $\delta_{\text{ISB}}^{\text{X}}$, $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Y}}$ oraz $\delta_{\text{ISB}}^{\text{Z}}$ względem poprawki $\delta_{\text{ISB}}^{\text{NCCI}}$ uzyskanej ze zmieszania konfiguracji odpowiadających różnym orientacjom w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 47$	79
4.4	Wartość poprawki izospinowej δ_{ISB} w rachunkach uwzględniających różne warianty oddziaływania ISB dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu mas $A = 11 - 47$	81
4.5	Poprawki izospinowe wyznaczone w modelach MR DFT oraz DFT-NCCI dla jąder zwierciadlanych $T = 1/2$ z zakresu $A = 11 - 55$ oraz w modelu powłokowym NSM dla jąder z zakresu $A = 11 - 45$	82
4.6	Obsadzenie stanów jednocząstkowych w stanach podstawowych jąder ^{19}F oraz ^{37}Ar	83

4.7	Zbieżność poprawki izospinowej δ_C ze względu na ilość powłok oscylatora harmonicznego w rozpadzie Fermiego między stanami podstawowymi $^{51}\text{Fe} \rightarrow ^{51}\text{Mn}$	84
4.8	Wykres stabilności poprawki izospinowej δ_{ISB} dla przejścia między jądrami $A = 37$	86
4.9	Zredukowany czas życia niezależny od jądra dla 5 przypadków przejść między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$, dla których zmierzono współczynniki korelacji	89
4.10	Wartość elementu macierzowego V_{ud} wraz z błędem uzyskana na podstawie metody przejść między jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ w różnych modelach	91
5.1	Struktura jednocząstkowa w Modelu Nilssona w jądram uczestniczących w rozpadzie $^{17}\text{F} \rightarrow ^{17}\text{O}$	96
5.2	Element macierzowy Gamowa-Tellera dla przejść pomiędzy jądrami zwierciadlanymi $T = 1/2$ z zakresu mas $A = 11 - 55$	99
5.3	Wartości elementów macierzowych Gamowa-Tellera wyznaczonych w ramach modelu powłokowego NSM oraz modelu DFT-NCCI	100
5.4	Residua elementów macierzowych Gamowa-Tellera wyznaczonych dla rozwiązań z orientacją prądu cząstki walencyjnej wzdłuż osi OX , OY i OZ względem wartości wyznaczonych w ramach zmieszania konfiguracji o różnych orientacjach.	101
5.5	Neutronowe i protonowe poziomy jednocząstkowe Nilssona w stanach podstawowych jąder ^8Be , ^8Li oraz ^8He	104
5.6	Rozkład nasilenia Gamowa-Tellera stanów 1^+ w jądrze ^8Li	107
5.7	Rozkład funkcji falowej pierwszego i czwartego stanu (rezonansu GT) 1^+ w ^8Li	109
5.8	Struktura jądrowa w jądrze ^8Be poniżej 30 MeV	110
5.9	Reguła sum Gamowa-Tellera dla najniższych stanów $I^\pi = 0^+, 1^+, 2^+, 3^+$ w ^8Li względem ilości konfiguracji uwzględnionych w ^8Be	111
5.10	Reguła sum Ikedy dla stanów 1_1^+ , 2_1^+ oraz 3_1^+ w ^8Li względem ilości konfiguracji uwzględnionych w przestrzeni konfiguracyjnej ^8Li	112
5.11	Wartości własne macierzy norm dla stanów 0^+ , 1^+ , 2^+ , 3^+ , oraz 4^+ w jądrze ^8Be oraz w ^8Li	113
5.12	Neutronowe poziomy jednocząstkowe w stanie podstawowym ^{24}Mg	114
5.13	Stabilność elementu macierzowego Gamowa-Tellera względem wymiaru przestrzeni konfiguracyjnej modelu DFT-NCCI rozpadającego się jądra	116
5.14	Elementy macierzowe Gamowa-Tellera rozpadu stanu podstawowego 4^+ jądra ^{24}Al do stanów 4^+ w jądrze ^{24}Mg	117
