
ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΣΥΝΑΛΛΟΙΩΤΗΣ ΘΕΩΡΙΑΣ
ΣΥΝΑΡΤΗΣΘΕΙΔΩΝ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ
ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ
ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΚΑΡΑΚΑΤΣΑΝΗΣ

*Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης
Τμήμα Φυσικής*

Τομέας Πυρηνικής Φυσικής και Στοιχειωδών Σωματιδίων

ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗ 2017

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΚΑΡΑΚΑΤΣΑΝΗΣ

**ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΣΥΝΑΛΛΟΙΩΤΗΣ ΘΕΩΡΙΑΣ
ΣΥΝΑΡΤΗΣΟΕΙΔΩΝ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ
ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΔΟΜΗΣ**

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Υποβλήθηκε στο Τμήμα Φυσικής,
Τομέας Πυρηνικής Φυσικής και Φυσικής Στοιχειωδών Σωματιδίων,
Σ.Θ.Ε., Α.Π.Θ.

Στο πλαίσιο του προγράμματος
“ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ ΑΡΙΣΤΕΙΑΣ Ι.Κ.Υ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΣΤΗΝ ΕΛΛΑΔΑ - ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ SIEMENS.”

ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Γεώργιος Λαλαζήσης (Επιβλέπων)

Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Σ.Θ.Ε./Α.Π.Θ

**Χαράλαμπος Μουστακίδης (Μέλος τριμελούς συμβουλευτικής
επιτροπής)**

Επίκουρος καθηγητής Τμήματος Φυσικής Σ.Θ.Ε./Α.Π.Θ

Θεόδωρος Γαϊτάνος (Μέλος τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής)

Επίκουρος καθηγητής Τμήματος Φυσικής Σ.Θ.Ε./Α.Π.Θ

Νικόλαος Βλάχος

Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Σ.Θ.Ε./Α.Π.Θ

Αναστάσιος Πέτκου

Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Σ.Θ.Ε./Α.Π.Θ

Διονύσης Μπονάτσος

Διευθυντής έρευνας, Ινστιτούτο Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής
του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»

Γεώργιος Σουλιώτης

Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήματος Χημείας Ε.Κ.Π.Α.

Ευχαριστίες

Η διεκπεραίωση της έρευνας που περιλαμβάνεται στην παρούσα διατριβή έγινε στο πλαίσιο του προγράμματος ανακήρυξης διδακτορικών θέσεων του Τμήματος Φυσικής της Σχολής Θετικών Επιστημών του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης. Η ολοκλήρωση της κατέστη δυνατή μέσα από την σημαντική οικονομική υποστήριξη του Ιδρύματος Κρατικών Υποτροφιών (Ι.Κ.Υ.) και συγκεκριμένα στο πλαίσιο του προγράμματος: “ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ ΑΡΙΣΤΕΙΑΣ Ι.Κ.Υ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ ΣΤΗΝ ΕΛΛΑΔΑ - ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ SIEMENS”, τους ανθρώπους του οποίου θα ήθελα να ευχαριστήσω για την τεχνική και οικονομική βοήθεια, ιδιαίτερα σε αυτήν την πολύ δύσκολη περίοδο.

Το τελικό αποτέλεσμα είναι απότοκος μίας μακρόχρονης και επίπονης προσπάθειας με αρκετές περιόδους αμφιβολίας και παλινδρόμησης, μια διαδικασία που απαιτεί αρκετή προσωπική αφοσίωση. Η προσπάθεια αυτή δε θα μπορούσε να έχει επιτυχές αποτέλεσμα χωρίς την απαραίτητη συνεργασία και ουσιαστική υποστήριξη ανθρώπων στους οποίους θα ήθελα σε αυτό το σημείο να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου.

Πρώτο απ’ όλους, θα ήθελα να ευχαριστήσω ολόψυχα τον επιβλέποντα της διδακτορικής διατριβής κ.Γ. Λαλαζήση. Καθηγητή του Τμήματος Φυσικής Σ.Θ.Ε/Α.Π.Θ. Αρχικά, επειδή με εμπιστεύτηκε και με τίμησε δίνοντας μου τη δυνατότητα να εργαστώ υπό την καθοδήγησή του. Επίσης για το γεγονός ότι με έφερε σε προσωπική επαφή με τον Καθηγητή Peter Ring, Physik Department, Technische Universität Munchen, ο οποίος είναι από τους πιο σημαντικούς επιστήμονες στο πεδίο της θεωρητικής πυρηνικής φυσικής και τον ευχαριστώ θερμά για την αδιάκοπη συνεργασία που είχαμε από την αρχή μέχρι το τέλος και για την άμεση ανταπόκριση ακόμα και στα πιο στοιχειώδη προβλήματα που αντιμετώπιζα σχετικά με την έρευνα. Η συνεισφορά και των δύο ήταν καθοριστικής σημασίας στην προσωπική μου έρευνα, η οποία ουσιαστικά αποτελεί ένα μικρό μέρος του πεδίου το οποίο για χρόνια έχουν εργαστεί και έχουν αναπτύξει στη σύγχρονη μορφή του. Είναι τιμή μου που με εισήγαγαν και με βοήθησαν να μυηθώ σε ένα πρωτόγνωρο για μένα πεδίο έρευνας της φυσικής.

Επίσης, για τη συμμετοχή τους στην τριμελή επιτροπή αλλά και τις χρήσιμες συμβουλές και παρατηρήσεις τους, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους καθηγητές του Τμήματος Φυσικής της Σ.Θ.Ε/Α.Π.Θ κ. Στυλιανό Μάσεν, κ. Χαράλαμπο Μουστακίδη και κ. Θεόδωρο Γαϊτάνο ο οποίος αντικατέστησε τον πρώτο. Ακόμη, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή του τμήματος κ. Αναστάσιο Πέτκου ο οποίος μαζί με τον κ. Λαλαζήση και τον κ. Μουστακίδη έγραψαν τις συστατικές επιστολές με τις οποίες μπόρεσα να λάβω την υποτροφία από το Ι.Κ.Υ..

Φυσικά, ευχαριστώ πολύ για τη συμβολή τους και τα εξωτερικά μέλη της εξεταστικής επιτροπής. Τον κύριο Διονύση Μπονάτσο, διευθυντή έρευνας, στο Ινστιτούτο Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», και τον

κ. Γεώργιο Σουλιώτη, αναπληρωτή καθηγητή του Τμήματος Χημείας Ε.Κ.Π.Α..

Σημαντική συνεισφορά στο ερευνητικό έργο είχε και η καθηγήτρια Elena Litvinova του Department of Physics, Western Michigan University, με την οποία συνεργαστήκαμε σε ένα ιδιαίτερο κομμάτι της διατριβής στο οποίο η εξειδίκευσή της συνέβαλλε στην ολοκλήρωσή του.

Κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της διατριβής, είχα την ευκαιρία να συμμετάσχω σε θερινά σχολεία, διεθνή συνέδρια και σεμινάρια και να συνομιλήσω με πολλούς καθηγητές και παλιούς και νέους ερευνητές στον τομέα της πυρηνικής φυσικής. Από τις πιο εποικοδομητικές συνομιλίες ήταν αυτή με τον Dr. Olivier Sorlin, ο οποίος εργάζεται στο κέντρο πυρηνικών ερευνών GANIL στη Γαλλία, και ήταν υπεύθυνος σε δύο πειράματα που αποτέλεσαν την αφορμή για την έρευνα που περιγράφεται στο Κεφ. 4 του παρόντος βιβλίου.

Επίσης πολύ σημαντική βοήθεια έλαβα από τη Δρ. του Τμήματος Φυσικής του Α.Π.Θ. Βάια Πρασσά. Ιδιαίτερα σε τεχνικά θέματα σχετικά με λεπτομέρειες του αριθμητικού κώδικα όπως και σε άλλα ζητήματα που με απασχόλησαν σε διάφορες στιγμές της συνολικής διαδικασίας. Την ευχαριστώ θερμά για την υπομονή και την προθυμία να απαντήσει ακόμα και στα πιο τετριμμένα ερωτήματά μου.

Για την ολοκλήρωση των απαιτητικών αριθμητικών υπολογισμών ειδικά για το τελευταίο κομμάτι της εργασίας, οφείλω να ευχαριστήσω τους ανθρώπους του Κέντρου Ηλεκτρονικής Διακυβέρνησης του ΑΠΘ, για την πρόσβαση στην ιδρυματική συστοιχία ΑΦΡΟΔΙΤΗ, μέρους του υπολογιστικού δικτύου HELLASGRID.

Κλείνοντας θα ήθελα να ευχαριστήσω του συγγενείς και πολύ κοντινούς μου ανθρώπους για την ηθική και ψυχολογική υποστήριξη και για τις πρακτικές διευκολύνσεις που μου προσέφεραν όταν τις είχα ανάγκη.

Πάνω απ' όλους ευχαριστώ τους γονείς μου και τα αδέρφια μου. Είναι οι πιο σημαντικοί υποστηρικτές, όχι μόνο κατά τη διάρκεια της έρευνας του διδακτορικού αλλά και σε όλα μου τα προηγούμενα βήματά, παρέχοντας ουσιαστικά τη δυνατότητα και την ελευθερία να σπουδάσω και να πετύχω τους στόχους μου, δίνοντας μου κουράγιο να συνεχίσω και να ξεπεράσω όσες δυσκολίες συνάντησα στην πορεία μέχρι αυτό το σημείο. Η συγκεκριμένη εργασία ανήκει και σ' αυτούς.

Περίληψη

Ο σκοπός της διατριβής είναι η μελέτη φυσικών φαινομένων σχετικά με την δομή πυρηνικών συστημάτων. Οι πυρήνες συνιστούν κβαντομηχανικά συστήματα πολλών σωμάτων, αποτελούμενων από νουκλεόνια, δηλαδή πρωτόνια και νετρόνια. Για την περιγραφή τους έχουν αναπτυχθεί ιστορικά αρκετά πυρηνικά μοντέλα τα οποία χωρίζονται σε δύο κατηγορίες τα μακροσκοπικά και τα μικροσκοπικά.

Η βάση της παρούσας ανάλυσης είναι η μικροσκοπική προσέγγιση της θεωρίας του μέσου-πεδίου. Τα νουκλεόνια αντιμετωπίζονται ως μεμονωμένα σωματίδια τα οποία κινούνται στο εσωτερικό του πυρήνα, υπό την επίδραση ενός μέσου πεδίου, προερχόμενο θεωρητικά από την αλληλεπίδραση νουκλεονίου-νουκλεονίου. Επειδή, η ακριβής θεωρητική περιγραφή της συγκεκριμένης αλληλεπίδρασης στο εσωτερικό του πυρήνα δεν έχει διατυπωθεί, η εξαγωγή του μέσου-πεδίου προκύπτει από φαινομενολογικές αλληλεπιδράσεις. Στην δική μας περίπτωση ορίζουμε μία Λανγκραντζιανή συνάρτηση, η οποία ικανοποιεί τους σχετικιστικούς μετασχηματισμούς Lorentz. Έτσι, τα νουκλεόνια θεωρούνται σωματίδια Dirac και η αλληλεπίδραση μεταξύ τους προσεγγίζεται από την ανταλλαγή ενός ελάχιστου αριθμού υποθετικών μεσονίων. Οι μάζες και οι σταθερές σύζευξης καθορίζονται φαινομενολογικά με την προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα πεπερασμένων πυρήνων. Ανάλογα με το είδος της αλληλεπίδρασης και τις μεθόδους προσαρμογής των παραμέτρων, μπορούν να προκύψουν και αντίστοιχα συναλλοιώτα ενεργειακά συναρτησοειδή πυκνότητας, τα οποία αποτελούν την βάση για την εξαγωγή του σχετικιστικού μέσου-πεδίου.

Στο πλαίσιο του θεωρητικού μοντέλου που περιγράφηκε περιληπτικά, μελετήσαμε δύο πολύ συγκεκριμένα φαινόμενα που σχετίζονται με τη μονοσωματιδιακή πυρηνική δομή.

Εξάρτηση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν στους $= 20$ ισότονους πυρήνες. Το πρώτο πρόβλημα που μελετήσαμε αφορά την αλληλεπίδραση που προκύπτει από τη σύζευξη σπιν-τροχιάς (στροφορμής). Η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς είναι από τα πιο σημαντικά χαρακτηριστικά της πυρηνικής δύναμης καθώς η εισαγωγή της επέτρεψε την ακριβή περιγραφή του σημαντικότερου φαινομένου της εμφάνισης των πυρηνικών φλοιών. Ένα από τα πιο σπουδαία πλεονεκτήματα της προσέγγισης του σχετικιστικού μέσου-πεδίου, είναι η εμφάνιση της σύζευξης σπιν-τροχιάς από τη δομή της εξίσωσης Dirac χωρίς την ανάγκη εισαγωγής επιπρόσθετου όρου, όπως συνήθως γίνεται στη μη-σχετικιστική προσέγγιση. Ιστορικά, έχει καταγραφεί από τις αρχές τις σχετικιστικής προσέγγισης, η επιτυχής περιγραφή φαινομένων που επηρεάζονται από την εν λόγω αλληλεπίδραση. Πρόσφατα, υπήρξε η αναφορά σημαντικών πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων τα οποία είχαν στόχο την επανεξέταση της εξάρτησης της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν του πυρήνα. Έτσι, μετρήθηκαν σε ισότονους

πυρήνες με $A = 20$, οι ενεργειακοί διαχωρισμοί ανάμεσα σε συγκεκριμένες νετρονιακές μονοσωματιδιακές καταστάσεις, τα μεγέθη των οποίων καθορίζονται κυρίως από τη σύζευξη σπιν-τροχιάς. Ακολουθώντας τη διαδικασία του πειράματος, υπολογίσαμε τις ίδιες ενεργειακές διαφορές για του ίδιους πυρήνες χρησιμοποιώντας διάφορα είδη συναλλοιώτων συναρτησοειδών πυκνότητας τριών διαφορετικών τύπων

- Ανταλλαγής μεσονίων με μη γραμμική σύζευξη.
- Ανταλλαγής μεσονίων με σταθερές σύζευξης εξαρτώμενες από την πυκνότητα.
- Σημειακής σύζευξης με σταθερές σύζευξης εξαρτώμενες από την πυκνότητα.

Για τη συγκριτική ανάλυση της επίδρασης διαφόρων χαρακτηριστικών της πυρηνικής δύναμης, η μελέτη του συγκεκριμένου προβλήματος ολοκληρώθηκε σε τρία βήματα. Αρχικά, υπολογίστηκαν οι μονοσωματιδιακές ενέργειες των νετρονίων στο καθαρό μέσο-πεδίο. Στη συνέχεια έγινε η εισαγωγή των συσχετίσεων ζεύγους στους πυρήνες που έχουν ανοιχτό πρωτονιακό φλοιό. Τέλος, πραγματοποιήθηκε επέκταση του καθιερωμένου σχετικιστικού μέσου-πεδίου, μελετώντας ξεχωριστά α) την ενσωμάτωση της τανυστικού χαρακτήρα ανταλλαγής ενός πιονίου και β) την επίδραση της σύζευξης σωματιδίου-δονήσεων. Σε κάθε ξεχωριστό βήμα τα τελικά αποτελέσματα συγκρίνονται με τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα και τους θεωρητικούς υπολογισμούς από μη σχετικιστικά συναρτησοειδή πυκνότητας.

K-ισομερείς πυρήνες. Το δεύτερο πρόβλημα που εξετάστηκε αφορούσε την δημιουργία K-ισομερών σε βαρείς και υπερβαρείς πυρήνες. Οι K-ισομερείς είναι μετασταθείς διεγερμένες καταστάσεις πυρήνων μονοσωματιδιακής φύσης, οι οποίες εμφανίζονται κυρίως σε βαρείς πυρήνες που έχουν καλά καθορισμένη αξονική συμμετρία. Σε μια τέτοια περίπτωση, ο κβαντικός αριθμός που ορίζεται από την προβολή της συνολικής στροφορμής στον άξονα συμμετρίας αποτελεί μαζί με την ομοτιμία, τους καλούς κβαντικούς αριθμούς που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή του συστήματος. Σε αρκετούς βαρείς πυρήνες έχουμε την εμφάνιση μονοσωματιδιακών καταστάσεων με υψηλές τιμές του σπιν κοντά στην επιφάνεια Fermi. Με μία μικρή ποσότητα ενέργειας που απαιτείται κυρίως για το σπάσιμο ενός ζεύγους νουκλεονίων κοντά στην επιφάνεια Fermi, γίνεται δυνατή η δημιουργία μονοσωματιδιακών διεγέρσεων με τον συνδυασμό συγκεκριμένων καταστάσεων. Επειδή, όπως είπαμε οι καταστάσεις αυτές έχουν μεγάλη τιμή του K, η αποδιέγερση στη βασική κατάσταση είναι σημαντικά περιορισμένη

εξαιτίας της μεγάλης μεταβολής στη στροφορμή που αυτή συνεπάγεται. Ως αποτέλεσμα, οι συγκεκριμένες διεγερμένες καταστάσεις μπορούν να έχουν σχετικά μεγάλους χρόνους ζωής, που σε πολλές περιπτώσεις ξεπερνούν τους αντίστοιχους των βασικών καταστάσεων. Όπως γίνεται αντιληπτό η σωστή περιγραφή της μονοσωματιδιακής δομής, ιδιαίτερα γύρω από την επιφάνεια Fermi είναι σημαντική για την ανάλυση των K-ισομερών. Λαμβάνοντας υπ' όψιν το αποτέλεσμα του πρώτου προβλήματος, χρησιμοποιήσαμε εδώ τα συναρτησοειδή που ήταν πιο επιτυχή στην περιγραφή του. Για τη δημιουργία των διεγερμένων καταστάσεων, στο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας μέσου-πεδίου εφαρμόσαμε το φαινόμενο του μπλοκαρίσματος. Αρχικά, μελετήσαμε την κατανομή των μονοσωματιδιακών καταστάσεων γύρω από την επιφάνεια Fermi, στη βασική κατάσταση πυρήνων όπου πειραματικά εμφανίζονται K-ισομερείς. Αυτό έγινε και με την κατασκευή διαγραμμάτων αντίστοιχων με τα διαγράμματα Nilsson, όπου φαίνεται η εξέλιξη των μονοσωματιδιακών καταστάσεων σε σχέση με την αύξηση της αξονική παραμόρφωσης. Στη συνέχεια μπλοκάροντας τις απαραίτητες καταστάσεις προχωρήσαμε στη δημιουργία διεγερμένων καταστάσεων με συγκεκριμένες τιμές του K. Υπολογίζοντας την συνολική ενέργεια και παίρνοντας τη διαφορά από την αντίστοιχη βασική κατάσταση, βρίσκουμε την ενέργεια διέγερσης του συγκεκριμένου K-ισομερούς. Βασικός μας στόχος είναι η αξιολόγηση της συγκεκριμένης μεθόδου, οπότε επικεντρωθήκαμε σε περιοχές πυρήνων όπου έχουν ανακαλυφθεί πειραματικά και έχουν μετρηθεί με ακρίβεια K-ισομερείς. Κάτι που γίνεται για πρώτη φορά στο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας μέσου-πεδίου.