5.15	Rozkład nasilenia Gamowa-Tellera w jądrze ^{24}Mg pochodzący od rozpadu stanu podstawowego 4^+ w jądrze ^{24}Al	118
5.16	Rozkład funkcji falowej pierwszego oraz drugiego stanu rezonansowego Gamowa-Tellera w bazie konfiguracji średniopolowych w ^{24}Mg	119
5.17	Widmo niskoleżących stanów w jądrze ^{100}In wyznaczone przy użyciu modelu DFT-NCCI oraz modelu powłokowego LSSM	120

Spis tabel

3.1	Wartości parametrów Skyrme'a oraz niektóre własności nieskończonej materii jądrowej dla oddziaływań SII-SVI	43
3.2	Przestrzeń konfiguracyjna w jądrze ${}^6\text{Li}$	64
3.3	Własności konfiguracji w ${}^{42}\text{Sc}$	66
3.4	Samozgodne konfiguracje średniopolowe w jądrze ${}^{48}\text{Cr}$	68
4.1	Wyniki obliczeń dla przejść superdozwolonych, których doświadczalna precyzja pozwala na uwzględnienie w analizie elementu macierzowego V_{ud} . . .	74
4.2	Wyniki obliczeń dla przejść superdozwolonych, których doświadczalna precyzja jest niewystarczająca na uwzględnienie ich w analizie elementu macierzowego V_{ud}	75
4.3	Zestawy parametrów izowektorowej klasy III dopasowanej w dwu wariantach obliczeń teoretycznych – SR DFT oraz MR DFT z użyciem funkcjonału SV_{SO}	77
4.4	Zestawienie wielkości niezbędnych do przeprowadzenia analizy wartości elementu macierzowego V_{ud} na podstawie przejść Fermiego w jądrach zwierciadlanych $T = 1/2$	88
4.5	Wartości wyznaczonych eksperymentalnie współczynników korelacji $A_{\beta}, a_{\beta\nu}$ oraz B_{ν} i wyznaczony na ich podstawie współczynnik mieszania ϱ dla przejść między jądrami zwierciadlanymi $A = 19, 21, 29, 35$ oraz 37	89
4.6	Wartości poprawek izospinowych wraz z błędami, zredukowany czas życia niezależny od przejścia $\mathcal{F}t_0$, wartość elementu macierzowego V_{ud} oraz unitarność macierzy CKM w modelu powłokowym oraz w modelu DFT-NCCI dla trzech wariantów źródeł łamania symetrii izospinowej	90
5.1	Zestawienie jednocząstkowych elementów macierzowych Gamowa-Tellera w powłoce sd dla jąder $A = 17$ oraz $A = 39$	97
5.2	Samozgodne konfiguracje średniopolowe w jądrach ${}^8\text{He}$, ${}^8\text{Be}$ oraz ${}^8\text{Li}$	106
5.3	Doświadczalne oraz teoretyczne energie stanów wzbudzonych trzech energetycznie najniżej położonych stanów 2^+ w ${}^8\text{Be}$ oraz odpowiadające im wartości $\log ft$	111
5.4	Konfiguracje wchodzące w skład przestrzeni konfiguracyjnej jądra ${}^{24}\text{Mg}$. .	115

Bibliografia

- [1] M. Konieczka, P. Bączyk, and W. Satuła, arXiv:1909.09350 [nucl-th], w recenzji .
- [2] M. Konieczka, M. Kortelainen, and W. Satuła, Phys. Rev. C **97**, 034310 (2018).
- [3] M. Konieczka, P. Bączyk, and W. Satuła, Phys. Rev. C **93**, 042501 (2016).
- [4] M. Konieczka and W. Satuła, Acta Phys. Pol. B **48**, 293 (2017).
- [5] N. Schunck *et al.*, Computer Physics Communications **216**, 145 (2017).
- [6] W. Satuła, P. Bączyk, J. Dobaczewski, and M. Konieczka, Phys. Rev. C **94**, 024306 (2016).
- [7] W. Satuła, J. Dobaczewski, M. Konieczka, and W. Nazarewicz, Acta Phys. Pol. B **45**, 167 (2014).
- [8] P. Bączyk, *Naruszenie symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne w podejściu opartym na teorii funkcjonału gęstości*, Ph.D. thesis, Uniwersytet Warszawski (2019).