Abstract

The scope of the thesis is the study of physical phenomena regarding the structure of nuclear systems. Nuclei consist quantum mechanical systems of many bodies, which are of two types neutrons and protons collectively called nucleons. For their description there have been developed historically several nuclear models which are divided into two categories; macroscopic and microscopic.

The framework of the present analysis is the microscopic approach of mean field theory. Nucleons are treated as independent particles that move in the interior of the nucleus, under the influence of a mean field, which effectively produced by the interaction between the nucleons. Since, the exact theoretical description of the nucleon nucleon interaction inside the nuclear medium, has not yet been derived, the mean field is produced by phenomenological interactions. In our case we define a Lagrangian, which is invariant under the Lorentz transformations. Thus, nucleons become Dirac particles and the interaction between them is approximated by the exchange of a minimal number of virtual mesons. The masses and coupling constants are adjusted to experimental data from finite nuclei. Based on the type of interaction, one can formulate several covariant density functionals of the energy, from which the relativistic mean field is derived.

In the framework of this theory we studied two very specific phenomena that are related to the single particle structure of nuclei.

Isospin dependence of the Spin-Orbit term in $N = 20$ isotones. The first problem we studied is about the interaction that arises from the coupling of spin and angular momentum. Usually referred to as the spin-orbit interaction, it is one of the most important properties of the nuclear dynamics since its introduction has allowed for the exact description of the shell structure in nuclei. One of the major advantages of the relativistic mean field approach, is the occurrence of the spin-orbit coupling directly from the formalism of the Dirac equation. So there is no need for additional terms to account for it, as it is usually the case in non relativistic models. Even from the first attempt to formulate a relativistic meson exchange model, it has been recognized the successful inclusion of spin-orbit term. Recently, there has been the report of important experimental and theoretical results which had as an objective the examination of the isospin and density dependence of the spin-orbit coupling. So, the energy splittings between specific neutron single particle states were evaluated, the sized of which are determined mainly by the spin-orbit interaction. Following the procedure of the experiment we calculated the same energy splittings for the same nuclei using various types of covariant density functionals

- Meson exchange with non linear coupling,

- Meson exchange with density dependent coupling constants,
- Point coupling with density dependent coupling constants,

For the comparative analysis of the influence coming from different properties of the nuclear force, the study of the specific problem was completed in three steps. At first, the single particle energies of neutrons were calculated in the pure mean field. In the next step, pairing correlations were included for nuclei with open proton shell. Finally, extensions of the standard relativistic mean field were considered, such as a) the inclusion of the tensor force coming from one pion exchange and b) the effect of particle vibration coupling. In each separate step the final results are compared with the corresponding experimental data and theoretical calculations from non relativistic density functionals.

***K*-isomers.** The second problem that was investigated within this PhD work, was the creation of *K*-isomer heavy and super-heavy nuclei. *K*-isomers are metastable excited nuclear states of single particle nature, which appear in heavy nuclei with well deformed axially symmetric shape. In a case like that, the quantum number that is defined by the projection of the total angular momentum in the symmetry axis, along with parity, are the two quantum numbers used to describe the system. In many heavy nuclei we have the occurrence of single particle states with high spin values close to the Fermi surface. With a small amount of energy that is required to break a nucleon pair, it is possible to create single particle excitations. Since, these states carry high-*K* values, the de-excitation to the ground state would require a high multipolarity transition which is significantly hindered. As a result, the particular excited states can have relatively large lifetimes which in many cases exceed the corresponding ground state.

It is understandable that the correct description of the single-particle structure, especially around the Fermi surface, is important for the *K*-isomers analysis. Considering the results of the previous problem, we use now the functionals that were the most successful. For the construction of the excited states, in the framework of relativistic mean field theory, the blocking effect was implemented. Initially, we studied the distribution of single particle states close to the Fermi surface, in the ground state of nuclei where there is systematic existence of specific *K*-isomers. This was done with the creation of diagrams similar with the Nilsson diagrams, where one can see the evolution of single particle orbits with respect to the axial deformation. Following their identification we proceed with the blocking the necessary state for the creation of excited states with specific *K*-values. Calculating the total energy and taking the difference between the corresponding ground state, we find the excitation energy of the *K*-isomer. Our main objective is the evaluation of the particular method. Thus, we concentrated in areas of the nuclide chart

where K -isomers have been discovered experimentally and their energy has been measured accurately.

Περιεχόμενα

1	Συναρτησοειδή πυκνότητας	1
1.1	Kohn-Sham συναρτησοειδή πυκνότητας	1
1.2	Ιστορικά στοιχεία για τη θεωρία πυρηνικών συναρτησοειδών πυκνότητας	4
1.3	Βαθμοί ελευθερίας στη πυρηνική θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας	6
1.4	Η πολυπλοκότητα της πυρηνικής δύναμης	11
1.5	Φαινομενολογία στα πυρηνικά συναρτησοειδή πυκνότητας	14
1.6	Προς την <i>ab-initio</i> δημιουργία πυρηνικών συναρτησοειδών	16
1.7	Οι πυρήνες είναι αυτό-δέσμια συστήματα	17
1.8	Τα όρια της περιγραφής του μέσου-πεδίου στους πυρήνες	18
2	Σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου	21
2.1	Σχετικιστική θεωρία ανταλλαγής μεσονίων	22
2.2	Η σχετικιστική θεωρία σημειακής-σύζευξης	29
2.3	Συναλλοιώτη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας με συσχετίσεις ζεύγους	32
2.3.1	Γενικευμένες έννοιες μέσου-πεδίου στους πυρήνες	32
2.4	Σχετικιστική θεωρία Hartree-Bogoliubov	33
2.4.1	Διάφορες δυνάμεις ζευγαρώματος	37
2.5	Εφαρμογή σε πεπερασμένους πυρήνες	40
2.5.1	Σφαιρικοί πυρήνες	42
2.5.2	Αξονικά παραμορφωμένοι πυρήνες	45
3	Επεκτάσεις της θεωρίας	49
3.1	Τανυστικές δυνάμεις	49
3.1.1	Γενικά χαρακτηριστικά της τανυστικής δύναμης	51
3.1.2	Τανυστικές δυνάμεις και ο ρόλος του πιονίου στη συναλλοιώτη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας	53
3.2	Σύζευξη ημι-σωματιδίου δονήσεων	58
3.2.1	Χρονικά εξαρτημένη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας	59

3.2.2	Φαινόμενα σύζευξης ημισωματιδίου-δόνησης στη δομή πυρηνικών φλοιών	63
3.2.3	Χρονικές και χωρικές μη-τοπικότητες στον μονοσωματιδιακό τελεστή μάζας	64
3.2.4	Διαχωρισμός των μονοσωματιδιακών καταστάσεων	67
4	Εξάρτηση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν στους $N=20$ ισότονους πυρήνες	69
4.1	Εισαγωγή	69
4.2	Εξάρτηση του σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν	73
4.3	Λεπτομέρειες των αριθμητικών υπολογισμών	77
4.4	Αριθμητικά αποτελέσματα	81
4.4.1	Καθαρό Μέσο-Πεδίο	86
4.4.2	Η επίδραση των συσχετίσεων ζεύγους	93
4.4.3	Οι τανυστικές δυνάμεις και η σύζευξη σωματιδίου-δόνησης	112
4.5	Συμπεράσματα	124
5	K-Ισομερείς πυρήνες	129
5.1	Εισαγωγή	129
5.2	Πυρηνική Ισομέρεια	130
5.3	Εφαρμογές των ισομερών στην διαχείριση ενέργειας	133
5.3.1	Υπόβαθρο	133
5.3.2	Ισομερείς “αποθήκευσης” ενέργειας	135
5.3.3	Πειραματικές έρευνες για την επαγόμενη απομείωση ισομερών	136
5.3.4	Laser ακτινοβολίας γ	137
5.4	Βασικό υπόβαθρο του σχηματισμού ισομερών	138
5.4.1	K -ισομερείς σε παραμορφωμένους πυρήνες	139
5.4.2	K -Ισομερείς στο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας Hartree-Bogoliubov	141
5.5	Παραμορφωμένοι και μεταβατικοί πυρήνες με $A \approx 160 - 190$	145
5.5.1	Διεγέρσεις πολλών ημισωματιδίων-κοινά δομικά στοιχεία και χαρακτηριστικά παραδείγματα K -ισομερών	145
5.5.2	Διαγράμματα Nilsson με τη σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου	149
5.5.3	Οι 6^+ K -ισομερείς στα ισότοπα του Hf και στους $N = 104$ ισότονους πυρήνες	150
5.5.4	Οι 8^- K -ισομερείς στους $N = 106$ ισότονους πυρήνες	172
5.6	Υπερβαρείς παραμορφωμένοι πυρήνες με $A \approx 250$	176
5.7	Σύνοψη και συμπεράσματα	180

Κεφάλαιο 1

Συναρτησοειδή πυκνότητας

1.1 Kohn-Sham συναρτησοειδή πυκνότητας

Η θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας (density functional theory-DFT) είναι μία από τις πιο δημοφιλείς και επιτυχείς *ab initio*, δηλαδή από θεμελιακές αρχές, προσεγγίσεις σε κβαντομηχανικά συστήματα πολλών σωμάτων όπως άτομα, μόρια, στερεά. Η βασική ιδέα είναι ότι η ενέργεια της βασικής κατάστασης ενός στατικού κβαντομηχανικού συστήματος, μπορεί να περιγραφεί χρησιμοποιώντας μόνο την πυκνότητα της βασικής κατάστασης. Οι υπολογισμοί της DFT είναι συγκριτικά απλοί να εφαρμοστούν και συχνά πολύ ακριβείς και υπολογιστικά εφικτοί ακόμα και για συστήματα με μεγάλους αριθμούς σωμάτων. Αυτό συμβαίνει καθώς δεν προσπαθούμε να αντιμετωπίσουμε το πολύπλοκο πρόβλημα εύρεσης μιας κυματοσυνάρτησης N -σωμάτων με $3N$ αριθμό συντεταγμένων, αλλά χρησιμοποιούμε την πυκνότητα που είναι συνάρτηση μόνο των τριών χωρικών διαστάσεων για την δημιουργία ενός συναρτησοειδούς της ενέργειας. Στην ουσία θεωρούμε τα σωματίδια του συστήματος ότι κινούνται ανεξάρτητα ανεξάρτητα το ένα από το άλλο υπό την επίδραση του συγκεκριμένου εξωτερικού πεδίου.

Η DFT ξεκινάει με το θεώρημα Hohenberg-Kohn (HK)[1]: Για ένα ηλεκτρομαγνητικό σύστημα πολλών σωμάτων σε ένα εξωτερικό πεδίο $v_{ext}(\mathbf{r})$ υπάρχει ένα ενεργειακό συναρτησοειδές $E_v[\rho]$ της πυκνότητας $\rho(r)$, τέτοιο ώστε η συνολική του ενέργεια να δίνεται από

$$E_v[\rho] = F_{HK}[\rho] + \int d^3\mathbf{r} v_{ext}(\mathbf{r})\rho(r) \quad (1.1)$$

Το συναρτησοειδές F_{HK} δεν εξαρτάται από το εξωτερικό δυναμικό ούτε από τον αριθμό των σωματιδίων του συστήματος. Εξαρτάται μόνο από το είδος της αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Υπό αυτήν την έννοια, το ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας υποτίθεται ότι είναι καθολικό. Φυσικά, στους πυρήνες κυριαρχεί η ισχυρή αλληλεπίδραση η οποία απαιτεί ένα διαφορετικό συναρτη-

σοειδές, το οποίο όμως εξακολουθεί να είναι καθολικό για ολόκληρο τον πυρηνικό χάρτη. Για άτομα και μόρια, το εξωτερικό δυναμικό $v_{ext}(\mathbf{r})$ προέρχεται συνήθως από το ηλεκτροστατικό δυναμικό των ιόντων. Η αρχή μεταβολών καθορίζει την ακριβή πυκνότητα $\rho_{gs}(r)$ της βασικής κατάστασης καθώς και την αντίστοιχη ενέργεια της βασικής κατάστασης ελαχιστοποιώντας την $E_v[\rho]$ σε σχέση με την πυκνότητα.

Έχοντας αυτή τη μορφή του θεωρήματος των Hohenberg-Kohn αντιμετωπίζουμε αμέσως τα παρακάτω προβλήματα: (i) Το θεώρημα αυτό αποδεικνύει μόνο την ύπαρξη του συναρτησοειδούς $F_{HK}[\rho]$. Μας επιτρέπει δηλαδή να αναζητήσουμε τέτοιου είδους ενεργειακά συναρτησοειδή πυκνότητας, χωρίς όμως να μας δίνει κάποια στοιχεία για τη μορφή του συναρτησοειδούς $F_{HK}[\rho]$. (ii) Ακόμα και μετά από μισό αιώνα εκτεταμένων προσπαθειών, κανείς δεν έχει καταφέρει να ανακαλύψει ένα συναρτησοειδές από το οποίο να μπορεί να προκύψει μόνο μέσα από τη μεταβολή της $E_v[\rho]$ σε σχέση με την τοπική πυκνότητα $\rho(r)$, η δομή των φλοιών που είναι ένα ουσιαστικό χαρακτηριστικό που παρατηρείται σε πολλά κβαντομηχανικά συστήματα. (iii) Η απλή απόδειξη του θεωρήματος Hohenberg-Kohn βασίζεται στην ύπαρξη ενός τοπικού εξωτερικού πεδίου $v_{ext}(\mathbf{r})$. Κάτι τέτοιο δεν αποτελεί πρόβλημα για συστήματα Coulomb αφού τα ιόντα δημιουργούν ένα τέτοιο πεδίο. Οι πυρήνες, όμως, είναι συστήματα τα οποία είναι αυτό-δέσμια, και αυτό απαιτεί μία ιδιαίτερη διαχείριση όπως θα δούμε παρακάτω.

Το πρόβλημα της απουσίας των φλοιών λύθηκε από τους Kohn και Sham (KS) σε ένα πολύ κομψό σχήμα [2],[3] αντιστοιχίζοντας την ακριβή τοπική πυκνότητα $\rho(r)$ με μοναδικό τρόπο σε ένα τοπικό βοηθητικό μονο-σωματιδιακό δυναμικό v_{KS} , το οποίο ορίζεται με τέτοιο τρόπο ώστε η ακριβής πυκνότητα της βασικής κατάστασης $\rho_{gs}(\mathbf{r})$ του αλληλεπιδρώντος συστήματος να είναι ίδια με την πυκνότητα της βασικής κατάστασης ενός βοηθητικού συστήματος μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων,

$$\rho_{gs}(\mathbf{r}) = \rho(r) := \sum_i^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (1.2)$$

η οποία εκφράζεται με όρους των N ενεργειακά χαμηλότερων μονοσωματιδιακών τροχιακών λύσεων των εξισώσεων Kohn-Sham

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + v_{KS} \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (1.3)$$

Μέχρι σήμερα, οι περισσότερες πρακτικές εφαρμογές της θεωρίας των συναρτησοειδών πυκνότητας χρησιμοποιούν το σχήμα των Kohn-Sham.

Το ακριβές συναρτησοειδές πυκνότητας $F_{HK}[\rho]$ μπορεί να αναλυθεί σε τρεις ξεχωριστούς όρους:

$$F_{HK}[\rho] = T_s[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho], \quad (1.4)$$

όπου $T_s[\rho]$ είναι η κινητική ενέργεια των μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων, $E_H[\rho]$ είναι η ενέργεια Hartree, και η $E_{xc}[\rho]$ ορίζεται ως η ενέργεια των συσχετίσεων ανταλλαγής, η οποία εξ ορισμού περιέχει τις επιδράσεις πολλών σωμάτων που δεν συμπεριλαμβάνονται στις $T_s[\rho] + E_H[\rho]$.

Μπορεί να δειχθεί ότι το τοπικό δυναμικό $v_{KS}(\mathbf{r})$ δίνεται από τη σχέση

$$v_{KS}(\mathbf{r}) = \frac{\delta(E_H + E_{xc})}{\delta\rho}, \quad (1.5)$$

βλέπουμε λοιπόν ότι τα τροχιακά Kohn-Sham εξαρτώνται από το δυναμικό, το οποίο εξαρτάται από την πυκνότητα, η οποία εξαρτάται από τα τροχιακά. Συνεπώς, το σύστημα αυτό πρέπει να λυθεί αυτο-συνεπώς, επαναλαμβάνοντας την επίλυση των εξισώσεων μέχρι να επιτευχθεί η σύγκλιση. Τυπικώς αυτή η μέθοδος μοιάζει με τη μέθοδο Hartree-Fock. Έχει, όμως, δύο ουσιαστικά πλεονεκτήματα: (i) είναι θεωρητικά ακριβής και (ii) δεν περιέχει τον πολύπλοκο μη-τοπικό Fock όρο $V_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ και ασχολείται μόνο με τοπικές ποσότητες. Οι περίπλοκες ολοκληρωδιαφορικές εξισώσεις της θεωρίας Hartree-Fock αντικαθίστανται από απλές διαφορικές εξισώσεις (1.3).

Είναι ξεκάθαρο ότι η χρησιμότητα του σχήματος Kohn-Sham εξαρτάται από την ακρίβεια με την οποία μπορούμε να κατασκευάσουμε το ολικό ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας. Ένας τρόπος, ο οποίος έχει εφαρμοστεί με μεγάλη επιτυχία σε μη-σχετικιστικά συστήματα Coulomb[4], είναι να αναπτύξουμε την $E_{xc}[\rho]$ από θεμελιώδεις αρχές ενσωματώνοντας γνωστούς ακριβείς περιορισμούς. Ο άλλος τρόπος είναι εμπειρικός, δηλαδή ένα εμπειρικό ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας με έναν πεπερασμένο αριθμό ελεύθερων παραμέτρων που καθορίζονται με βάση την προσαρμογή τους σε συγκεκριμένα πειραματικά δεδομένα. Ο δεύτερος τρόπος είχε χρησιμοποιηθεί την πρώτη περίοδο εφαρμογής των συναρτησοειδών πυκνότητας σε συστήματα με δυνάμεις Coulomb και είναι ο μόνος τρόπος που χρησιμοποιούνται τα συναρτησοειδή πυκνότητας σε πυρηνικά συστήματα.

Η μέθοδος Kohn-Sham μπορεί να γραφτεί με βάση τοπικές ποσότητες. Χωρίς να αλλάξει η βασική ιδέα, μπορεί να γενικευτεί ελαφρώς, έτσι ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί επίσης για μη-τοπικά προβλήματα, συγκεκριμένα σε περιπτώσεις όπου άλλοι βαθμοί ελευθερίας εκτός από τις συντεταγμένες \mathbf{r} παίζουν σημαντικό ρόλο. Το ουσιαστικό συστατικό σε αυτή τη μέθοδο είναι οι μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις $\phi_i(\mathbf{r})$ οι οποίες προέρχονται από την διαγωνοποίηση της μονοσωματιδιακής Χαμιλτονιανής

$$\hat{h} = \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + v_{KS} \right] = \frac{\delta E[\hat{\rho}]}{\delta \hat{\rho}}, \quad (1.6)$$

δηλαδή μπορεί να γραφτεί σαν παράγωγος της ενέργειας ως προς τη μη τοπική

πυκνότητα

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i^N \phi(\mathbf{r}) \phi_i^*(\mathbf{r}'). \quad (1.7)$$

Προφανώς αυτός ο τελεστής πυκνότητας δεν είναι ο ακριβής τελεστής μονοσωματιδιακής πυκνότητας, επειδή έχει μονοσωματιδιακή δομή

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}. \quad (1.8)$$

Συνδέεται μόνο με τον τελεστή της ακριβούς μη-τοπικής μονοσωματιδιακής πυκνότητας από το γεγονός ότι το τοπικό (διαγώνιο) μέρος του είναι ταυτόσημο με αυτό της ακριβούς τοπικής πυκνότητας $\rho_{gs}(\mathbf{r}) = \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Μέσα στο πλαίσιο της θεωρίας Kohn-Sham[2] υπάρχει μία μοναδική ένα- προς-ένα αντιστοίχιση μεταξύ της ακριβούς πυκνότητας $\rho_{gs}(\mathbf{r})$ και του δυναμικού $v_{KS}(\mathbf{r})$. Συνεπώς υπάρχει μία παρόμοια αντιστοίχιση μεταξύ των $\hat{\rho}$ και $\rho_{gs}(\mathbf{r})$ και το συναρτησοειδές $E[\hat{\rho}]$ που χρησιμοποιείται στην 1.6 δίνεται από το συναρτησοειδές Hohenberg-Kohn $E[\hat{\rho}] = F_{HK}[\rho_{gs}]$ της 1.4. Είναι ξεκάθαρο ήδη ότι ο όρος της κινητικής ενέργειας στο $F_{HK}[\rho_{gs}]$ έχει μη-τοπικό χαρακτήρα. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια η εμφάνιση αυτού του τελεστή πυκνότητας με μη-τοπικό χαρακτήρα στη μονοσωματιδιακή του έκφραση είναι πολύ χρήσιμη στην πυρηνική φυσική, όπου έχουμε να αντιμετωπίσουμε άλλους βαθμούς ελευθερίας πέρα από τις συντεταγμένες \mathbf{r} και όπου το συναρτησοειδές της ενέργειας δίνεται σε όρους του μονοσωματιδιακού τελεστή πυκνότητας $\hat{\rho}$ αντί μόνο του τοπικού του μέρους.

Η επέκταση του θεωρήματος Hohenberg-Kohn σε σχετικιστικά συστήματα πρωτοεμφανίστηκε το 1964 [1] χρησιμοποιώντας μία Χαμιλτονιανή βασισμένη στην Κβαντική Ηλεκτροδυναμική (quantum electrodynamics QED) εισάγοντας το φορμαλισμό των τετρα-διανυσμάτων. χηροσέγγιση, η οποία στην ατομική φυσική ονομάζεται επίσης no-pair προσέγγιση. Αυτό σημαίνει, ότι τα φαινόμενα της πόλωσης του κενού λόγω της δημιουργίας ζευγών σωματιδίων-αντισωματιδίων, θεωρούνται αμελητέα. Η συνολική ενέργεια του συστήματος εκφράζεται ως συναρτησοειδές ως προς το τετρα-διάνυσμα της πυκνότητας $j^\mu(\mathbf{r}) = (\rho(\mathbf{r}), \mathbf{j}(\mathbf{r}))$ [5, 6], αντί μόνο του $\rho(\mathbf{r})$ όπως στη μη σχετικιστική περίπτωση.

1.2 Ιστορικά στοιχεία για τη θεωρία πυρηνικών συναρτησοειδών πυκνότητας

Η θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας εισήχθη στην πυρηνική φυσική στις αρχές της δεκαετίας του εβδομήντα[7, 8], και από τότε έχει χρησιμοποιηθεί με μεγάλη επιτυχία [9]. Εφαρμόστηκε μερικά χρόνια αργότερα από την εφαρμογή της θεωρίας Kohn-Sham στα ηλεκτρονιακά συστήματα, όχι τόσο από μια προσπάθεια

να υπάρξει μία ακριβής θεωρία του πυρήνα αλλά με σκοπό να κατανοηθεί καλύτερα το μοντέλο ανεξάρτητων σωματιδίων στους πυρήνες [10, 11] με όρους μίας φαινομενικής-ενεργού αλληλεπίδρασης. Εξ αρχής ήταν ξεκάθαρο ότι η “καθαρή” αλληλεπίδραση νουκλεονίου-νουκλεονίου είναι πολύ ισχυρή για να χρησιμοποιηθεί στο πλαίσιο της προσέγγισης Hartree-Fock, διάφορες φαινομενολογικές δυνάμεις δύο σωμάτων έχουν χρησιμοποιηθεί σε αυτό το πλαίσιο, χωρίς καμία από αυτές τις προσπάθειες να μπορεί να αναπαραγάγει ταυτόχρονα πειραματικές μετρήσεις ενεργειών σύνδεσης και πυρηνικών ακτίνων. Με σκοπό να κατανοηθεί καλύτερα η προέλευση της φαινομενικής δραστικής πυρηνική δύναμης από την αλληλεπίδραση νουκλεονίου-νουκλεονίου στο κενό, οι Bruckner κ.α. [12] ανέλυσαν τη διαδικασία σκέδασης δύο νουκλεονίων στο εσωτερικό του πυρήνα, με παρόμοιο τρόπο όπως γίνεται στον ελεύθερο χώρο. Έλαβαν υπόψιν τους το γεγονός ότι στις ενδιάμεσες καταστάσεις της αλληλεπίδρασης τα νουκλεόνια δεν μπορούν να σκεδαστούν σε τροχιές μέσα στη θάλασσα Fermi, οι οποίες καταλαμβάνουν το εσωτερικό του πυρήνα. Αυτό οδηγεί σε σημαντική μείωση της ισχύος της φαινομενικής δραστικής αλληλεπίδρασης, η οποία αντιπροσωπεύεται συμβολικά από τον πίνακα G-Matrix, στο εσωτερικό του πυρήνα. Από υπολογισμούς για την περίπτωση της άπειρης πυρηνικής ύλης φαίνεται ότι ο G-Matrix, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε υπολογισμούς τύπου Hartree-Fock, είναι ισχυρά εξαρτώμενος από την πυκνότητα.

Βασισμένοι σε αυτήν την παρατήρηση οι Vautherin και Brink [7] χρησιμοποίησαν την απλή φαινομενολογική δύναμη που εισήχθη από τον Skyrme [13] μαζί με ένα όρο τριών-σωμάτων μηδενικής εμβέλειας για την περιγραφή της αλληλεπίδρασης. Αυτό οδηγεί στο επίπεδο του μέσου-πεδίου σε μία φαινομενική δύναμη δύο-σωμάτων με γραμμική εξάρτηση από την πυκνότητα. Με αυτόν τον τρόπο κατάφεραν με την κατάλληλη προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα να αναπαραγάγουν όχι μόνο πειραματικές ενέργειες σύνδεσης, αλλά και πειραματικές τιμές πυρηνικών ακτίνων. Συνεπώς αρχικά, και σε αρκετές περιπτώσεις ακόμη και σήμερα, η θεωρία των πυρηνικών συναρτησοειδών πυκνότητας δε βασιζόταν σε ένα ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας, αλλά μάλλον σε μία αλληλεπίδραση δύο-σωμάτων εξαρτώμενη από την πυκνότητα $V_{12}(\rho)$. Το αντίστοιχο ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας $E[\hat{\rho}]$ προέρχεται από την προσέγγιση Hartree-Fock

$$E[\hat{\rho}] = \langle \Phi | T + V_{12}(\rho) | \Phi \rangle, \quad (1.9)$$

όπου $|\Phi\rangle$ είναι μία ορίζουσα τύπου Slater. Μεταβολή ως προς τον αντίστοιχο τελεστή πυκνότητας $\hat{\rho} = \langle \Phi | a^\dagger a | \Phi \rangle$ οδηγεί στις εξισώσεις Hartree-Fock με τους όρους αναδιάταξης να προκύπτουν από την μεταβολή της $V_{12}(\rho)$ ως προς την ρ . Αποδεικνύεται ότι αυτοί οι όροι αναδιάταξης αποτελούν το ουσιαστικό εργαλείο για την ταυτόχρονη αναπαραγωγή τόσο των ενεργειών σύνδεσης όσο και των πυρηνικών ακτίνων. Επίσης είναι σημαντικοί γιατί εγγυώνται ότι αυτού του είδους η θεωρία υπακούει στην αρχή μεταβολών και είναι συνεπής με τη θερμοδυναμική. [14–16]

1.3 Βαθμοί ελευθερίας στη πυρηνική θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας

Σε πολλές εφαρμογές της θεωρίας συναρτησοειδών πυκνότητας σε συστήματα Coulomb μόνο οι συντεταγμένες της θέσης των σωματιδίων στο χώρο παίζουν ουσιαστικό ρόλο. Επιπρόσθετοι βαθμοί ελευθερίας, όπως το σπιν, μπορούν συχνά να παραλειφθούν ή να γίνει ξεχωριστή διαχείρισή τους. Σε όλες αυτές τις περιπτώσεις είναι αρκετό να ξεκινήσει κανείς με ένα συναρτησοειδές της πυκνότητας το οποίο εξαρτάται μόνο από την τοπική πυκνότητα, αθροίζοντας στη συνέχεια για όλες τις τιμές του σπιν: $\rho(\mathbf{r}) = \sum_s \hat{\rho}(\mathbf{r}s, \mathbf{r}s)$. Οι βαθμοί ελευθερίας του σπιν εμφανίζονται σε τέτοιες περιπτώσεις μόνο ως στατιστικοί παράγοντες.

Στους πυρήνες η κατάσταση είναι αρκετά διαφορετική. Στις περισσότερες περιπτώσεις χρειαζόμαστε αρκετούς επιπρόσθετους βαθμούς ελευθερίας με δύο διακριτές τιμές. Οι οποίοι συμπεριφέρονται με παρόμοιο τρόπο με το σπιν και οι αντίστοιχοι πίνακες με διάσταση 2×2 μπορούν να εκφραστούν από τον μοναδιακό πίνακα και τους πίνακες Pauli.

Βαθμοί ελευθερίας του σπιν: Το σπιν αποτελεί την πιο προφανή περίπτωση επιπλέον βαθμού ελευθερίας. Η δύναμη που οφείλεται στη σύζευξη σπιν-τροφορμής ή σπιν-τροχιάς είναι πολύ ισχυρή και ολόκληρη η δομή των πυρηνικών φλοιών, ειδικά σε μεσαίου βάρους και σε βαρείς πυρήνες, μπορεί να εξηγηθεί μόνο αν γίνει από την αρχή η εισαγωγή ενός όρου σπιν-τροφορμής στην προσέγγιση του μέσου-πεδίου. Η αντιμετώπιση αυτού του όρου μέσω της θεωρίας διαταραχών είναι αδύνατη. Συνεπώς οι μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις πρέπει να είναι τουλάχιστον σπίνορες με διάσταση 2 και η τοπική πυκνότητα τανυστής 2×2 διαστάσεων, ο οποίος μπορεί να αναλυθεί σε βαθμωτό μέρος με $S = 0$ και σε διανυσματικό κομμάτι με σπιν $S = 1$

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}) + \vec{\sigma} \cdot \vec{\rho}_1(\mathbf{r}). \quad (1.10)$$

Επομένως, γενικότερα, η συνολική ενέργεια εξαρτάται από τέσσερις πυκνότητες $E[\rho_0, \vec{\rho}_1]$. Βεβαίως, εξαιτίας της περιστροφικής συμμετρίας που διατηρεί η συνολική πυκνότητα $\rho(\mathbf{r})$ η οποία είναι βαθμωτό μέγεθος πρέπει και η διανυσματική πυκνότητα $\vec{\rho}_1$ να συζευχθεί με άλλα διανύσματα για να σχηματίσει βαθμωτό όρο. Έτσι λοιπόν σε κάθε τροχιά με κβαντικό αριθμό l για τη στροφορμή αντιστοιχεί με βάση τον προσανατολισμό του σπιν μία κατάσταση με συνολική στροφορμή $j_> = l + 1/2$ και μία άλλη με $j_> = l - 1/2$. Οι δύο αυτές αποτελούν ζεύγος και διαχωρίζονται ενεργειακά λόγω της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς, με τον ίδιο τρόπο εξηγείται και το φαινόμενο της λεπτής υφής των φασμάτων των ατόμων. Με τη διαφορά ότι στους πυρήνες ισχύει ο γενικός κανόνας οι καταστάσεις με

$j_>$ να βρίσκονται χαμηλότερα ενεργειακά από αυτές με $j_>$. Στην περίπτωση συναρτησοειδών τύπου Skyrme για να περιγράψουν τους διαχωρισμούς αυτών των καταστάσεων λόγω του σπιν-στροφορμής στους πυρήνες έχει περιληφθεί επίσης και ένας όρος της δύναμης σπιν-στροφορμής με μηδενική εμβέλεια.

Ο βαθμός ελευθερίας του ισοσπίν: Επιπρόσθετα στους πυρήνες έχουμε δύο τύπους σωματιδίων, τα νετρόνια και τα πρωτόνια, θεωρητικά αυτό συνεπάγεται ότι για την περιγραφή ενός πυρήνα θα χρειαζόμασταν μία κυματοσυνάρτηση που να είναι το γινόμενο δύο ξεχωριστών οριζουσών Slater, μία για κάθε τύπο σωματιδίου ξεχωριστά. Στην πραγματικότητα όμως μπορούμε να θεωρήσουμε ότι τα νετρόνια και τα πρωτόνια αποτελούν δύο διαφορετικές εκφάνσεις του ίδιου σωματιδίου, του νουκλεονίου. Αυτό δικαιολογείται από το γεγονός ότι πέρα από την ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση τα πρωτόνια και τα νετρόνια έχουν ουσιαστικά τις ίδιες φυσικές ιδιότητες. Οπότε είναι λογικό οι φαινομενολογικές πυρηνικές δυνάμεις που έχουν προταθεί να μη διακρίνουν ανάμεσα σε πρωτόνια και νετρόνια και να είναι γενικά ανεξάρτητες από το ηλεκτρικό φορτίο. Μαθηματικά αυτό διατυπώνεται θεωρώντας ότι ένα νουκλεόνιο μπορεί να βρίσκεται σε δύο διαφορετικές καταστάσεις, τα διανύσματα βάσης των οποίων μπορούν να γραφτούν ως

$$\pi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ και } \nu = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ διαμορφώνοντας έτσι τον διανυσματικό χώρο δύο}$$

διαστάσεων του ισοτοπικού σπιν παρόμοιο με το χώρο του σπιν. Σε αυτήν την περίπτωση ο αντίστοιχος κβαντικός αριθμός δεν δείχνει τον προσανατολισμό του σπιν προς τα πάνω ή προς τα κάτω, αλλά αν το νουκλεόνιο είναι πρωτόνιο ή νετρόνιο. Φυσικά σε αντίθεση με το συνηθισμένο σπιν των σωματιδίων, το ισοσπίν δεν έχει καμία σχέση με περιστροφή στο χώρο των συντεταγμένων. Συνεπώς η μεταχείριση του είναι πιο απλή συγκριτικά με το σπιν το οποίο πρέπει να πάντα είναι συζευγμένο με την τροχιακή στροφορμή.

Μπορούμε λοιπόν να εκμεταλλευτούμε την άλγεβρα που καθορίζει το συνηθισμένο σπιν:

$$\begin{aligned} \tau_3 \nu &= \frac{1}{2} \nu \\ \tau_3 \pi &= -\frac{1}{2} \pi \end{aligned} \quad (1.11)$$

όπου

$$\tau_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

Μπορούμε επίσης να ορίσουμε αντίστοιχους τελεστές αναβίβασης και καταβίβασης οι οποίοι αλλάζουν το νετρόνιο σε πρωτόνιο και αντιστρόφως,

$$\begin{aligned}\tau_{-}\nu &= \pi, & \tau_{+}\nu &= 0, \\ \tau_{-}\pi &= 0, & \tau_{+}\pi &= \nu,\end{aligned}\tag{1.13}$$

με

$$\tau_{+} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.\tag{1.14}$$

Όπως και στο συνηθισμένο σπιν, το διάνυσμα του τελεστή του ισοσπίν μπορεί να σχηματιστεί από τρεις καρτεσιανές συντεταγμένες

$$\boldsymbol{\tau} = \{\tau_1, \tau_2, \tau_3\}.\tag{1.15}$$

Μπορούμε έτσι να ορίσουμε το συνολικό ισοσπίν ενός συστήματος A νουκλεονίων

$$\mathbf{T} = \sum_{i=1}^A \boldsymbol{\tau}^{(i)}\tag{1.16}$$

και την τρίτη συνιστώσα του

$$T_3 = \sum_{i=1}^A \tau^{(3)},\tag{1.17}$$

η οποία μας δίνει τον αριθμό των πλεοναζόντων νετρονίων του πυρήνα:

$$T_3 = \frac{1}{2}(N - Z).\tag{1.18}$$

Με αυτήν τη μέθοδο λοιπόν έχουμε τη δυνατότητα να περιγράψουμε έναν πυρήνα με μία συνολική ορίζουσα Slater η οποία περιέχει και τον βαθμό ελευθερίας του ισοσπίν. Όσον αφορά την πυκνότητα του συστήματος έχουμε πλέον τις ισοβαθμωτές και τις ισοδιανυσματικές πυκνότητες. Από τη στιγμή που στις περισσότερες περιπτώσεις οι ορίζουσες τύπου Slater έχουν καθορισμένο αριθμό πρωτονίων και νετρονίων, η τρίτη συνιστώσα του ισοσπίν διατηρείται και έτσι μόνο οι πυκνότητες με ισοσπίν $T_3 = 0$ είναι σημαντικές, δηλαδή η συνολική (ισοβαθμωτή) πυκνότητα $\rho = \rho_{+} = \rho_n + \rho_p$ και η ισοδιανυσματική πυκνότητα $\rho = \rho_{+} = \rho_n - \rho_p$. Οπότε μαζί με το ισοσπίν οι μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις από τις οποίες αποτελείται μία ορίζουσα Slater γίνονται σπίνορες με διάσταση 4.