- [9] P. Bączyk *et al.*, Physics Letters B **778**, 178 (2018).
- [10] P. Bączyk *et al.*, Acta Phys. Pol. B **48**, 259 (2017).
- [11] P. Bączyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, and W. Satuła, Acta Phys. Pol. B Proc. Suppl. **8**, 539 (2015).
- [12] M. Vilén *et al.*, Phys. Rev. C **100**, 054333 (2019).
- [13] A. I. Kostrikin, *Wstęp do algebry 3, Podstawowe struktury algebraiczne* (PWN, 2004).
- [14] J. Browkin, *Teoria reprezentacji grup skończonych* (PWN, 2008).
- [15] J. Dobaczewski and J. Dudek, Computer Physics Communications **102**, 166 (1997).
- [16] J. Dobaczewski, *Fizyka struktury jądra atomowego*, w przygotowaniu.
- [17] L. Piel, *Idee chemii kwantowej* (PWN, 2011).
- [18] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2004).
- [19] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific Publishing, 1988).
- [20] M. Bentley and S. Lenzi, Progress in Particle and Nuclear Physics **59**, 497 (2007).
- [21] G. F. Bertsch, Nuclear Physics A **142**, 499 (1970).
- [22] E. Fermi, Z. Physik **88**, 161–177 (1934).
- [23] F. L. Wilson, American Journal of Physics **36**, 1150 (1968).
- [24] C. L. Cowan *et al.*, Science **124**, 103 (1956).
- [25] P. A. M. Dirac and N. H. D. Bohr, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character **114**, 243 (1927).
- [26] L. Hayen *et al.*, Rev. Mod. Phys. **90**, 015008 (2018).
- [27] M. Tanabashi *et al.* (Particle Data Group), Phys. Rev. D **98**, 030001 (2018).
- [28] M. Goldhaber, L. Grodzins, and A. W. Sunyar, Phys. Rev. **109**, 1015 (1958).
- [29] C. S. Wu *et al.*, Phys. Rev. **105**, 1413 (1957).

- [30] A. Salam and J. C. Ward, *Il Nuovo Cimento* **11**, 568–577 (1959).
- [31] S. L. Glashow, *Nuclear Physics* **10**, 107 (1959).
- [32] S. Weinberg, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1264 (1967).
- [33] N. Severijns, M. Beck, and O. Naviliat-Cuncic, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 991 (2006).
- [34] D. Perkins, *Wstęp do fizyki wysokich energii* (PWN, 2019).
- [35] K. Zuber, *Neutrino Physics* (Institute of Physics Publishing Ltd, 2004).
- [36] R. P. Feynman and M. Gell-Mann, *Phys. Rev.* **109**, 193 (1958).
- [37] Y. Nambu, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 380 (1960).
- [38] M. L. Goldberger and S. B. Treiman, *Phys. Rev.* **110**, 1178 (1958).
- [39] M. L. Goldberger and S. B. Treiman, *Phys. Rev.* **111**, 354 (1958).
- [40] K. Olive, *Chinese Physics C* **40**, 100001 (2016).
- [41] R. Blin-Stoyle, *Nuclear Physics A* **254**, 353 (1975).
- [42] F. Khanna, I. Towner, and H. Lee, *Nuclear Physics A* **305**, 349 (1978).
- [43] W. C. Haxton and E. M. Henley, *Symmetries and Fundamental Interactions in Nuclei* (WorldScientific, 1995).
- [44] J. Suhonen, *From Nucleons to Nucleus* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007).
- [45] J. T. Suhonen, *Frontiers in Physics* **5**, 55 (2017).
- [46] D. Wilkinson, *Nuclear Physics A* **225**, 365 (1974).
- [47] P. Gysbers *et al.*, *Nat. Phys.* **15**, 428–431 (2019).
- [48] J. Suhonen, *Physics Letters B* **255**, 159 (1991).
- [49] J. Delorme, M. Ericson, and P. Guichon, *Physics Letters B* **115**, 86 (1982).
- [50] M. Ichimura, H. Sakai, and T. Wakasa, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **56**, 446 (2006).