Βαθμοί ελευθερίας λόγω συσχετίσεων ζεύγους: Ο αριθμός των πυρήνων που έχουν μαγικό αριθμό πρωτονίων και αριθμό νετρονίων είναι πολύ μικρός σε σχέση με του χιλιάδες πυρήνες που υπάρχουν. Στην πλειονότητα τους λοιπόν οι πυρήνες σχηματίζουν δομές με ανοιχτούς φλοιούς. Υπάρχουν σημαντικά φαινόμενα (βλ. Κεφ. 6 από [17]) που έχουν επιβεβαιωθεί πειραματικά και υποδεικνύουν ότι τα νουκλεόνια που καταλαμβάνουν έναν ανοιχτό φλοιό συνολικής στροφορμής j τείνουν να σχηματίζουν ζεύγη με τα νουκλεόνια του ίδιου φλοιού που έχουν όμως αντίθετη προβολή της στροφορμής. Αυτό σημαίνει ότι σε αυτούς τους πυρήνες εκτός από τις αλληλεπιδράσεις μεγάλης εμβέλειας σωματιδίου-οπής παίζουν σημαντικό ρόλο και η μικρής εμβέλειας συσχετίσεις ζεύγους σωματιδίου-σωματιδίου. Θεωρητικά στο Hartree-Fock επίπεδο συμπεριλαμβάνονται μόνο οι πρώτες για την δημιουργία του μέσου-πεδίου. Υπάρχει όμως η δυνατότητα να περιγράψουμε τις αλληλεπιδράσεις ζεύγους στην προσέγγιση του μέσου-πεδίου μέσα από τη θεωρία των Bardreen-Cooper-Schrieffer (BCS)[18] ή μέσα από τη γενικευμένη θεωρία Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)[19–21]. Σε κάθε περίπτωση, ο αριθμός των σωματιδίων δεν είναι πια καλός κβαντικός αριθμός. Έχουμε να κάνουμε πλέον με ημισωματίδια (quasiparticles), τα οποία αναμειγνύουν τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των διάφορων μονοσωματιδιακών καταστάσεων

$$\alpha_k^\dagger = \sum_n U_{nk} c_k^\dagger + V_{nk} c_n. \quad (1.19)$$

Οι τελεστές (c, c^\dagger) συνεπάγονται έναν επιπλέον βαθμό ελευθερίας με τις δύο ξεχωριστές τιμές “καταστροφής” και “δημιουργίας”. Ακόμη έχουμε μαζί με τον πίνακα της κανονικής πυκνότητας $\hat{\rho}$, και τον επιπρόσθετο πίνακα της λεγόμενης ανώμαλης πυκνότητας \hat{k} με τα αντίστοιχα στοιχεία πίνακα

$$\rho_{n,n'} = \langle \Phi | c_{n'}^\dagger c_n | \Phi \rangle, \quad k_{n,n'} = \langle \Phi | c_{n'} c_n | \Phi \rangle, \quad (1.20)$$

όπου $|\Phi\rangle$ είναι η γενικευμένη Slater ορίζουσα (κυματοσυνάρτηση-HFB), η οποία περιγράφει την πυρηνική βασική κατάσταση. Συνολικά μπορούμε να ορίσουμε να εισάγουμε τον πίνακα της γενικευμένης πυκνότητας του Valatin[22]:

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \hat{\rho} & \hat{k} \\ -\hat{k}^* & 1 - \hat{\rho}^* \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

έτσι ώστε το ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας εξαρτάται από τον \mathcal{R} . Σε απλουστευμένη μορφή αυτό γράφεται ως

$$E[\mathcal{R}] = E_{MF}[\hat{\rho}] + E_{pair}[\hat{k}]. \quad (1.22)$$

Οι εξισώσεις μέσου-πεδίου, οι οποίες παίζουν τον ρόλο των εξισώσεων Kohn-Sham σε αυτήν την περίπτωση, είναι τώρα οι εξισώσεις-HFB

$$\begin{pmatrix} \hat{h} & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V_k \end{pmatrix}_k = E_k \begin{pmatrix} U \\ V_k \end{pmatrix}_k. \quad (1.23)$$

με

$$\hat{h}_D = \frac{\delta E}{\delta \hat{\rho}}, \quad \hat{\Delta} = \frac{\delta E}{\delta \hat{\kappa}}, \quad (1.24)$$

και οι κυματοσυναρτήσεις των ημισωματιδίων (quasiparticles) $\begin{pmatrix} U(\mathbf{r}) \\ V(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$ είναι

πλέον σπίνορες 8 διαστάσεων.

Ο Gogny εισήγαγε μία φαινομενική-δραστική αλληλεπίδραση πεπερασμένης εμβέλειας με ένα εξαρτώμενο από την πυκνότητα μέρος μηδενικής εμβέλειας και έναν όρο αλληλεπίδρασης δύο σωμάτων μηδενικής εμβέλειας για την δύναμη σπιντροχιάς. Από αυτήν την μοναδική Χαμιλτονιανή $\hat{H}(\hat{\rho})$ εξήγαγε ταυτόχρονα και το μέσο-πεδίο \hat{h} καθώς και το δυναμικό ζευγαρώματος $\hat{\Delta}$. Λόγω της πεπερασμένης εμβέλειας του ανεξάρτητου από την πυκνότητα όρου της δύναμης δύο σωμάτων, μπόρεσε να αποφύγει την υπερϊώδη καταστροφή στο κανάλι του ζευγαρώματος, κάτι που συνήθως απαιτεί περαιτέρω επανακανονικοποίηση ή ένα κατώφλι για το ζευγάρωμα.

Ο σχετικιστικός βαθμός ελευθερίας: Θεωρητικά οι πυρήνες αποτελούν σχετικιστικά συστήματα. Η ισχυρή αλληλεπίδραση πηγάζει από την κβαντική χρωμοδυναμική QCD, η οποία είναι αναλλοίωτη κάτω από μετασχηματισμούς τύπου Lorentz. Μελέτες με τη χρήση της QCD και των αντίστοιχων κανόνων άθροισης [23–25] δείχνουν ότι τα συμπεκνώματα βαθμωτού και διανυσματικού τύπου των κουάρκ επάγουν στο πυρηνικό μέσο δύο αρκετά μεγάλα πεδία, ένα ελκτικό βαθμωτό πεδίο S και ένα απωστικό διανυσματικό πεδίο V . Όλα τα μη-σχετικιστικά πυρηνικά συναρτησοειδή πυκνότητας βασίζονται στο γεγονός ότι οι ταχύτητες των νουκλεονίων μέσα στον πυρήνα είναι μικρές συγκριτικά με την μάζα ηρεμίας τους και έτσι η σχετικιστική κινηματική μπορεί να αντικατασταθεί από τη μη-σχετικιστική κινηματική σε πολύ καλή προσέγγιση

$$\sqrt{c^2 p^2 + (Mc^2)^2} \approx Mc^2 + \frac{p^2}{2M}. \quad (1.25)$$

Με τον τρόπο αυτό, όμως, αγνοείται το γεγονός ότι τα σχετικιστικά πεδία στο εσωτερικό του πυρήνα είναι σχετικά μεγάλα. Πιο συγκεκριμένα το ελκτικό Lorentz

βαθμωτό πεδίο είναι της τάξης $S \approx -400\text{MeV}$ και το απωστικό Lorentz διανυσματικό πεδίο $S \approx +350\text{MeV}$. Μόνο το άθροισμα αυτών των πεδίων, όπως γίνεται αντιληπτό από τις μεγάλες συνιστώσες της εξίσωσης Dirac είναι μικρό $V + S \approx -50\text{MeV}$. Οι μικρές συνιστώσες αισθάνονται το πολύ ισχυρό πεδίο $V - S \approx 750\text{MeV}$. Αυτό οδηγεί σε ένα εξαιρετικά μεγάλο διαχωρισμό λόγω σπιν-στροφορμής στους πυρήνες, το οποίο εισάγεται στα μη σχετικιστικά μοντέλα με μία φαινομενολογική παράμετρο που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς. Φυσικά είναι πιο συνεπές να χειριστεί κανείς αυτά τα μεγάλα πεδία στην εξίσωση Dirac με έναν αυτό-συνεπή τρόπο και γι' αυτό οι θεωρίες με σχετικιστικά/συναλλοιώτα συναρτησοειδή πυκνότητας έχουν συγκεκριμένα πλεονεκτήματα, τα οποία θα συζητηθούν στη συνέχεια της διατριβής σε μεγαλύτερη λεπτομέρεια. Βεβαίως, οι μεγάλες και μικρές συνιστώσες της εξίσωσης Dirac οδηγούν σε νέους ξεχωριστούς βαθμούς ελευθερίας και συνολικά μέχρι τώρα έχουμε να αντιμετωπίσουμε σπίνορες με διάσταση 16.

1.4 Η πολυπλοκότητα της πυρηνικής δύναμης

Τα συστήματα Coulomb καθορίζονται εξ ολοκλήρου από τη δύναμη Coulomb, η οποία έχει απλή αναλυτική δομή και προκύπτει από την κβαντική θεωρία πεδίου που περιγράφει την ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση δηλαδή την κβαντική ηλεκτροδυναμική QED. Στους πυρήνες όπου συνδέονται μέσα από την δράση της ισχυρής αλληλεπίδρασης η κατάσταση είναι διαφορετική.

Ιστορικά η πρώτη προσπάθεια για την πεδιακή περιγραφή της αλληλεπίδρασης Νουκλεονίου-Νουκλεονίου (NN) βασίστηκε στην σπουδαία ιδέα του Yukawa[26], όπου προτεινόταν η ύπαρξη ενός νέου τύπου μποζόνιο με μάζα 200 φορές μεγαλύτερη από αυτή του ηλεκτρονίου δηλαδή $\approx 100\text{ MeV}$ για την αλληλεπίδραση μεταξύ δύο νουκλεονίων στο εσωτερικό του πυρήνα. Η προτεινόμενη μάζα προέκυπτε ουσιαστικά από την μικρή εμβέλεια της πυρηνικής δύναμης της τάξης του $\approx 1 - 2\text{fm}$. Το μοντέλο του Yukawa ήταν πρωτοπόρο καθώς την εποχή εκείνη δεν είχε παρατηρηθεί πειραματικά ένα τόσο βαρύ μποζόνιο. Τελικά στα 1947 και 1950 σε παρόμοια πειράματα μελέτης κοσμικής ακτινοβολίας, ανακαλύφθηκαν τα φορτισμένα πόνια π^\pm με μάζα 139.57 MeV και το ουδέτερο πόνιο π^0 με μάζα 134.976 MeV . Οι αρχικές θεωρίες με τα πόνια ως κβάντα της αλληλεπίδρασης ανάμεσα στα νουκλεόνια, παρά την επιτυχή περιγραφή βασικών δεδομένων σκέδασης (NN) και των ιδιοτήτων του δευτερίου αντιμετώπιζαν σοβαρά προβλήματα. Η κύρια αιτία ήταν ο περιορισμός που προκύπτει στη δυναμική του πιονίου από τη συμμετρία χειραλότητας κάτι που δεν ήταν γνωστό εκείνη την εποχή. Ιστορικά η εικόνα αυτή βελτιώθηκε μετά την ανακάλυψη πιο βαριών μεσονίων [27, 28] στις αρχές της δεκαετίας του 1960. Έτσι προέκυψαν τα μοντέλα ανταλλαγής ενός μποζονίου (one-boson-exchange (OBE))[29, 30] στα οποία η αλληλεπίδραση NN

περιγράφεται από την ανταλλαγή διάφορων τύπων μποζονίων-μεσονίων μαζί με το πiónιο. Μέχρι σήμερα τα πιο επιτυχημένα ποσοτικά φαινομενολογικά μοντέλα περιγραφής της πυρηνικής δύναμης ανάμεσα στα νουκλεόνια βασίζονται σε αυτό το μοντέλο.

Σήμερα γνωρίζουμε φυσικά τη μορφή της αντίστοιχης κβαντικής θεωρίας πεδίου που περιγράφει την ισχυρή αλληλεπίδραση. Αυτή είναι η κβαντική χρωμοδυναμική στην οποία τα κουάρκ, που αποτελούν τα συστατικά σωματίδια των νουκλεονίων, αλληλεπιδρούν ανταλλάσσοντας γλουόνια. Έχει ονομαστεί με αυτόν τον τρόπο λόγω της εισαγωγής του κβαντικού χρώματος το οποίο αποτελεί το φορτίο της ισχυρής αλληλεπίδρασης. Ένα ισχυρά “φορτισμένο” κουαρκ ή γλουόνιο μπορεί να έχει μία από τις τρεις τιμές πράσινο, μπλε ή κόκκινο ενώ ένα αντικουαρκ έχει το αντίστοιχο αντίχρωμα. Ειδικότερα μη-γραμμικές διαδικασίες στο τμήμα των γλουονίων οδηγούν στο λεγόμενο color confinement, δηλαδή στον περιορισμό λόγω του κβαντικού χρώματος των κουάρκ σε συνδυασμούς που έχουν ουδέτερο κβαντικό χρώμα. Για το λόγο αυτό τα κουάρκ παρατηρούνται μόνο μέσα σε σύνθετα σωματίδια τα οποία ονομάζονται συνολικά αδρόνια (hadrons) και χωρίζονται σε δύο κατηγορίες. Η πρώτη είναι τα βαρυόνια που αποτελούνται από τρία κουάρκ με τρία διαφορετικά χρώματα, όπως το πρωτόνιο και το νετρόνιο και η δεύτερη είναι τα μεσόνια που αποτελούνται από ένα κουάρκ και ένα αντικουάρκ του αντίθετου αντιχρώματος, όπως για παράδειγμα το πiónιο. Πρόσφατα έχουν παρατηρηθεί πειραματικά εξωτικά αδρόνια με περισσότερα από τρία κουάρκ, όπως το τετρακουάρκ μεσόνιο $Z(4430)^-[31]$ και πιο πρόσφατα δύο πεντακουάρκ βαρυόνια τα $P_c^+(4380)$ και $P_c^+(4450)$ [32], τα οποία συνήθως αποτελούν ενδιάμεσες καταστάσεις συντονισμού και διασπώνται πολύ γρήγορα.

Παρά το γεγονός ότι η θεμελιώδης θεωρία που περιγράφει την αλληλεπίδραση που κρατάει δέσμια τα κουάρκ στο εσωτερικό των νουκλεονίων είναι γνωστή, είναι πρακτικά αδύνατο να επεκταθεί για την περιγραφή της πυρηνικής δύναμης ανάμεσα στα νουκλεόνια που βρίσκονται δέσμια στο περιβάλλον του πυρήνα. Η κατάσταση αυτή είναι παρόμοια με αυτή των ενδομοριακών δυνάμεων που προκαλούνται από φαινόμενα πόλωσης των διάφορων ηλεκτρονιακών νεφών. Η παραμετροποίηση τους γίνεται συνήθως με φαινομενολογικό τρόπο μέσω του δυναμικού Lenard-Jones, όμως είναι αρκετά δύσκολο να εκφραστούν με αναλυτικό τρόπο μέσω της βασικής δύναμης Coulomb. Στην περίπτωση της εξαγωγής της πυρηνικής δύναμης από την QCD το πρόβλημα έγκειται κυρίως στην αδυναμία εφαρμογής της θεωρίας διαταραχών στη χαμηλή κλίμακα ενεργειών που είναι χαρακτηριστική στην πυρηνική φυσική. Αυτό αντιμετωπίζεται πλέον με την έννοια της φαινομενικής θεωρίας πεδίου (effective field theory (EFT)) που διατυπώθηκε για πρώτη φορά το 1990 στο πρωτοπόρο άρθρο του Weinberg [33] η οποία εφαρμόζεται στη χαμηλής ενέργειας QCD. Σε αυτήν την προσέγγιση πρέπει κανείς να γράψει την πιο γενική Λαγκραντζιανή η οποία είναι συνεπής με τις απαραίτητες συμμετρίες της QCD, και πιο συγκεκριμένα τη συμμετρία χειραλότητας. Στις

χαμηλές ενέργειες, οι φαινομενικοί βαθμοί ελευθερίας της QCD είναι πλέον τα πόνια και τα νουκλεόνια αντί για τα γλουόνια και τα κουάρκ. Με αυτόν τον τρόπο επιστρέφουμε στην θεωρία μεσονίων-πιονίων του Yukawa, με μια σημαντική προσθήκη: το σπάσιμο της συμμετρίας χειραλότητας της οποίας το πόνιο αποτελεί το αντίστοιχο μποζόνιο Goldstone, καθορίζει τη δυναμική και παρέχει μία ξεκάθαρη σύνδεση με την θεμελιώδη θεωρία της QCD.

Ουσιαστικά η αλληλεπίδραση NN στο εσωτερικό του πυρήνα αντιμετωπίζεται ως μία φαινομενική δραστική αλληλεπίδραση η οποία έχει τα ακόλουθα χαρακτηριστικά. Σε μεγάλες αποστάσεις η ανταλλαγή ενός πιονίου κυριαρχεί και έχει ελκτική απόληξη τύπου Yukawa[26], η οποία φθίνει σχετικά γρήγορα. Σε μικρές αποστάσεις είναι ισχυρά απωστική και στη φαινομενολογική περιγραφή τους με ανταλλαγή μεσονίων κυριαρχείται σε αυτήν την περιοχή από μία ισχυρή άπωση η οποία προκαλείται από την ανταλλαγή διανυσματικών μεσονίων όπως το διανυσματικό-ισοβαθμωτό ω -μεσόνιο. Σε ενδιάμεσες αποστάσεις η “γυμνή” δύναμη νουκλεονίου-νουκλεονίου έχει έντονο τανυστικό χαρακτήρα, ισχυρά μη-διαγώνιο στο χώρο της ορμής. Οδηγεί στην ισχυρή έλξη της δύναμης νουκλεονίου-νουκλεονίου στις ενδιάμεσες αποστάσεις, που είναι ο κύριος λόγος για την σύνδεση του πυρήνα. Προκαλείται σε μεγάλο βαθμό από τη συζευγμένη ανταλλαγή δύο πιονίων και, σε φαινομενολογικές περιγραφές περιγράφεται συχνά από την ανταλλαγή του αντίστοιχου βαθμωτού-ισοβαθμωτού σ -μεσονίου[25].

Έπειτα από περισσότερα από πενήντα χρόνια εκτεταμένων πειραματικών και θεωρητικών ερευνών υπάρχουν σήμερα διάφορες παραμετροποιήσεις της γυμνήsbare αλληλεπίδρασης NN που αναπαράγουν τα δεδομένα σκέδασης με αρκετά μεγάλη ακρίβεια. Εμπεριέχουν ένα μεγάλο αριθμό παραμέτρων. Σε παλαιότερες προσεγγίσεις αυτές οι παράμετροι είναι φαινομενολογικές και προσαρμόζονται άμεσα σε μεταβολές φάσεων από δεδομένα σκέδασης[34]. Πιο σύγχρονες εκδοχές βασίζονται στην θεωρία διαταραχών συνεπών με τη συμμετρία χειραλότητας [35], σε κάποιες από αυτές οι σταθερές χαμηλής ενέργειας, δίνονται από την Λανγκραντζιανή πιονίου-νουκλεονίου προσαρμοσμένες σε δεδομένα σκέδασης πιονίων. Προσφάτως έχουν υπάρξει προσπάθειες για την εξαγωγή της γυμνήsbare δύναμης NN απευθείας από την QCD από υπολογισμούς πλέγματος (lattice calculations) μεγάλης κλίμακας[36]. Οι περισσότερες από αυτές τις δυνάμεις είναι μη-σχετικιστικές, όμως υπάρχουν και σχετικιστικές εκδοχές, όπως σχετικιστικά δυναμικά ανταλλαγής ενός μποζονίου της ομάδας Bonn-Idaho[37, 38].

Ένα σημαντικό πρόβλημα με την πυρηνική θεωρία της μη-σχετικιστικής γυμνήsbare αλληλεπίδρασης νουκλεονίου-νουκλεονίου είναι το γεγονός ότι δεν είναι αρκετή για να καθορίσει τις αλληλεπιδράσεις δύο σωμάτων με μεγάλη ακρίβεια. Όλες οι δυνάμεις που προέρχονται από αυτή τη μέθοδο έχουν προβλήματα στο να καταλήξουν στον σωστό κορεσμό των συστημάτων άπειρης πυρηνικής ύλης. Με βάση την ισχύ του τανυστικού μέρους όλων αυτών των μη-σχετικιστικών δυνάμεων, τα σημεία κορεσμού κείτονται σε μία γραμμή στο επίπεδο της E/A ως προς

την πυκνότητα ρ , η λεγόμενη γραμμή Coester[39]. Είναι πλέον γενικά αποδεκτό ότι η πηγή αυτής της ασυνέπειας προέρχεται από αλληλεπιδράσεις τριών νουκλεονίων, οι οποίες δεν έχουν ληφθεί υπόψιν μέχρι στιγμής. Στην πραγματικότητα, πρόσφατες έρευνες έχουν δείξει ότι οι δυνάμεις τριών σωμάτων παίζουν σπουδαίο ρόλο στους πυρήνες. Οι παράμετροι αυτών των δυνάμεων είναι συνήθως προσαρμοσμένες σε ιδιότητες πεπερασμένων πυρήνων. Η μικροσκοπική προέλευση αυτών των δυνάμεων είναι όμως ακόμα άγνωστη σε μεγάλο βαθμό. Η πιο γνωστή περίπτωση είναι το διάγραμμα Fujita–Miyazawa[40] που περιλαμβάνει έναν Δ -συντονισμό ως μία ενδιάμεση κατάσταση σε ένα από τα τρία νουκλεόνια, ο οποίος δημιουργείται και απορροφάται από την ανταλλαγή δύο πιονίων με τα άλλα δύο νουκλεόνια. Φυσικά υπάρχουν επίσης και άλλοι ενδιάμεσοι σχηματισμοί όπως και άλλου τύπου ανταλλαγές μεσονίων είναι δυνατές, όπως για παράδειγμα η εικονική διέγερση ζευγών νουκλεονίου-αντινουκλεονίου (Z -diagram)[41]. Πρόσφατοι μη-σχετικιστικοί Brueckner–Hartree–Fock υπολογισμοί οι οποίοι περιλαμβάνουν τέτοιες δυνάμεις τριών σωμάτων[41] έχουν δείξει ότι μπορεί κανείς να καταλήξει σε κατάλληλες ιδιότητες κορεσμού με τον τρόπο αυτό και ότι το διάγραμμα Z -diagram παίζει καθοριστικό ρόλο σε αυτήν την περίπτωση. Αυτό αποτελεί ισχυρή ένδειξη ότι η σχετικιστική περιγραφή του πυρηνικού προβλήματος πολλών σωμάτων, η οποία συμπεριλαμβάνει τέτοια φαινόμενα εξ αρχής, μπορεί να επιλύσει τουλάχιστον το κομμάτι του προβλήματος που αφορά τις δυνάμεις τριών-σωμάτων. Πιο συγκεκριμένα, σχετικιστικοί Brueckner–Hartree–Fock υπολογισμοί [42–47] χωρίς την χρήση δυνάμεων τριών σωμάτων είναι ικανοί να μετατοπίσουν την γραμμή Coester στα πειραματικά δεδομένα. Τέτοιες έρευνες μας δίνουν μία καλύτερη κατανόηση του λόγου για τον οποίο οι θεωρίες με συναλλοιώτα συναρτησοειδή πυκνότητας είναι σχετικά πιο επιτυχείς.

1.5 Φαινομενολογία στα πυρηνικά συναρτησοειδή πυκνότητας

Σε αντίθεση με τα συστήματα Coulomb, όπου υπάρχουν αρκετά επιτυχή μικροσκοπικά συναρτησοειδή πυκνότητας[4] τα οποία προκύπτουν από τη δύναμη Coulomb και δεν περιλαμβάνουν επιπρόσθετες φαινομενολογικές παραμέτρους, η κατάσταση στην πυρηνική φυσική είναι αρκετά διαφορετική. Προς το παρόν όλα τα επιτυχή πυρηνικά συναρτησοειδή πυκνότητας βασίζονται σε φαινομενολογικές παραμέτρους. Αυτό είναι κατανοητό λόγω των πολλών δυσκολιών στη περίπτωση της πυρηνικής δύναμης όπως αναλύθηκε προηγουμένως.

Η μορφή των ενεργειακών συναρτησοειδών πυκνότητας στην πυρηνική φυσική καθορίζεται από τις αρχές συμμετρίας και της απλότητας. Αυτές είναι οι συμμετρίες μεταφοράς και περιστροφής στην μη-σχετικιστική περίπτωση και η

συμμετρία Poincare, που σημαίνει ότι το συναρτησοειδές πυκνότητας παραμένει αναλλοίωτο στους μετασχηματισμούς Lorentz, στην σχετικιστική περίπτωση. Επιπρόσθετα έχουμε τις καλά καθιερωμένες διακριτές συμμετρίες όπως της ομοτιμίας και της χρονικής αναστροφής. Επίσης το αναλλοίωτο του ισοσπίν διατηρείται στο επίπεδο των πυρηνικών αλληλεπιδράσεων, αλλά παραβιάζεται από την αλληλεπίδραση Coulomb. Μόνο οι πιο απλοί όροι που επιτρέπονται από τις εν λόγω συμμετρίες υπεισέρχονται στη θεωρία και οι υπόλοιποι παράμετροι προσαρμόζονται σε πειραματικά δεδομένα συστημάτων με πολλά νουκλεόνια. Η εξάρτηση από την πυκνότητα εισάγεται με αρκετά διαφορετικό τρόπο για σχετικιστικά και μη-σχετικιστικά συναρτησοειδή. Στα συμβατικά μη-σχετικιστικά συναρτησοειδή χρησιμοποιείται ένας επιπλέον όρος με εξάρτηση από την πυκνότητα $\sim \rho^\alpha$. Η παράμετρος α έχει στις περισσότερες περιπτώσεις τις τιμές 1, 1/3, ή 1/6, και είναι σπάνια προσαρμοσμένη σε δεδομένα. Από την άλλη μεριά η εξάρτηση από την πυκνότητα στα συναλλοίωτα συναρτησοειδή πυκνότητας είναι αρκετά πιο πολύπλοκη, είτε εισάγεται από διάφορους μη-γραμμικούς όρους σύζευξης των μεσονικών πεδίων είτε από μία συγκεκριμένη εξάρτηση από την πυκνότητα των σταθερών σύζευξης. Σε όλες τις περιπτώσεις δύο με τέσσερις επιπλέον παράμετροι χρησιμοποιούνται για την βελτιστοποίηση της εξάρτησης από την πυκνότητα στα σχετικιστικά συναρτησοειδή. Οι περισσότερες από τις μη-σχετικιστικές περιπτώσεις ξεκινούν από μία Χαμιλτονιανή που εξαρτάται από την πυκνότητα και εξάγουν από αυτήν την ενέργεια στο κανάλι σωματιδίου-οπής (ph-channel) περιλαμβάνοντας όρους ανταλλαγής, όμως μόνο μερικές από αυτές εξάγουν την ενέργεια ζευγαρώματος από την ίδια Χαμιλτονιανή. Επομένως στις περισσότερες μη-σχετικιστικές και σε όλες τις σχετικιστικές περιπτώσεις η συνολική ενέργεια δεν εξάγεται πλήρως από μία Χαμιλτονιανή ή μία Λανγκραντζιανή. Πιο συγκεκριμένα, στις καθιερωμένες σχετικιστικές περιπτώσεις οι Fock όροι ανταλλαγής δεν υπεισέρχονται καθόλου στο μοντέλο. Η επίδρασή τους εισάγεται με έμμεσο τρόπο από την τροποποίηση των υπόλοιπων παραμέτρων.

Χωρίς τις συσχετίσεις ζευγαρώματος ο αριθμός των παραμέτρων προς τροποποίηση είναι περίπου 10-12 για τα μη σχετικιστικά και 4 για τα σχετικιστικά συναρτησοειδή. Περαιτέρω, υπάρχουν οι παράμετροι για την εξάρτηση από την πυκνότητα, 1 στην περίπτωση των μη σχετικιστικών και 2-4 για τα σχετικιστικά. Διάφορες στρατηγικές προσαρμογής χρησιμοποιούνται. Συνήθως τα δεδομένα περιλαμβάνουν ενέργειες σύνδεσης και ακτίνες από δείγμα πυρήνων κατανεμημένων σε ολόκληρο των περιοδικό πίνακα. Συχνά βασικές ιδιότητες της πυρηνικής ύλης λαμβάνονται επίσης υπόψιν. Για λόγους απλότητας στις περισσότερες των περιπτώσεων χρησιμοποιούνται μόνο σφαιρικοί πυρήνες, δηλαδή διπλά ή μονά μαγικοί πυρήνες[48–50]. Υπάρχουν, όμως και καινούρια συναρτησοειδή τα οποία είναι προσαρμοσμένα μόνο στις μάζες πολλών παραμορφωμένων πυρήνων[51], επειδή είναι γνωστό ότι το σπάσιμο της συμμετρίας περιστροφής μας επιτρέπει να εισάγουμε στους παραμορφωμένους πυρήνες επιπλέον συσχετίσεις και πως, για

αυτόν τον λόγο, οι παραμορφωμένοι πυρήνες είναι καλύτεροι υποψήφιοι για την προσέγγιση μέσου-πεδίου.

Όπως προαναφέρθηκε, οι τανυστικές δυνάμεις έχουν σημαντική θέση στην μικροσκοπική κατανόηση της σύνδεσης των πυρήνων και σε πολλές λεπτομέρειες υπολογισμών για το μοντέλο φλοιών με φαινομενολογικές δυνάμεις [52]. Ο ρόλος τους στα συναρτησοειδή πυκνότητας είναι ακόμη υπό συζήτηση. Στα μη-σχετικιστικά συναρτησοειδή μηδενικής εμβέλειας οι τανυστικοί όροι μπορούν εύκολα να ενσωματωθούν[53], όμως δεν είναι ξεκάθαρο εντελώς πως να προσαρμοστούν οι παράμετροί τους, επειδή έχουν πολύ μικρή επιρροή στις ενέργειες σύνδεσης και στις ακτίνες. Έχουν όμως, σημαντική επιρροή στις μονοσωματιδιακές ενέργειες. Από την άλλη, σύμφωνα με την λογική των Kohn και Sham οι μονοσωματιδιακές ενέργειες είναι στο πλαίσιο αυτής της μεθόδου καθαρά τεχνητές ποσότητες, οι οποίες δεν πρέπει να χρησιμοποιούνται για προσαρμογή παραμέτρων. Στην πραγματικότητα οι μονοσωματιδιακές ενέργειες στους πυρήνες είναι συνήθως διασπασμένες σε θραύσματα αρκετών καταστάσεων πολλών-σωμάτων οι οποίες πρέπει να περιγραφούν από μοντέλα με σύζευξη σωματιδίων-δονήσεων στις θεωρίες που είναι πέρα από το μέσο-πεδίο(βλ. 3.2 της διατριβής). Είναι από άποψη συλλογιστικής και τεχνικής δύσκολο να υπολογιστούν αυτές οι επιδράσεις σε μια μέθοδο προσαρμογής παραμέτρων. Είναι επίσης ασαφές σε ποιο βαθμό οι τανυστικές δυνάμεις στους υπολογισμούς Skyrme μπορούν όντως να περιγράψουν την πλήρη επίδραση των τανυστικών δυνάμεων στο πυρηνικό περιβάλλον. Από την άλλη μεριά, στα σχετικιστικά συναρτησοειδή πυκνότητας, υπάρχουν τανυστικές δυνάμεις μόνο πεπερασμένης εμβέλειας[54–56]. Εμφανίζονται μόνο σε σχετικιστικούς υπολογισμούς Hartree-Fock, οι οποίοι απαιτούν σημαντική υπολογιστική προσπάθεια. Συνεπώς πολλά προβλήματα μένουν ανοιχτά για μελλοντικές έρευνες σχετικά με τις τανυστικές δυνάμεις στα πυρηνικά συναρτησοειδή πυκνότητας.

1.6 Προς την *ab-initio* δημιουργία πυρηνικών συναρτησοειδών

Μέχρι στιγμής έχουν γίνει κάποιες προσπάθειες για τη δημιουργία συναρτησοειδών πυκνότητας από υπολογισμούς *ab-initio* δηλαδή από βασικές θεωρητικές αρχές. Ο τρόπος για να προχωρήσει κανείς είναι ακολουθώντας τον τρόπο που εφαρμόζεται σε συστήματα Coulomb, δηλαδή πρώτα να επιλύσει το ακριβές πρόβλημα της πυρηνικής ύλης στη βάση της γυμνής-bare αλληλεπίδρασης νουκλεονίου-νουκλεονίου. Προς το παρόν, ακόμη κι αυτό το αρχικό πρόβλημα δεν έχει επιλυθεί με την απαραίτητη ακρίβεια. Στα επόμενα βήματα θα πρέπει να εξάγει ακριβή αποτελέσματα για τους όρους διαβάθμισης (gradient) ή τους όρους της επιφάνειας

κλπ. Ακολουθώντας αυτή τη λογική ο Fayans[57, 58] έχει προτείνει τη σημαντική μείωση των φαινομενολογικών παραμέτρων ξεκινώντας από το ενεργειακό συναρτησοειδές $E[\rho]$ του ομογενούς συστήματος (με σταθερή πυκνότητα ρ) με βάση τους πιο σύγχρονους υπολογισμούς για συστήματα πολλών σωμάτων και προσθέτοντας μόνο μερικές φαινομενολογικές παραμέτρους επιφανείας. Η ομάδα Barcelona–Catania–Paris–Madrid (BCPM) εφάρμοσε τα πιο πρόσφατα αποτελέσματα μη σχετικιστικών υπολογισμών Bgueckner και εξήγαγε με τον τρόπο αυτό ένα επιτυχές μη-σχετικιστικό συναρτησοειδές πυκνότητας το οποίο εξαρτάται μόνο από μερικές παραμέτρους[59]. Μία παρόμοια προσέγγιση ακολουθήθηκε και στην περίπτωση της σχετικιστικής πλευράς [60]. Στην συγκεκριμένη προσπάθεια η εξάρτηση από την πυκνότητα των σταθερών σύζευξης έχει προκύψει εξ ολοκλήρου από μικροσκοπικούς *ab-initio* υπολογισμούς βασισμένους στα πιο σύγχρονα σχετικιστικά και μη-σχετικιστικά αποτελέσματα υπολογισμών Bgueckner και προσαρμόζοντας μόνο 4 φαινομενολογικές παραμέτρους σε πειραματικά δεδομένα ενεργειών σύνδεσης σφαιρικών πυρήνων σε όλο το φάσμα του περιοδικού πίνακα.

Πρέπει να είναι όμως αναμενόμενο ότι στην πυρηνική φυσική ίσως να μην είμαστε σε θέση να αποκλείουμε εντελώς την ύπαρξη όλων των φαινομενολογικών παραμέτρων. Αν αναλογιστούμε ότι η απαιτούμενη ακρίβεια για τις ενέργειες σύνδεσης σε αντιδράσεις αστροφυσικής είναι της τάξης των 100 KeV. Για βαρείς πυρήνες αυτό είναι ακρίβεια κάποιες φορές του 10^{-5} . Συνυπολογίζοντας το γεγονός ότι οι πειραματικές τιμές για τις μεταβολές φάσεις από τα δεδομένα σκέδασης νουκλεονίου-νουκλεονίου έχουν πεπερασμένα σφάλματα καθώς και τις αβεβαιότητες στους υπολογισμούς πολλών-σωμάτων για πυρήνες, πιθανά να μην είμαστε ποτέ ικανοί να φτάσουμε την ζητούμενη ακρίβεια χωρίς την λεπτομερή στάθμιση κάποιων εξωτερικών παραμέτρων.

1.7 Οι πυρήνες είναι αυτό-δέσμια συστήματα

Υπάρχει μια σημαντική διαφορά στην εφαρμογή της θεωρίας συναρτησοειδών πυκνότητας για συστήματα Coulomb και για πυρήνες. Το θεώρημα Hohenberg–Kohn [1] διατυπώθηκε υπό την προϋπόθεση ότι το σύστημα υπό μελέτη συγκρατείται υπό την επίδραση ενός εξωτερικού δυναμικού $v_{ext}(\mathbf{r})$. Στα άτομα αυτό είναι το κεντρικό δυναμικό πεδίο Coulomb που δημιουργεί ο πυρήνας. Αυτό εγγυάται εξ αρχής, ότι ακόμα και αν αγνοήσουμε την αλληλεπίδραση ανάμεσα στα ηλεκτρόνια, ότι υπάρχει ένα μέσο-πεδίο και ότι η αλληλεπίδραση ανάμεσα στα ηλεκτρόνια προσφέρει μόνο κάποια μικρή βελτίωση.

Για τους πυρήνες, όμως, δεν υπάρχει παρόμοιο εξωτερικό δυναμικό. Είναι αυτό-δέσμια συστήματα πεπερασμένου μεγέθους τα οποία παραμένουν αναλλοίωτα από τη μεταφορά στο χώρο. Αυτό σημαίνει συγκεκριμένα ότι η ακριβής πυκνότητα στο σύστημα αναφοράς του εργαστηρίου πρέπει να είναι σταθερή. Η

1.8. ΤΑ ΟΡΙΑ ΤΗΣ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗΣ ΤΟΥ ΜΕΣΟΥ-ΠΕΔΙΟΥ ΣΤΟΥΣ ΠΥΡΗΝΕΣ

διατύπωση του θεωρήματος Hohenberg–Kohn για αυτήν τη σταθερή πυκνότητα είναι σαφώς αληθής, όμως αυτό δεν είναι μια χρήσιμη διατύπωση. Από την άλλη μεριά, είναι γνωστό από το πρωτοπόρο έργο των Goerppert-Mayer και Jensen [11, 61] ότι υπάρχει η δομή των φλοιών στους πυρήνες η οποία υποδεικνύει ουσιαστικά την ύπαρξη ενός φαινομενικού μέσου-πεδίου, το οποίο θα μπορούσε να αναλυθεί υπό την θεωρία Kohn-Sham. Έχει αποδειχθεί [62, 63] ότι το θεώρημα Hohenberg–Kohn ισχύει για την εσωτερική πυκνότητα $\rho_I(\mathbf{r}) = \rho_I(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Στα μη-σχετικιστικά συστήματα, τα οποία είναι αναλλοίωτα στους μετασχηματισμούς Γαλιλαίου, η πυκνότητα ορίζεται με ακριβή τρόπο, εξαρτάται όμως από τις συντεταγμένες του κέντρου μάζας $\mathbf{R} = \frac{1}{A} \sum_i \mathbf{r}_i$ και γι' αυτό δεν έχει πλέον τον μονοσωματιδιακό χαρακτήρα στην ακριβή περίπτωση. Σε ένα ανάπτυγμα όρων του $1/A$, φαινόμενα πολλών-σωμάτων εμφανίζονται σε όρους ανώτερης τάξης, για παράδειγμα οι γνωστοί όροι διόρθωσης του κέντρου μάζας. Συνεπώς είναι ακόμη υπό αμφισβήτηση [64] κατά πόσο το θεώρημα Hohenberg–Kohn ισχύει με την ακριβή έννοιά του στους πυρήνες, ή σε ποιο βαθμό αποτελεί μόνο μια καλή προσέγγιση. Σε κάθε περίπτωση, στην παρούσα φάση, που η ακριβής μορφή του πυρηνικού συναρτησοειδούς πυκνότητας δεν είναι ακόμη γνωστή, αυτή η ερώτηση έχει μόνο ακαδημαϊκό χαρακτήρα.