- [51] I. Towner, *Nuclear Physics A* **542**, 631 (1992).
- [52] I. Towner and F. Khanna, *Nuclear Physics A* **372**, 331 (1981).
- [53] T. Bhattacharya *et al.* (Precision Neutron Decay Matrix Elements (PNDME) Collaboration), *Phys. Rev. D* **94**, 054508 (2016).
- [54] N. Cabibbo, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 531 (1963).
- [55] M. Kobayashi and T. Maskawa, *Progress of Theoretical Physics* **49**, 652 (1973), <http://oup.prod.sis.lan/ptp/article-pdf/49/2/652/5257692/49-2-652.pdf>.
- [56] J. C. Hardy and I. S. Towner, *Proceedings of Science* **291**, 028 (2016).
- [57] M. González-Alonso, O. Naviliat-Cuncic, and N. Severijns, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **104**, 165 (2019).
- [58] C. Amsler *et al.*, *Physics Letters B* **667**, 1 (2008), review of Particle Physics.
- [59] D. Počanić *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 181803 (2004).
- [60] M. Antonelli *et al.*, *Eur. Phys. J.* **69**, 399–424 (2010).
- [61] N. Cabibbo, E. C. Swallow, and R. Winston, *Annual Review of Nuclear and Particle Science* **53**, 39 (2003).
- [62] N. Cabibbo, E. C. Swallow, and R. Winston, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 251803 (2004).
- [63] M. Tanabashi *et al.* (Particle Data Group), sec. 12 in *Phys. Rev. D* **98**, 030001 (2018).
- [64] E. Gulez *et al.* (HPQCD Collaboration), *Phys. Rev. D* **73**, 074502 (2006).
- [65] I. S. Towner and J. C. Hardy, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* **29**, 197 (2002).
- [66] D. Wilkinson, *Nuclear Physics A* **377**, 474 (1982).
- [67] J. C. Hardy and I. S. Towner, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 092502 (2005).
- [68] J. C. Hardy and I. S. Towner, *Phys. Rev. C* **71**, 055501 (2005).
- [69] W. J. Marciano and A. Sirlin, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 032002 (2006).

- [70] I. S. Towner and J. C. Hardy, Phys. Rev. C **77**, 025501 (2008).
- [71] N. Severijns, M. Tandecki, T. Phalet, and I. S. Towner, Phys. Rev. C **78**, 055501 (2008).
- [72] A. Sirlin and R. Zucchini, Phys. Rev. Lett. **57**, 1994 (1986).
- [73] W. Jaus and G. Rasche, Phys. Rev. D **35**, 3420 (1987).
- [74] A. Sirlin, Phys. Rev. D **35**, 3423 (1987).
- [75] J. Hardy, I. Towner, V. Koslowsky, E. Hagberg, and H. Schmeing, Nuclear Physics A **509**, 429 (1990).
- [76] I. Towner, Physics Letters B **333**, 13 (1994).
- [77] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and M. Rafalski, Phys. Rev. Lett. **106**, 132502 (2011).
- [78] O. Naviliat-Cuncic and N. Severijns, Phys. Rev. Lett. **102**, 142302 (2009).
- [79] M. G. Mayer, Phys. Rev. **74**, 235 (1948).
- [80] J. Dobaczewski and J. Dudek, Computer Physics Communications **102**, 166 (1997).
- [81] D. Thouless, Nuclear Physics **21**, 225 (1960).
- [82] G. C. Wick, Phys. Rev. **80**, 268 (1950).
- [83] H. Yukawa, Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series **17**, 48 (1935).
- [84] C. Lattes *et al.*, Nature **159**, 694 (1947).
- [85] M. Tanabashi *et al.* (Particle Data Group), sec. 17 in Phys. Rev. D **98**, 030001 (2018).
- [86] P. Ring, Progress in Particle and Nuclear Physics **37**, 193 (1996).
- [87] P. Guichon, J. Stone, and A. Thomas, Progress in Particle and Nuclear Physics **100**, 262 (2018).
- [88] A. I. Kostrikin, *L.D. Landau and L. P. Pitaevskii and E.M. Lifshitz* (Pergamon Press, Oxford, 1980).