1.8 Τα όρια της περιγραφής του μέσου-πεδίου στους πυρήνες

Στη θεωρία η μέθοδος Kohn–Sham αποτελεί την αντιστοίχιση ενός πολύπλοκου κβαντομηχανικού προβλήματος πολλών-σωμάτων σε ένα πρόβλημα πολλών ανεξάρτητων μεταξύ τους μονών σωματιδίων, το οποίο μπορεί να αντιμετωπιστεί σχετικά εύκολα. Ακόμα και αν αυτή η αντιστοίχιση είναι θεωρητικά ακριβής, πρέπει να γνωρίζουμε ότι οι πληροφορίες που δίνονται με αυτήν τη μέθοδο είναι περιορισμένες. Θεωρητικά μπορούμε να υπολογίσουμε την ακριβή τοπική πυκνότητα $\rho(\mathbf{r})$ και όλα τα μεγέθη που συνδέονται άμεσα με αυτή, όπως η ολική ενέργεια $E[\rho]$ ή οι αναμενόμενες τιμές τοπικών τελεστών ενός-σώματος

$$\langle \hat{F} \rangle = \int d^3r f(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}), \quad (1.26)$$

όπως για παράδειγμα ακτίνες ή τετραπολικές ροπές. Εκτός από την ενέργεια της βασικής κατάστασης πυρήνων περιττής μάζας, μονοσωματιδιακές ενέργειες και άλλες ποσότητες δεν θα έπρεπε να συγκρίνονται με το πείραμα. Ξεκινώντας από μία εσωτερική πυκνότητα είναι ξεκάθαρο ότι πρέπει πρώτα να μεταβούμε στο σύστημα αναφοράς του εργαστηρίου με τον κατάλληλο μετασχηματισμό, κάτι που συνδέεται με περαιτέρω προσεγγίσεις. Αυτό μπορεί να γίνει με την προβολή στην

στροφορμή. Στο όριο όπου έχουμε μεγάλες τιμές παραμόρφωσης και μία καλά καθορισμένη διεύθυνση του εσωτερικού συστήματος καταλήγουμε στην γνωστή σχέση του μοντέλου Bohr ανάμεσα στα εσωτερικά στοιχεία πίνακα του τετραπολικού τελεστή με αυτά του συστήματος αναφοράς του εργαστηρίου[65]. Στους μεταβατικούς πυρήνες με σχετικά επίπεδες ενεργειακές επιφάνειες στο χώρο των παραμορφώσεων, πρέπει κανείς να πάει πέρα από τη θεωρία μέσου-πεδίου και να συμπεριλάβει διαταραχές περιγράφοντας την πυρηνική κυματοσυνάρτηση ως υπέρθεση πολλών οριζουσών τύπου Slater με διαφορετικές παραμορφώσεις. Αυτές οι μέθοδοι είναι σαφέστατα πέρα από την έννοια του μέσου-πεδίου, έχουν αποδειχτεί όμως αρκετά επιτυχείς για την καθολική περιγραφή των μεταβατικών πυρήνων και των φασμάτων χαμηλών καταστάσεων με όρους συναρτησοειδών πυκνότητας[66].

Βέβαια, στη θεωρία, η στατική εκδοχή συναρτησοειδών πυκνότητας είναι μόνο εφαρμόσιμη για την περιγραφή βασικών καταστάσεων. Υπάρχουν όμως επεκτάσεις σε αυτήν την προσέγγιση για την περιγραφή διεγερμένων καταστάσεων. Αρκετές από αυτές βασίζονται στην ιδέα των χρονικά εξαρτώμενων συναρτησοειδών πυκνότητας. Σε αναλογία με το θεώρημα Kohn-Sham[2] υπάρχει και το θεώρημα των Runge και Gross[67] το οποίο παρέχει μία ακριβή αντιστοίχιση του πλήρους χρονοεξαρτώμενου προβλήματος πολλών-σωμάτων σε ένα χρονικά εξαρτώμενο πρόβλημα ενός σώματος. Το αντίστοιχο βοηθητικό μονοσωματιδιακό πεδίο δεν είναι μόνο χρονικά εξαρτώμενο, αλλά επίσης εξαρτάται και από την πλήρη χρονικά-εξαρτώμενη μονοσωματιδιακή πυκνότητα, περιλαμβάνοντας για παράδειγμα φαινόμενα μνήμης. Συνεπώς η θεωρία αυτή είναι πολύ πιο πολύπλοκη από την θεωρία Kohn-Sham της στατικής περίπτωσης. Μόνο κοντά στην περιοχή της βασικής κατάστασης μπορεί κανείς να επεκτείνει γύρω από την στατική πυκνότητα για δονήσεις με μικρό πλάτος και με πρόσθετες προσεγγίσεις, όπου παραλείπονται τα φαινόμενα μνήμης[68] και οι αντίστοιχη εξάρτηση από την ενέργεια στο χώρο Fourier. Καταλήγει κανείς με αυτόν τον τρόπο στην πολύ γνωστή προσέγγιση τυχαίας φάσης (random phase approximation (RPA)) [69] ή στην quasiparticle-RPA με μία υπολειπόμενη αλληλεπίδραση που προκύπτει από τη δεύτερη παραγωγή του συναρτησοειδούς ενέργειας ως προς την πυκνότητα. Αυτή είναι η χρονικά-εξαρτώμενη θεωρία μέσου-πεδίου. Παρέχει μία πολύ επιτυχή περιγραφή των μέσων ενεργειών των γιγαντιαίων συντονισμών στους πυρήνες[70]. Από την άλλη δεν είναι δυνατόν να αναπαράγει πλάτη διάσπασης αυτών των διεγέρσεων που σε μεγάλο βαθμό παράγονται από τη σύζευξη με πιο πολύπλοκους σχηματισμούς. Για την περιγραφή τέτοιου είδους φαινομένων καθώς και της διάσπασης σε θραύσματα των μονοσωματιδικών καταστάσεων πρέπει να πάει κανείς πέρα από το μέσο-πεδίο και να εισάγει συζεύξεις σωματιδίων με καταστάσεις δονήσεων όπως περιγράφεται στο κεφάλαιο 3.2.

1.8. ΤΑ ΟΡΙΑ ΤΗΣ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗΣ ΤΟΥ ΜΕΣΟΥ-ΠΕΔΙΟΥ ΣΤΟΥΣ ΠΥΡΗΝΕΣ

Κεφάλαιο 2

Σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου

Για την εφαρμογή της ιδέας Kohn-Sham[2] της θεωρίας των συναρτησοειδών πυκνότητας, αρχικά χρειάζεται μία εξίσωση ενός σωματιδίου με μία μονοσωματιδιακή χαμιλτονιανή h που να προκύπτει από ένα ενεργειακό συναρτησοειδές $E[\rho]$. Στην σχετικιστική περίπτωση η μονοσωματιδιακή εξίσωση είναι η εξίσωση Dirac και το ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας εξάγεται πιο εύκολα από μία Λαγκραντζιανή στο πλαίσιο της θεωρίας πεδίου η οποία ικανοποιεί απαραίτητα τις συμμετρίες του Lorentz συναλλοίωτου, της τοπικότητας και της αιτιότητας. Το μοντέλο του Walecka [71] παρέχει το ιδανικό σημείο εκκίνησης για αυτό το πλαίσιο. Όπως γίνεται συνήθως σε μια τοπική θεωρία πεδίου οι αλληλεπιδράσεις εκφράζονται με την ανταλλαγή μεσονίων με τους κατάλληλους σχετικιστικούς κβαντικούς αριθμούς. Στην αρχή αυτό το μοντέλο εισήχθη ως μία πλήρως επανακανονικοποιήσιμη κβαντική θεωρία πεδίου, η κβαντική αδρονική δυναμική (quantum hadron dynamics (QHD))[72], καθώς περιγράφει συστήματα με βαθμούς ελευθερίας νουκλεόνια και μεσόνια. Πολύ σύντομα, όμως, έγινε αντιληπτό ότι η επανακανονικοποίηση είναι δυνατή μόνο σε επίπεδο διαγραμμάτων πρώτης τάξης[73] και ότι τα αποτελέσματα σε ανώτερες τάξεις είναι λάθος[74].

Από την άλλη μεριά αυτό το μοντέλο έχει αποδειχτεί πολύ χρήσιμο για την εφαρμογή μιας συναλλοίωτης θεωρίας συναρτησοειδών πυκνότητας. Για αυτό το σκοπό υπάρχουν τρεις βασικές απαραίτητες υποθέσεις:

1. Στο επίπεδο του μέσου-πεδίου, που χρησιμοποιείται στη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας, παραμένουμε στο επίπεδο της κλασικής θεωρίας πεδίου. Σε ένα πρώτο βήμα, τα μεσονικά πεδία είναι μη φυσικά αντικείμενα και μη κβαντικά. Συνεπώς, οι εξισώσεις κίνησης δεν περιέχουν όρους τύπου Fock. Σε αυτό το επίπεδο έχουμε μία σχετικιστική θεωρία τύπου Hartree. Τα μεσόνια δεν έχουν μεγάλη σχέση με τα μεσόνια στον ελεύθερο χώρο. Συγκεκριμένα το μοντέλο δεν περιλαμβάνει πιόνια και το σ -μεσόνιο, το οποίο παίζει σημαντικό ρόλο για τη δημιουργία ενός μεγάλου ελκτικού

πεδίου στον πυρήνα, δεν έχει παρατηρηθεί ποτέ. Εν ολίγοις, τα μεσόνια επιτρέπουν την εισαγωγή των κλασικών πεδίων στον πυρήνα με τους κατάλληλους σχετικιστικούς κβαντικούς αριθμούς.

2. Επιδράσεις που οφείλονται στη θάλασσα Dirac απαλείφονται, δηλαδή φαινόμενα πόλωσης του κενού δεν λαμβάνονται υπόψιν. Αυτό συχνά αναφέρεται ως προσέγγιση “no sea”. Στην πραγματικότητα, είναι μία έννοια, η οποία αποτελεί τη βάση αυτού του μοντέλου και όχι μία προσέγγιση. Έχει αποδειχτεί ότι, θεωρητικά, η θάλασσα του Dirac μπορεί να συμπεριληφθεί σε ένα πρώτο επίπεδο. Αυτό οδηγεί σε μια λογαριθμική απόκλιση της βαθμωτής πυκνότητας η οποία μπορεί να επανακανονικοποιηθεί προσθέτοντας μη-γραμμικούς όρους για την αφαίρεση αυτής της απόκλισης, οι όροι αυτοί είναι τρίτης και τέταρτης τάξης στο σ -πεδίο. Προκύπτουν έτσι αλλαγές μέχρι και 30% στα αποτελέσματα. Όμως, από τη στιγμή που εδώ έχουμε να κάνουμε με ένα φαινομενολογικό μοντέλο, μπορεί κανείς να προσαρμόσει εκ νέου τις παραμέτρους του μοντέλου και να καταλήξει στο ίδιο αποτέλεσμα με την επανακανονικοποίηση[73, 75]. Αυτό σημαίνει ότι οι επιδράσεις από την πόλωση του κενού δεν αγνοούνται αλλά απορροφούνται με ένα φαινομενολογικό τρόπο στις σταθερές σύζευξης του μοντέλου.
3. Έχει αναγνωριστεί[76] αρκετά νωρίς ότι το μοντέλο με γραμμικούς όρους σύζευξης μεταξύ μεσονίων-νουκλεονίων, δεν παρέχει τη σωστή εξάρτηση από την πυκνότητα στην πυρηνική ύλη. Η ιδιότητα της ασυμπίεστης πυρηνικής ύλης ενισχύεται σε πολύ μεγάλο βαθμό και οι ιδιότητες στην επιφάνεια του πυρήνα δεν περιγράφονται κατάλληλα. Συνεπώς είναι απαραίτητη η εισαγωγή μία πρόσθετης εξάρτησης από την πυκνότητα. Αυτό έχει γίνει στη βιβλιογραφία με διάφορους τρόπους, είτε με μη γραμμικούς όρους σύζευξης στο κομμάτι των μεσονίων[48, 76–79] ή με μία άμεση εξάρτηση από την πυκνότητα στους κόμβους σύζευξης μεσονίων-νουκλεονίων.

2.1 Σχετικιστική θεωρία ανταλλαγής μεσονίων

Στη συνέχεια περιγράφονται τα βασικά συστατικά των σχετικιστικών μοντέλων που περιγράφουν την ανταλλαγή μεσονίων, όπως χρησιμοποιούνται στο πλαίσιο της θεωρίας των συναλλοίωτων συναρτησοειδών πυκνότητας.

Το αρχικό σημείο της σχετικιστικής θεωρίας μέσου-πεδίου είναι η Λαγκραντζιανή πυκνότητα που έχει τη μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi} \left[i\gamma^\mu \partial_\mu - M - g_\sigma \sigma - g_\omega \gamma^\mu \omega_\mu - g_\rho \gamma^\mu \vec{\tau} \cdot \vec{\rho}_\mu - e\gamma^\mu A_\mu \right] \psi \\ & + \frac{1}{2} \partial^\mu \sigma \partial_\mu \sigma - U_\sigma(\sigma) - \frac{1}{4} \Omega^{\mu\nu} \Omega_{\mu\nu} + U_\omega(\omega_\mu) \\ & - \frac{1}{4} \vec{R}^{\mu\nu} \cdot \vec{R}_{\mu\nu} + U_\rho(\vec{\rho}_\mu) - \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

όπου M και m_m ($m = \sigma, \omega, \rho$) είναι οι μάζες των νουκλεονίων και των μεσονίων αντίστοιχα και g_m είναι οι σταθερές σύζευξης. e είναι το θεμελιώδες φορτίο των πρωτονίων και μηδενίζεται για τα νετρόνια. Οι τανυστές των μεσονικών πεδίων δίνονται από

$$\Omega^{\mu\nu} = \partial^\mu \omega^\nu - \partial^\nu \omega^\mu, \quad (2.2\alpha')$$

$$\vec{R}^{\mu\nu} = \partial^\mu \vec{\rho}^\nu - \partial^\nu \vec{\rho}^\mu, \quad (2.2\beta')$$

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \quad (2.2\gamma')$$

Στη συνέχεια, τα διανύσματα στο χώρο του ισοσπίν θα συμβολίζονται με βέλη και τα διανύσματα στο χώρο με έντονα γράμματα. Οι δείκτες με ελληνικούς χαρακτήρες μ και ν διατρέχουν τους δείκτες Minkowski 0,1,2,3 ή $(x^\mu) = (t, x, y, z)$.

Σε αυτό το σχήμα, το ισοβαθμωτό-βαθμωτό σ -μεσόνιο περιγράφει ένα ελκτικό τμήμα μεσαίας ή μεγάλης εμβέλειας της πυρηνικής αλληλεπίδρασης, ενώ το απωστικό μέρος δίνεται από το ισοβαθμωτό-διανυσματικό ω -μεσόνιο. Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο $A^\mu(x)$ καλύπτει την αλληλεπίδραση Coulomb ενώ η εξάρτηση από το ισοσπίν, δηλαδή τη διαφορά ανάμεσα στον αριθμό νετρονίων και πρωτονίων, περιγράφεται από το ισοδιανυσματικό-διανυσματικό ρ -μεσόνιο. Το πεδίο του π -μεσονίου δεν περιλαμβάνεται. Για λόγους διατήρησης της ομοτιμίας δεν συνεισφέρει στο επίπεδο Hartree. Φυσικά, το πόνιο παίζει ένα σημαντικό ρόλο στη μικροσκοπική περιγραφή της πυρηνικής δύναμης[25, 80, 81], όπως θα εξηγήσουμε στο κεφάλαιο 3.1. Συγκεκριμένα, έχει ήδη αναφερθεί ότι η συζευγμένη ανταλλαγή δύο πιονίων συνεπάγεται την ισχυρή έλξη στις ενδιάμεσες αποστάσεις. Στο μοντέλο που περιγράψαμε αυτή λαμβάνεται υπόψιν με την χρήση του σ -μεσονίου με έναν φαινομενολογικό τρόπο.

Υπάρχει επίσης η δυνατότητα να προσθέσει κανείς και ένα ισοδιανυσματικό βαθμωτό μεσόνιο το οποίο συνήθως λέγεται δ -μεσόνιο. Η συμπεριφορά του είναι παρόμοια με το βαθμωτό μεσόνιο και οδηγεί σε εξάρτηση από την πυκνότητα της μάζας Dirac. Παίζει ρόλο στη ασύμμετρη πυρηνική ύλη σε πολύ μεγάλες πυκνότητες[82]. Όμως μπορεί να αποδειχτεί[60] ότι σε πυκνότητες που αφορούν την πυρηνική δομή πεπερασμένων πυρήνων, η επίδραση του δ -μεσονίου μπορεί να απορροφηθεί πλήρως μεταβάλλοντας την σταθερά σύζευξης του ρ -μεσονίου. Στην πραγματικότητα, τα πειραματικά δεδομένα μέχρι στιγμής δεν επιτρέπουν τον καθορισμό της σύζευξης των ρ - και δ -μεσονίων ξεχωριστά. Συνεπώς το δ -μεσόνιο δεν συμπεριλαμβάνεται στις παραμέτρους των πιο αποτελεσματικών συναρτησοειδών.

Οι μη-γραμμικοί όροι αυτό-σύζευξης $U_\sigma(\sigma)$, $U_\omega(\omega_\mu)$ και $U_\rho(\hat{\rho}_\mu)$ για τα σ -, ω - και ρ -μεσόνια στη Λανγκραντζιανή πυκνότητα (2.1) έχουν την ακόλουθη μορφή:

$$U_\sigma(\sigma) = \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + \frac{1}{3}g_2\sigma^3 + \frac{1}{4}g_3\sigma^4, \quad (2.3\alpha')$$

$$U_\omega(\omega_\mu) = \frac{1}{2}m_\omega^2\omega^\mu\omega_\mu + \frac{1}{4}c_3(\omega^\mu\omega_\mu)^2, \quad (2.3\beta')$$

$$U_\rho(\vec{\rho}_\mu) = \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\rho}_\mu + \frac{1}{4}d_3(\vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\rho}_\mu)^2. \quad (2.3\gamma')$$

Θα πρέπει να αναφερθεί ότι στην πιο απλή εκδοχή της σχετικιστικής θεωρίας πεδίου, δηλαδή το σ - ω μοντέλο [71], τα μεσόνια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, κάτι που οδηγεί σε πολύ μεγάλη ασυμπίεστοτητα στην πυρηνική ύλη. Γι' αυτό και προτάθηκαν οι μη-γραμμικοί όροι με το σ -μεσόνιο[76]. Με σκοπό την ανα- παραγωγή της εξάρτησης από την πυκνότητα των διανυσματικών και βαθμωτών δυναμικών από τους υπολογισμούς Dirac-Brueckner[83], εισήχθη η μη-γραμμική αυτό-σύζευξη του ω -μεσονίου[84]. Επιπλέον μία μη-γραμμική αυτό-σύζευξη του ισοδιανυσματικού ρ -μεσονίου[79] καθώς και μία μη-γραμμική σύζευξη ανάμεσα στα ω και ρ μεσόνια[85] προστέθηκαν για να βελτιώσουν την εξάρτηση από την πυκνότητα στο ισοδιανυσματικό κομμάτι. Στη θέση των μη γραμμικών συζεύξεων μεταξύ των μεσονίων, μπορεί κανείς να εισάγει θεωρίες σχετικιστικού μέσου- πεδίου με μία απευθείας εξάρτηση των σταθερών σύζευξης από την πυκνότητα [79][83] [16, 50, 86, 87]. Στην περίπτωση αυτή μπορεί κανείς να αποφύγει αστάθειες σε πολύ μεγάλες πυκνότητες.