- [89] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. **75**, 121 (2003).
- [90] J. Erler *et al.*, Nature **486**, 509 (2012).
- [91] B. A. Brown and W. A. Richter, Phys. Rev. C **74**, 034315 (2006).
- [92] M. Kortelainen *et al.*, Phys. Rev. C **82**, 024313 (2010).
- [93] T. Skyrme, Nuclear Physics **9**, 615 (1958).
- [94] D. Vautherin and D. M. Brink, Phys. Rev. C **5**, 626 (1972).
- [95] D. Gogny, “Proceedings of the International Conference on Nuclear Physics,” (North-Holland, Amsterdam, 1973).
- [96] J. Walecka, Annals of Physics **83**, 491 (1974).
- [97] D. Vautherin, Phys. Rev. C **7**, 296 (1973).
- [98] E. Chabanat *et al.*, Nuclear Physics A **635**, 231 (1998).
- [99] P. Klüpfel, P.-G. Reinhard, T. J. Bürvenich, and J. A. Maruhn, Phys. Rev. C **79**, 034310 (2009).
- [100] J. S. Bell and T. H. R. Skyrme, Phil. Mag. **1**, 1055 (1956).
- [101] S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, and R. J. Perry, Phys. Rev. C **75**, 061001 (2007).
- [102] H. Hergert *et al.*, Physics Reports **621**, 165 (2016).
- [103] P. Drude, Annalen der Physik **306**, 566 (1900).
- [104] E. Fermi, Z. Physik **36**, 902 (1926).
- [105] J. C. Slater, Phys. Rev. **81**, 385 (1951).
- [106] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [107] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [108] M. Levy, Proceedings of the National Academy of Sciences **76**, 6062 (1979).

- [109] M. Beiner, H. Flocard, N. V. Giai, and P. Quentin, Nuclear Physics A **238**, 29 (1975).
- [110] D. H. Youngblood, H. L. Clark, and Y.-W. Lui, Phys. Rev. Lett. **82**, 691 (1999).
- [111] B. Bally, B. Avez, M. Bender, and P.-H. Heenen, Phys. Rev. Lett. **113**, 162501 (2014).
- [112] J. Bartel *et al.*, Nuclear Physics A **386**, 79 (1982).
- [113] E. Perlińska, S. G. Rohoziński, J. Dobaczewski, and W. Nazarewicz, Phys. Rev. C **69**, 014316 (2004).
- [114] J. R. Stone, P. A. M. Guichon, P. G. Reinhard, and A. W. Thomas, Phys. Rev. Lett. **116**, 092501 (2016).
- [115] M. Anguiano, J. Egido, and L. Robledo, Nuclear Physics A **696**, 467 (2001).
- [116] L. M. Robledo, International Journal of Modern Physics E **16**, 337 (2007).
- [117] J. Dobaczewski, M. V. Stoitsov, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, Phys. Rev. C **76**, 054315 (2007).
- [118] H. Zduniczuk, W. Satuła, J. Dobaczewski, and M. Kosmulski, Phys. Rev. C **76**, 044304 (2007).
- [119] D. Lacroix, T. Duguet, and M. Bender, Phys. Rev. C **79**, 044318 (2009).
- [120] P. A. M. Guichon and A. W. Thomas, Phys. Rev. Lett. **93**, 132502 (2004).
- [121] J. Sadoudi *et al.*, Physica Scripta **T154**, 014013 (2013).
- [122] M. Dutra *et al.*, Phys. Rev. C **85**, 035201 (2012).
- [123] A. Klimkiewicz *et al.* (LAND Collaboration), Phys. Rev. C **76**, 051603 (2007).
- [124] A. Carbone *et al.*, Phys. Rev. C **81**, 041301 (2010).
- [125] P. Möller, W. D. Myers, H. Sagawa, and S. Yoshida, Phys. Rev. Lett. **108**, 052501 (2012).
- [126] E. Henley and G. Miller, “Mesons in nuclei,” (North-Holland Publishing Company, 1979) Chap. Meson theory of charge-dependent nuclear forces.
- [127] R. Machleidt, Phys. Rev. C **63**, 024001 (2001).