Από την Λαγκραντζιανή πυκνότητα (2.1), προκύπτει ο τελεστής της Χαμιλτονιανής από τον γενικό μετασχηματισμό Legendre (λεπτομέρειες αναφέρονται στο [21])

$$H = \int d^3r \mathcal{H} = \int d^3r \left[\sum_m \pi_m \frac{\partial \phi_m}{\partial t} - \mathcal{L}(\mathbf{r}) \right]. \quad (2.4)$$

Οι συζυγείς ορμές των τελεστών των πεδίων ϕ_m ($\phi_m = \psi, \sigma, \omega_\nu, \vec{\rho}_\nu, A_\nu$) ορίζονται από τη σχέση

$$\pi_m = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\partial \phi_m / \partial t]}. \quad (2.5)$$

Με βάση αυτό η Χαμιλτονιανή πυκνότητα μπορεί να γραφτεί ως

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\psi + \mathcal{H}_\sigma + \mathcal{H}_\omega + \mathcal{H}_\rho + \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_{\text{int}} \quad (2.6)$$

με

$$\mathcal{H}_\psi = \psi^\dagger [\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta M] \psi, \quad (2.7)$$

$$\mathcal{H}_\sigma = -\frac{1}{2}\sigma\Delta\sigma + U_\sigma(\sigma), \quad \mathcal{H}_\omega = \frac{1}{2}\omega_\mu\Delta\omega^\mu - U_\omega(\omega), \quad (2.8)$$

$$\mathcal{H}_\rho = \frac{1}{2}\vec{\rho}_\mu\Delta\vec{\rho}^\mu - U_\rho(\rho), \quad \mathcal{H}_A = \frac{1}{2}A_\mu\Delta A^\mu, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = g_\sigma\sigma\bar{\psi}\psi + g_\omega\omega_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi + g_\rho\vec{\rho}_\mu \cdot \bar{\psi}\boldsymbol{\gamma}^\mu\vec{\tau}\psi + eA_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \quad (2.10)$$

Η σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου διατυπώνεται στη βάση της προαναφερθείσας Λαγκραντζιανής (2.1) κάτω από τις προσεγγίσεις του μέσου-πεδίου και της “no-sea”. Η προσέγγιση του μέσου-πεδίου αφαιρεί όλες τις κβαντικές διακυμάνσεις των μεσονικών πεδίων και έτσι τα πεδία των μεσονίων αντιπροσωπεύονται από κλασικά πεδία από τις αναμενόμενες τιμές τους, αυτό συνεπάγεται ότι τα νουκλεόνια κινούνται ανεξάρτητα το ένα από το άλλο μέσα στα πεδία των μεσονίων. Συνεπώς, ο τελεστής του πεδίου των νουκλεονίων μπορεί σε κάθε στιγμή να αναπτυχθεί σε όρους των καταστάσεων των ελεύθερων μονών-σωματιδίων με δείκτη k

$$\psi(x) = \sum_k \psi_k(x) c_k \quad \text{και} \quad \psi^\dagger(x) = \sum_k \psi_k^*(x) c_k^\dagger, \quad (2.11)$$

όπου c_k είναι ο τελεστής καταστροφής ενός νουκλεονίου στην κατάσταση k και ψ_k είναι η αντίστοιχη μονό-σωματιδιακή κυματοσυνάρτηση. Ο τελεστής c_k και ο συζυγής c_k^\dagger ικανοποιούν τους κανόνες αντιμετάθεσης

$$\{c_k, c_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \quad \text{και} \quad \{c_k, c_{k'}\} = \{c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger\} = 0. \quad (2.12)$$

Η βασική κατάσταση του πυρήνα μπορεί να κατασκευαστεί ως εξής

$$|\Phi\rangle = \prod_i^A c_i^\dagger |0\rangle \quad \text{με} \quad \langle \Phi | \Phi \rangle = 1. \quad (2.13)$$

Το γινόμενο (2.13) περιορίζεται στις κατειλημμένες μονοσωματιδιακές καταστάσεις με θετική ενέργεια. Αυτό είναι που πριν ονομάσαμε “no-sea” προσέγγιση. Για τον υπολογισμό της αναμενόμενης τιμής της Χαμιλτονιανής (2.6) σε σχέση με την πυρηνική βασική κατάσταση (2.13), θα χρειαστεί να υπολογίσει κανείς όρους όπως $\langle \Phi | c_{k'}^\dagger c_k | \Phi \rangle$, $\langle \Phi | \phi c_{k'}^\dagger c_k | \Phi \rangle$ και $\langle \Phi | \phi | \Phi \rangle$, όπου ϕ είναι ένα από τα μεσονικά πεδία σ , ω_μ , $\vec{\rho}_\mu$ ή A_μ . Από τη στιγμή που το ϕ αντιστοιχεί σε κλασικά πεδία, έχουμε

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \phi | \Phi \rangle &= \phi \\ \langle \Phi | \phi c_{k'}^\dagger c_k | \Phi \rangle &= \phi \langle \Phi | c_{k'}^\dagger c_k | \Phi \rangle, \end{aligned} \quad (2.14)$$

και έτσι μένει κανείς μόνο με τον πίνακα της μονοσωματιδιακής πυκνότητας

$$\hat{\rho}_{kk'} = \langle \Phi | c_{k'}^\dagger c_k | \Phi \rangle. \quad (2.15)$$

Συνεπώς η αναμενόμενη τιμή της Χαμιλτονιανής (2.6) σε σχέση με τη $|\Phi\rangle$, δηλαδή η συνολική ενέργεια του συστήματος, μπορεί να γραφτεί ως ένα ενεργειακό συναρτησοειδές της πυκνότητας

$$E_{RMF}(\hat{\rho}, \phi) = \langle \Phi | \mathcal{H} | \Phi \rangle, \quad (2.16)$$

με

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \mathcal{H} | \Phi \rangle &= \text{Tr} [\hat{h}^0 \hat{\rho}] + \text{Tr} \left[\beta (g_\sigma \sigma + g_\omega \omega_\mu \gamma^\mu + g_\rho \vec{\tau} \cdot \vec{\rho}_\mu \gamma^\mu + e A_\mu \gamma^\mu) \hat{\rho} \right] \\ &+ \int d^3 r \left\{ -\frac{1}{2} \sigma \Delta \sigma + U_\sigma(\sigma) + \frac{1}{2} \omega_\mu \Delta \omega^\mu - U_\omega(\omega) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \vec{\rho}_\mu \cdot \Delta \vec{\rho}^\mu - U_\rho(\rho) + \frac{1}{2} A_\mu \Delta A^\mu \right\}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

όπου τα ίχνη εμπεριέχουν την ολοκλήρωση στο χώρο των συντεταγμένων και η άθροιση γίνεται πάνω στο δείκτη Dirac του πίνακα της πυκνότητας $\hat{\rho}$ και της Χαμιλτονιανής του ενός νουκλεονίου

$$\hat{h}^0 = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + M. \quad (2.18)$$

Για στατικές καταστάσεις οι χρονικές παράγωγοι των μεσονικών πεδίων μηδενίζονται και η μονοσωματιδιακή κυματοσυνάρτηση των νουκλεονίων μπορεί να γραφτεί ως

$$\psi_a(x) = \psi_a(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_a t}. \quad (2.19)$$

Ο πίνακας πυκνότητας γράφεται ως

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i^A |\psi_i(\mathbf{r})\rangle \langle \psi_i^\dagger(\mathbf{r}')|. \quad (2.20)$$

Επιπρόσθετα, υποθέτουμε ότι στις παρούσες πυρηνικές εφαρμογές της θεωρίας, οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις των νουκλεονίων δεν αναμειγνύουν το ισοσπίν, είναι δηλαδή ιδιοσυναρτήσεις του τ_3 και μόνο η τρίτη συνιστώσα ρ_3^μ του ισοδιανυσματικού-διανυσματικού μεσονίου $\vec{\rho}_\mu$ επιβιώνει.

Οι εξισώσεις κίνησης των νουκλεονίων και των μεσονίων εξάγονται από την απαίτηση το συναρτησοειδές της ενέργειας (2.17) να είναι στατικό ως προς μεταβολές των πεδίων ψ_k^\dagger και ϕ ,

$$\delta (E_{\text{RMF}}(\hat{\rho}, \phi) - \text{Tr}(\Lambda \hat{\rho})) = 0, \quad (2.21)$$

όπου Λ είναι ο διαγώνιος πίνακας των πολλαπλασιαστών Lagrange ϵ_k , ο οποίος εγγυάται ότι οι μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις ψ_k είναι κανονικοποιημένες. Προκύπτει ότι οι ϵ_k είναι οι μονοσωματιδιακές ενέργειες που εισήχθησαν στην εξίσωση (2.19). Εν τέλει, καταλήγουμε στην εξίσωση Kohn-Sham για τα νουκλεόνια η οποία έχει τη μορφή μιας εξίσωσης Dirac

$$[\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{V}) + V^0 + \beta(M + S)] \psi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k \psi_k(\mathbf{r}), \quad (2.22)$$

με το βαθμωτό δυναμικό S και το διανυσματικό δυναμικό V^μ :

$$S(\mathbf{r}) = g_\sigma \sigma(\mathbf{r}), \quad (2.23\alpha')$$

$$V^\mu(\mathbf{r}) = g_\omega \omega^\mu(\mathbf{r}) + g_\rho \tau_3 \rho_3^\mu(\mathbf{r}) + eA^\mu(\mathbf{r}). \quad (2.23\beta')$$

Στην εξίσωση (2.21) η αρχή μεταβολών ως προς τα μεσονικά πεδία σ , ω_μ , ρ_3^μ και A_μ οδηγεί στην εξίσωση Klein-Gordon για τα σ -, ω -, ρ - μεσόνια και στην εξίσωση Poisson για το φωτόνιο:

$$-\Delta\sigma + U'_\sigma(\sigma) = -g_\sigma \rho_s, \quad (2.24\alpha')$$

$$-\Delta\omega^\mu + U'_\omega{}^\mu(\omega) = g_\omega j^\mu, \quad (2.24\beta')$$

$$-\Delta\rho_3^\mu + U'_\rho{}^\mu(\rho_3) = g_\rho j_3^\mu, \quad (2.24\gamma')$$

$$-\Delta A^\mu = e j_c^\mu, \quad (2.24\delta')$$

όπου

$$U'_\sigma = \frac{\partial U_\sigma}{\partial \sigma}, \quad U'_\omega{}^\mu = \frac{\partial U_\omega}{\partial \omega_\mu}, \quad U'_\rho{}^\mu = \frac{\partial U_\rho}{\partial \rho_{3\mu}}. \quad (2.25)$$

Οι πηγές των εξισώσεων Klein-Gordon είναι η βαθμωτή πυκνότητα ρ_s , το βαρυονικό ρεύμα $j^\mu = (\rho_v, \mathbf{j})$, το ισοδιανυσματικό ρεύμα $j_3^\mu = (\rho_3, \mathbf{j}_3)$ και το ηλεκτρομαγνητικό ρεύμα $j_c^\mu = (\rho_c, \mathbf{j}_c)$ τα οποία ορίζονται ως

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \langle \Phi | \bar{\psi} \psi | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.26\alpha')$$

$$j^\mu(\mathbf{r}) = \langle \Phi | \bar{\psi} \gamma^\mu \psi | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \gamma^\mu \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.26\beta')$$

$$j_3^\mu(\mathbf{r}) = \langle \Phi | \bar{\psi} \gamma^\mu \tau_3 \psi | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \gamma^\mu \tau_3 \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.26\gamma')$$

$$j_c^\mu(\mathbf{r}) = \langle \Phi | \bar{\psi} \gamma^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \psi | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^A \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \gamma^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \psi_i(\mathbf{r}). \quad (2.26\delta')$$

Η ενέργεια του συστήματος με βάση τη σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου μπορεί να προκύψει από το συναρτησοειδές της ενέργειας (2.17),

$$E_{\text{RMF}} = E_{\text{kin}} + E_\sigma + E_\omega + E_\rho + E_{\text{e.m.}} + E_{\text{N.L.}}, \quad (2.27)$$

όπου E_{kin} είναι η κινητική ενέργεια, και E_σ , E_ω και E_ρ αντιπροσωπεύουν τις

δυναμικές ενέργειες, πιο συγκεκριμένα,

$$E_{\text{kin}} = \int d^3r \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger(\mathbf{r})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta M)\psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.28\alpha')$$

$$E_\sigma = \frac{1}{2}g_\sigma \int d^3r \rho_s(\mathbf{r})\sigma(\mathbf{r}), \quad (2.28\beta')$$

$$E_\omega = \frac{1}{2}g_\omega \int d^3r j_\mu(\mathbf{r})\omega^\mu(\mathbf{r}), \quad (2.28\gamma')$$

$$E_\rho = \frac{1}{2}g_\rho \int d^3r j_{3\mu}(\mathbf{r})\rho_3^\mu(\mathbf{r}), \quad (2.28\delta')$$

$$E_{\text{e.m.}} = \frac{1}{2}e \int d^3r j_{c\mu}(\mathbf{r})A^\mu(\mathbf{r}). \quad (2.28\epsilon')$$

Η ενέργεια του μη-γραμμικού κομματιού ορίζεται ως

$$E_{\text{N.L.}} = \int d^3r \left\{ U_\sigma - \frac{1}{2}\sigma U'_\sigma - U_\omega + \frac{1}{2}\omega_\mu U'_\omega{}^\mu - U_\rho + \frac{1}{2}\rho_{3\mu} U'_\rho{}^\mu \right\}. \quad (2.29)$$

Μοντέλα όπου οι σταθερές σύζευξης εξαρτώνται από την πυκνότητα[16, 79, 83, 86, 87] δεν περιέχουν μη-γραμμικούς όρους στις συζεύξεις μεταξύ των μεσονίων. Συνήθως θεωρείται ότι οι σταθερές σύζευξης $g_\sigma(\rho_v)$, $g_\omega(\rho_v)$ και $g_\rho(\rho_v)$ εξαρτώνται από τη διανυσματική πυκνότητα ρ_v . Η εξάρτηση αυτή πρέπει να ληφθεί υπόψη ανεξάρτητα στην μεταβολή του συναρτησοειδούς για την εξαγωγή των εξισώσεων κίνησης[16]. Αυτό οδηγεί σε επιπρόσθετους όρους στην εξίσωση Dirac

$$\left[\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{V}) + V^0(\mathbf{r}) + \Sigma_R^0(\mathbf{r}) + \beta (M + S(\mathbf{r})) \right] \psi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \psi_k(\mathbf{r}), \quad (2.30)$$

όπου Σ_R^0 είναι ο όρος ανακατανομής

$$\Sigma_R^0 = \frac{\partial g_\sigma}{\partial \rho_v} \rho_s \sigma + \frac{\partial g_\omega}{\partial \rho_v} \rho_v \omega^0 + \frac{\partial g_\rho}{\partial \rho_v} \rho_3 \rho_3^0. \quad (2.31)$$

Από τη στιγμή που η συμμετρία λόγω μεταφοράς παραβιάζεται στην προσέγγιση του μέσου-πεδίου, πρέπει να γίνει η διόρθωση για την κίνηση του κέντρου-μάζας. Στην συγκεκριμένη περίπτωση, αυτό συνήθως γίνεται εισάγοντας τη μικροσκοπική ενέργεια διόρθωσης κέντρου-μάζας[88, 89]

$$E_{\text{c.m.}}^{\text{mic}} = -\frac{1}{2MA} \langle \hat{\mathbf{P}}_{\text{c.m.}}^2 \rangle, \quad (2.32)$$

όπου A είναι ο μαζικός αριθμός και $\hat{\mathbf{P}}_{\text{c.m.}}^2 = \sum_i^A \hat{p}_i^2$ είναι η συνολική ορμή στο σύστημα αναφοράς του κέντρου μάζας. Συνεπώς, η συνολική ενέργεια για το πυρηνικό σύστημα γίνεται

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{RMF}} + E_{\text{c.m.}}^{\text{mic}}. \quad (2.33)$$

2.2 Η σχετικιστική θεωρία σημειακής-σύζευξης

Η σχετικιστική θεωρία σημειακής σύζευξης είναι ένας ακόμη τρόπος για τη δημιουργία ενός σχετικιστικού ενεργειακού συναρτησοειδούς πυκνότητας. Στη θεωρία αυτή[49, 51, 90, 91], η ανταλλαγή μεσονίων σε κάθε κανάλι (βαθμωτό-ισοβαθμωτό, διανυσματικό-ισοβαθμωτό, βαθμωτό-ισοδιανυσματικό και διανυσματικό -ισοδιανυσματικό) αντικαθίσταται από αντίστοιχες τοπικές (σημειακές) αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα νουκλεόνια. Όπως στη μη-σχετικιστική περίπτωση των μοντέλων Skyrme, οι επιδράσεις πεπερασμένης εμβέλειας προσεγγίζονται από τοπικούς όρους με παραγώγους. Η εξάρτηση από την πυκνότητα ενσωματώνεται είτε μέσα από εξαρτώμενες από την πυκνότητα σταθερές σύζευξης στις αλληλεπιδράσεις δύο-σωμάτων, είτε σε αναλογία με τις μη-γραμμικές συζεύξεις των μεσονίων, από όρους επαφής πολλών σωμάτων. Πιο πρόσφατα, η θεωρία σημειακής-σύζευξης έχει συγκεντρώσει αυξανόμενη προσοχή εξαιτίας συγκεκριμένων πλεονεκτημάτων. Πρώτον, είναι σημαντικά απλούστερη στις υπολογιστικές εφαρμογές: δεν περιλαμβάνει την επίλυση των εξισώσεων Klein-Gordon και, όπως και στα μη-σχετικιστικά μοντέλα, δεν περιέχει περίπλοκα στοιχεία πίνακα δύο-σωμάτων πεπερασμένης εμβέλειας σε εφαρμογές που είναι πέρα από το μέσο-πεδίο[66, 69, 92–94]. Δεύτερον, γίνεται δυνατή η μελέτη του ρόλου της φυσικότητας[95, 96] στις φαινομενικές θεωρίες για μελέτη προβλημάτων πυρηνικής δομής. Τρίτον, είναι σχετικά εύκολο να συμπεριληφθούν οι όροι ανταλλαγής Fock[97], και δίνει περισσότερες δυνατότητες για την διερεύνηση της συσχέτισης με μη-σχετικιστικά μοντέλα[98]. Στη συνέχεια παρουσιάζεται το θεωρητικό πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας σημειακής-σύζευξης.