- [128] J. A. Nolen and J. P. Schiffer, Annual Review of Nuclear Science **19**, 471 (1969).
- [129] J. Carlson *et al.*, Rev. Mod. Phys. **87**, 1067 (2015).
- [130] B. A. Brown, W. A. Richter, and R. Lindsay, Physics Letters B **483**, 49 (2000).
- [131] O. W. E. and B. A. Brown, Nuclear Physics A **491**, 1 (1989).
- [132] K. Kaneko, Y. Sun, T. Mizusaki, and S. Tazaki, Phys. Rev. Lett. **110**, 172505 (2013).
- [133] P. Bączyk, W. Satuła, J. Dobaczewski, and M. Konieczka, Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **46**, 03LT01 (2019).
- [134] P. Bączyk *et al.*, Acta Phys. Pol. B **51**, 611 (2020).
- [135] “Evaluated Nuclear Structure Data File,” www.nndc.bnl.gov/ensdf/.
- [136] H. A. Jahn, E. Teller, and F. G. Donnan, Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences **161**, 220 (1937).
- [137] S. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **29**, No. 16, 1 (1955).
- [138] W. Satuła and R. Wyss, Phys. Rev. Lett. **86**, 4488 (2001).
- [139] W. Satuła and R. Wyss, Phys. Rev. Lett. **87**, 052504 (2001).
- [140] K. Sato, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, and W. Satuła, Phys. Rev. C **88**, 061301 (2013).
- [141] H. J. Lipkin, Annals of Physics **9**, 272 (1960).
- [142] X. B. Wang *et al.*, Phys. Rev. C **90**, 014312 (2014).
- [143] Y. Nogami, Phys. Rev. **134**, B313 (1964).
- [144] Y. Nogami, Physics Letters **15**, 335 (1965).

- [145] J. A. Sheikh *et al.*, “Symmetry restoration in mean-field approaches,” (2019), arXiv:1901.06992 [nucl-th] .
- [146] S. Ripka, J. Blaizot, and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (MIT Press, 1986).
- [147] D. L. Hill and J. A. Wheeler, Phys. Rev. **89**, 1102 (1953).
- [148] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, Phys. Rev. **108**, 311 (1957).
- [149] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and M. Rafalski, Phys. Rev. Lett. **103**, 012502 (2009).
- [150] M. Rafalski, *Efekty naruszenia symetrii izobarycznej w jądrach atomowych*, Ph.D. thesis, Uniwersytet Warszawski (2012).
- [151] E. Farnea *et al.*, Physics Letters B **551**, 56 (2003).
- [152] A. Corsi *et al.*, Phys. Rev. C **84**, 041304 (2011).
- [153] W. Satuła and J. Dobaczewski, Phys. Rev. C **90**, 054303 (2014).
- [154] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and T. R. Werner, Phys. Rev. C **86**, 054316 (2012).
- [155] M. Konieczka, *Superdozwolone przejścia beta Fermiego w teorii wychodzącej poza jądrowy funkcjonal gęstości z rzutowaniem na określony moment pędu i izospin*, Master’s thesis, Uniwersytet Warszawski (2014).
- [156] I. S. Towner and J. C. Hardy, Phys. Rev. C **82**, 065501 (2010).
- [157] W. E. Ormand, Phys. Rev. C **53**, 214 (1996).
- [158] J. C. Hardy and I. S. Towner, Phys. Rev. C **79**, 055502 (2009).
- [159] H. Sagawa, N. V. Giai, and T. Suzuki, Phys. Rev. C **53**, 2163 (1996).
- [160] H. Liang, N. V. Giai, and J. Meng, Phys. Rev. C **79**, 064316 (2009).
- [161] L. J. Broussard *et al.*, Phys. Rev. Lett. **112**, 212301 (2014).
- [162] B. Fenker *et al.*, Phys. Rev. Lett. **120**, 062502 (2018).
- [163] D. Melconian *et al.*, Physics Letters B **649**, 370 (2007).
- [164] P. D. Shidling *et al.*, Phys. Rev. C **90**, 032501 (2014).
- [165] J. D. Garnett, E. D. Commins, K. T. Lesko, and E. B. Norman, Phys. Rev. Lett. **60**, 499 (1988).
- [166] A. Converse *et al.*, Physics Letters B **304**, 60 (1993).
- [167] J. Grinyer *et al.*, Phys. Rev. C **91**, 032501 (2015).
- [168] G. S. Masson and P. A. Quin, Phys. Rev. C **42**, 1110 (1990).
- [169] B. Brown and B. Wildenthal, Atomic Data and Nuclear Data Tables **33**, 347 (1985).
- [170] J. Menéndez, D. Gazit, and A. Schwenk, Phys. Rev. Lett. **107**, 062501 (2011).
- [171] A. Ekström *et al.*, Phys. Rev. Lett. **113**, 262504 (2014).
- [172] G. Martínez-Pinedo, A. Poves, E. Caurier, and A. P. Zuker, Phys. Rev. C **53**, R2602 (1996).
- [173] T. Sekine *et al.*, Nuclear Physics A **467**, 93 (1987).
- [174] W.-T. Chou, E. K. Warburton, and B. A. Brown, Phys. Rev. C **47**, 163 (1993).
- [175] H. Li and Z. Ren, Sci. China Phys. Mech. Astron. **57** (2014), 10.1007/s11433-014-5456-7.
- [176] P. Pirinen and J. Suhonen, Phys. Rev. C **91**, 054309 (2015).
- [177] E. Caurier, F. Nowacki, and A. Poves, Physics Letters B **711**, 62 (2012).
- [178] J. Barea, J. Kotila, and F. Iachello, Phys. Rev. C **91**, 034304 (2015).
- [179] E. Caurier *et al.*, Rev. Mod. Phys. **77**, 427 (2005).
- [180] B. Brown, Progress in Particle and Nuclear Physics **47**, 517 (2001).
- [181] Kumar, Vikas and Srivastava, P. C., Eur. Phys. J. A **52**, 181 (2016).
- [182] H. Nakata, T. Tachibana, and M. Yamada, Nuclear Physics A **625**, 521 (1997).

- [183] P. Sarriguren, E. M. de Guerra, A. Escuderos, and A. Carrizo, Nuclear Physics A **635**, 55 (1998).
- [184] J. Engel *et al.*, Phys. Rev. C **60**, 014302 (1999).
- [185] P. Möller, B. Pfeiffer, and K.-L. Kratz, Phys. Rev. C **67**, 055802 (2003).
- [186] N. Paar, T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, Phys. Rev. C **69**, 054303 (2004).
- [187] M. T. Mustonen and J. Engel, Phys. Rev. C **93**, 014304 (2016).
- [188] A. Petrovici, K. Schmid, and A. Faessler, Progress in Particle and Nuclear Physics **66**, 287 (2011), particle and Nuclear Astrophysics.
- [189] A. Petrovici and O. Andrei, Phys. Rev. C **92**, 064305 (2015).
- [190] A. Petrovici, K. W. Schmid, O. Andrei, and A. Faessler, Phys. Rev. C **80**, 044319 (2009).
- [191] B. Blank and M. Borge, Progress in Particle and Nuclear Physics **60**, 403 (2008).
- [192] K. Riisager, Nuclear Physics A **925**, 112 (2014).
- [193] F. Barker and E. Warburton, Nuclear Physics A **487**, 269 (1988).
- [194] D. Tilley *et al.*, Nuclear Physics A **745**, 155 (2004).
- [195] M. Borge *et al.*, Nuclear Physics A **560**, 664 (1993).
- [196] F. Barker, Nuclear Physics A **609**, 38 (1996).
- [197] N. Kumar, Nuclear Physics A **225**, 221 (1974).
- [198] P. Maris *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 202502 (2011).
- [199] P. Maris, M. A. Caprio, and J. P. Vary, Phys. Rev. C **91**, 014310 (2015).
- [200] F. Ajzenberg-Selove, Nuclear Physics A **413**, 1 (1984).
- [201] C. Hinke *et al.*, Nature **486**, 341 (2012).
- [202] C. Plettner *et al.*, Phys. Rev. C **66**, 044319 (2002).
- [203] L. Coraggio, A. Covello, A. Gargano, and N. Itaco, Phys. Rev. C **70**, 034310 (2004).