Τα βασικά θεμελιώδη στοιχεία της θεωρίας των συναλλοίωτων συναρτησοειδών πυκνότητας με αλληλεπιδράσεις μηδενικής εμβέλειας είναι

$$(\bar{\psi}O\Gamma\psi), \quad O \in \{1, \vec{\tau}\}, \quad \Gamma \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5\gamma_\mu, \sigma_{\mu,\nu}\}, \quad (2.34)$$

όπου ψ είναι το πεδίο των Dirac σπινόρων των νουκλεονίων, $\vec{\tau}$ είναι ο πίνακας Pauli του ισοσπίν, και Γ είναι ο γενικός συμβολισμός για τους 4×4 πίνακες Dirac. Υπάρχουν συνολικά δέκα τέτοια θεμελιώδη στοιχεία τα οποία χαρακτηρίζονται από τις ιδιότητες του μετασχηματισμού τους στο χώρο Minkowski και στο χώρο του ισοσπίν.

Η γενική φαινομενική-δραστική Λαγκραντζιανή μπορεί να γραφτεί ως μία σειρά δυνάμεων όρων του $\bar{\psi}O\psi$ και των παραγώγων τους, με τους όρους ανώτερης τάξης να αντιπροσωπεύουν τις ενδιάμεσες συσχετίσεις πολλών-σωμάτων. Στην εφαρμογή της θεωρίας ξεκινάμε από την ακόλουθη Λαγκραντζιανή πυκνότητα της μορφής

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}^{free} + \mathcal{L}^{Af} + \mathcal{L}^{hot} + \mathcal{L}^{der} + \mathcal{L}^{em} \quad (2.35)$$

που περιλαμβάνει την Λαγκραντζιανή πυκνότητα των ελεύθερων νουκλεονίων:

$$\mathcal{L}^{free} = \bar{\psi}(i\gamma_\mu\partial^\mu - M)\psi, \quad (2.36)$$

τους όρους σημειακής-σύζευξης τεσσάρων-φερμιονίων:

$$\mathcal{L}^{4f} = -\frac{1}{2}\alpha_S(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) \quad (2.37)$$

$$-\frac{1}{2}\alpha_{TS}(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TV}(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi), \quad (2.38)$$

τους όρους ανώτερης τάξης (*higher order terms*) για τον υπολογισμό φαινομένων του μέσου, και οδηγούν στην εξάρτηση από την πυκνότητα των σταθερών σύζευξης στην προσέγγιση του μέσου-πεδίου, με μια πολυωνυμικού τύπου εξάρτηση:

$$\mathcal{L}^{hot} = -\frac{1}{3}\beta_S(\bar{\psi}\psi)^3 - \frac{1}{4}\gamma_S(\bar{\psi}\psi)^4 - \frac{1}{4}\gamma_V[(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)]^2, \quad (2.39)$$

τους όρους με τις παραγώγους \mathcal{L}^{der} για την προσομοίωση φαινομένων πεπερασμένης εμβέλειας που είναι κρίσιμα για την ποσοτική περιγραφή των κατανομών πυρηνικής πυκνότητας (π.χ. πυρηνικές ακτίνες)

$$\mathcal{L}^{der} = -\frac{1}{2}\delta_S\partial_\nu(\bar{\psi}\psi)\partial^\nu(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\delta_V\partial_\nu(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)\partial^\nu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) \quad (2.40)$$

$$-\frac{1}{2}\delta_{TS}\partial_\nu(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi)\partial^\nu(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) - \frac{1}{2}\delta_{TV}\partial_\nu(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)\partial^\nu(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)$$

και τους όρους της ηλεκτρομαγνητικής αλληλεπίδρασης:

$$\mathcal{L}^{em} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} - \bar{\psi}eA_\mu\gamma^\mu\psi. \quad (2.41)$$

A_μ είναι το τετρα-διάνυσμα του δυναμικού πεδίου και $F_{\mu\nu}$ είναι ο πεδιακός τανυστής ισχύος του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. e είναι η μονάδα ηλεκτρικού φορτίου για τα πρωτόνια, η οποία είναι μηδέν για τα νετρόνια. Συνολικά υπάρχουν 11 σταθερές σύζευξης, $\alpha_S, \alpha_V, \alpha_{TS}, \alpha_{TV}, \beta_S, \gamma_S, \gamma_V, \delta_S, \delta_V, \delta_{TS}$, και δ_{TV} , στις οποίες οι α αναφέρονται στους όρους τεσσάρων φερμιονίων, οι β και γ στους όρους τρίτης και τέταρτης τάξης, και οι δ στις συζεύξεις με παραγώγους. Οι δείκτες S, V , και T υποδεικνύουν τις συμμετρίες των συζεύξεων, δηλαδή S είναι για τις βαθμωτές, V για τις διανυσματικές, και TS και TV για τις ισοβαθμωτές και ισοδιανυσματικές αντίστοιχα. Όπως στις θεωρίες με ανταλλαγή μεσονίων όπου το δ μεσόνιο καθορίζει το ισοδιανυσματικό-βαθμωτό κανάλι έτσι και εδώ οι όροι α_{TS} και δ_{TS} στις εξισώσεις Eqs.(2.37) και (2.40) συνήθως εξαλείφονται μιας και η προσαρμογή των παραμέτρων με την ενσωμάτωση της ισοδιανυσματικής-βαθμωτής αλληλεπίδρασης δεν βελτιώνει την περιγραφή των ιδιοτήτων της πυρηνικής βασικής

κατάστασης[91]. Επιπροσθέτως, το ψευδοβαθμωτό γ_5 και ψευδοδιανυσματικό $\gamma_5\gamma_\mu$ κανάλι επίσης απαλείφονται από την εξίσωση (2.35) αφού δε συνεισφέρουν στο επίπεδο Hartree λόγω της διατήρησης της ομοτιμίας στους πυρήνες.

Η Χαμιλτονιανή πυκνότητα, δηλαδή η 00 συνιστώσα του τανυστή ενέργειας-ορμής μπορεί να βρεθεί από τον μετασχηματισμό Legendre

$$\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_i} \dot{\phi}_i - \mathcal{L}, \quad (2.42)$$

όπου ϕ_i αντιπροσωπεύει το πεδίο είτε των νουκλεονίων είτε του φωτονίου. Συνεπώς, η συνολική Χαμιλτονιανή γίνεται

$$\begin{aligned} H &= \int d^3r \mathcal{H} \\ &= \int d^3r \left\{ \psi^\dagger [\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + M] \psi \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_S (\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) + \frac{1}{2} \alpha_V (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) + \frac{1}{2} \alpha_{TV} (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi) \\ &\quad + \frac{1}{3} \beta_S (\bar{\psi}\psi)^3 + \frac{1}{4} \gamma_S (\bar{\psi}\psi)^4 + \frac{1}{4} \gamma_V [(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)]^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \delta_S (\bar{\psi}\psi)\Delta(\bar{\psi}\psi) + \frac{1}{2} \delta_V (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)\Delta(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) + \frac{1}{2} \delta_{TV} (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi)\Delta(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi) \\ &\quad \left. + \bar{\psi}e\gamma^\mu A_\mu\psi + \frac{1}{2} A_\mu\Delta A^\mu \right\}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Παρόμοια με την περίπτωση ανταλλαγής μεσονίων και υποθέτοντας ότι οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις δεν αναμειγνύουν το ισοσπίν, το ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας για το πυρηνικό σύστημα μπορεί να γραφτεί ως,

$$\begin{aligned} E_{\text{RMF}} \equiv \langle \Phi | H | \Phi \rangle &= \int d^3r \left\{ \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta M) \psi_i \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_S \rho_s^2 + \frac{1}{3} \beta_S \rho_s^3 + \frac{1}{4} \gamma_S \rho_s^4 + \frac{1}{2} \delta_S \rho_s \Delta \rho_s \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_V j_\mu j^\mu + \frac{1}{4} \gamma_V (j_\mu j^\mu)^2 + \frac{1}{2} \delta_V j_\mu \Delta j^\mu \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_{TV} j_{3\mu} j_3^\mu + \frac{1}{2} \delta_{TV} j_{3\mu} \Delta j_3^\mu \\ &\quad \left. + e A_\mu j_p^\mu + \frac{1}{2} A_\mu \Delta A^\mu \right\}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

όπου οι τοπικές πυκνότητες και τα ρεύματα $\rho_s(\mathbf{r})$, $j^\mu(\mathbf{r})$, $j_3^\mu(\mathbf{r})$, και $j_c^\mu(\mathbf{r})$ δίνονται στις εξισώσεις(2.26).

Απαιτώντας την ελαχιστοποίηση του ενεργειακού συναρτησοειδούς πυκνότητας Eq. (2.44) ως προς το $\bar{\psi}_i$, καταλήγει κανείς στην εξίσωση Dirac για τα νουκλεόνια

$$[\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{V}) + V^0 + \beta(M + S)]\psi_k = \varepsilon_k \psi_k. \quad (2.45)$$

Εδώ, το τοπικό βαθμωτό $S(\mathbf{r})$ και διανυσματικό $V^\mu(\mathbf{r})$ δυναμικό είναι

$$S(\mathbf{r}) = \Sigma_s, \quad V^\mu(\mathbf{r}) = \Sigma^\mu + \tau_3 \Sigma_3^\mu, \quad (2.46)$$

όπου οι διάφορες αυτο-ενέργειες βαθμωτή-ισοβαθμωτή Σ_s , διανυσματική-ισοβαθμωτή Σ^μ , και η διανυσματική-ισοδιανυσματική Σ_3^μ , των νουκλεονίων δίνονται με όρους των διάφορων πυκνοτήτων,

$$\Sigma_s = \alpha_S \rho_s + \beta_S \rho_s^2 + \gamma_S \rho_s^3 + \delta_S \Delta \rho_s, \quad (2.47\alpha')$$

$$\Sigma^\mu = \alpha_V j^\mu + \gamma_V (j_\mu j^\mu) j^\mu + \delta_V \Delta j^\mu + e A^\mu, \quad (2.47\beta')$$

$$\Sigma_3^\mu = \alpha_{TV} j_3^\mu + \delta_{TV} \Delta j_3^\mu. \quad (2.47\gamma')$$

Το πεδίο Coulomb A^μ καθορίζεται από την εξίσωση Poisson (2.24δ').

Για ένα σύστημα που παραμένει αναλλοίωτο κάτω από χρονική αναστροφή, οι space-like συνιστώσες των ρευμάτων \mathbf{j} στην εξ. (2.26) και το διανυσματικό δυναμικό \mathbf{V} στην εξ. (2.46) μηδενίζονται. Έτσι η ολική ενέργεια δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned} E_{\text{RMF}} = \int d^3x \left\{ \sum_{i=1}^A \psi_i^\dagger (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta M) \psi_i + \frac{1}{2} \alpha_S \rho_s^2 + \frac{1}{2} \alpha_V \rho_v^2 + \frac{1}{2} \alpha_{TV} \rho_3^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{3} \beta_S \rho_s^3 + \frac{1}{4} \gamma_S \rho_s^4 + \frac{1}{4} \gamma_V \rho_v^4 + \frac{1}{2} \delta_S \rho_s \Delta \rho_s \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \delta_V \rho_v \Delta \rho_v + \frac{1}{2} \delta_{TV} \rho_3 \Delta \rho_3 + \frac{1}{2} e A^0 \rho_c \right\}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Μαζί με τη διόρθωση του κέντρου μάζας στην εξ. (2.32) έχουμε

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{RMF}} + E_{\text{c.m.}}^{\text{mic}}. \quad (2.49)$$

2.3 Συναλλοίωτη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας με συσχετίσεις ζεύγους

2.3.1 Γενικευμένες έννοιες μέσου-πεδίου στους πυρήνες

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κομμάτι, η θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας αντικατοπτρίζει το πρόβλημα ενός κβαντομηχανικού συστήματος αλληλοσχετιζόμενων πολλών-σωμάτων σε πρόβλημα ενός σώματος που περιγράφεται από γινόμενα καταστάσεων και πίνακες μονοσωματιδιακής πυκνότητας $\hat{\rho}$ με την ιδιότητα

$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, της οποίας το τοπικό μέρος είναι ταυτόσημο με την ακριβή τοπική πυκνότητα $\rho(\mathbf{r})$. Συνεπώς η θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας λειτουργεί καλύτερα σε συστήματα όπου μία φαινομενική περιγραφή μέσου-πεδίου είναι δυνατή. Όπως είναι γνωστό από την αρχή του μοντέλου φλοιών [10, 11] και του παραμορφωμένου μοντέλου φλοιών [99] η πυρηνική φυσική αποτελεί μια τέτοια περίπτωση. Η βασική ιδέα της έννοιας του μέσου-πεδίου στους πυρήνες είναι το γεγονός, ότι οι συσχετίσεις υπεισέρχονται στο σύστημα μέσω του σπασίματος συμμετριών. Εκτός από μερικές περιπτώσεις πολύ ελαφρών πυρήνων, όλα τα πυρηνικά μοντέλα μέσου-πέδιου παραβιάζουν τη συμμετρία λόγω μεταφοράς. Όταν επιβάλλεται η σφαιρική συμμετρία και η συμμετρία του αριθμού των σωματιδίων, το πυρηνικό μοντέλο φλοιών είναι εφαρμόσιμο μόνο σε μερικούς διπλά μαγικούς πυρήνες, όπου τα χάσματα μεταξύ των σφαιρικών φλοιών είναι αρκετά μεγάλα ώστε επιδράσεις από πιο πολύπλοκους σχηματισμούς να μπορούν να απαλειφθούν σε μια πρώτη προσέγγιση. Για πυρήνες με ανοιχτούς φλοιούς πρέπει να διαχωρίσουμε ανάμεσα σε συσχετίσεις σωματιδίου-οπής (ph) και σωματιδίου-σωματιδίου (pp). Σε πυρήνες που έχουν ένα μόνο μαγικό αριθμό, όπου σχηματισμοί κλειστών φλοιών του ενός τύπου σωματιδίων εγγυώνται σε μεγάλο βαθμό σφαιρικά σχήματα οι πιο σημαντικές συσχετίσεις είναι οι συσχετίσεις σωματιδίου-σωματιδίου. Επάγονται από φαινομενικές αλληλεπιδράσεις μικρής εμβέλειας που ευνοούν ζεύγη με $J = 0$ και μπορούν να ενσωματωθούν σε ένα γενικευμένο πλαίσιο του μέσου-πεδίου μέσω της θεωρίας BCS [18, 100] ή της θεωρίας Hartree-Bogoliubov. Η θεωρία αυτή σπάει τη συμμετρία λόγω μεταφοράς, την περιστροφική συμμετρία καθώς και τη συμμετρία βαθμίδας για τα πρωτόνια και τα νετρόνια. Φυσικά υπάρχουν και οι μεταβατικοί πυρήνες με ασθενείς αλληλεπιδράσεις ζεύγους ή μικρές παραμορφώσεις και συνύπαρξη πολλών σχημάτων. Αυτοί δεν μπορούν να περιγραφούν στο επίπεδο του μέσου-πεδίου, είναι όμως προσβάσιμοι με επεκτάσεις της θεωρίας συναρτησοειδών πυκνότητας πέρα από το μέσο-πεδίο [66].

2.4 Σχετικιστική θεωρία Hartree-Bogoliubov

Το φαινόμενο του ζευγαρώματος έχει ενσωματωθεί συχνά με έναν αρκετά φαινομενολογικό τρόπο μέσω του μοντέλου BCS με τη seniority δύναμη, προσαρμοσμένη στις διαφορές των μαζών άρτιων-περιττών πυρήνων από πειραματικά δεδομένα. Σε πολλές περιπτώσεις, όμως, αυτή η προσέγγιση δεν είναι ικανοποιητική. Πιο συγκεκριμένα, η φυσική των ασθενώς-δέσμιων πυρήνων υπαγορεύει την ενοποιημένη και αυτο-συνεπή αντιμετώπιση του μέσου-πεδίου μαζί με τις συσχετίσεις ζεύγους. Αυτό έχει οδηγήσει στην διατύπωση και την ανάπτυξη του σχετικιστικού μοντέλου Hartree-Bogoliubov (RHB) [21, 101–103]. Το μοντέλο RHB αποτελεί μία ενοποιημένη περιγραφή των συσχετίσεων σωματιδίου-οπής και σωματιδίου-σωματιδίου στο επίπεδο του μέσου-πεδίου με την εισαγωγή δύο μέσων δυναμικών:

το αυτο-συνεπές μέσο-πεδίο \hat{h} που εμπεριέχει όλες τις αλληλεπιδράσεις μεγάλης εμβέλειας σωματιδίου-οπής ph , και το πεδίο του ζευγαρώματος $\hat{\Delta}$ το οποίο αθροίζει όλες τις αλληλεπιδράσεις σωματιδίου-σωματιδίου (pp). Σε αναλογία με την εξ.(2.13) η βασική κατάσταση του πυρήνα περιγράφεται από μια γενικευμένη ορίζουσα τύπου Slater $|\Phi\rangle$ που αντιπροσωπεύει το κενό των ημισωματιδίων. Οι τελεστές των ημισωματιδίων ορίζονται από τον μοναδιακό μετασχηματισμό Bogoliubov των μονοσωματιδιακών τελεστών δημιουργίας και καταστροφής:

$$\alpha_k^+ = \sum_n U_{nk} c_n^+ + V_{nk} c_n, \quad (2.50)$$

όπου ο δείκτης n αναφέρεται στην αρχική βάση, για παράδειγμα μία βάση ταλαντωτή, η στις χωρικές συντεταγμένες (\mathbf{r}, s, t) , το σπιν και το ισοσπίν. Επίσης στην σχετικιστική περίπτωση ο δείκτης $p = f, g$ ξεχωρίζει τις μεγάλες και μικρές συνιστώσες του αντίστοιχου Dirac σπινόρα. Οι U και V είναι οι Hartree-Bogoliubov κυματοσυναρτήσεις που καθορίζονται από την αρχή των μεταβολών. Υπό την παρουσία των συσχετίσεων ζεύγους ο πίνακας της μονοσωματιδιακής πυκνότητας γενικεύεται σε δύο πυκνότητες[17]: την κανονική πυκνότητα $\hat{\rho}$ και τον τανυστή ζευγαρώματος $\hat{\kappa}$

$$\hat{\rho}_{nn'} = \langle \Phi | c_{n'}^\dagger c_n | \Phi \rangle, \quad \hat{\kappa}_{nn'} = \langle \Phi | c_{n'} c_n | \Phi \rangle. \quad (2.51)$$

Το ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας της RHB θεωρίας εξαρτάται συνεπώς και από τις δύο πυκνότητες

$$E_{\text{RHB}}[\hat{\rho}, \hat{\kappa}] = E_{\text{RMF}}[\hat{\rho}] + E_{\text{pair}}[\hat{\kappa}], \quad (2.52)$$

όπου $E_{\text{RMF}}[\hat{\rho}]$ είναι το συνηθισμένο συναρτησοειδές του σχετικιστικού μέσο-πεδίου που ορίζεται από την εξ. (2.44) ή την εξ.(2.48), ενώ το κομμάτι του ζευγαρώματος του RHB συναρτησοειδούς είναι

$$E_{\text{pair}}[\hat{\kappa}] = \frac{1}{4} \sum_{n_1 n'_1} \sum_{n_2 n'_2} \hat{\kappa}_{n_1 n'_1}^* \langle n_1 n'_1 | V^{pp} | n_2 n'_2 \rangle \hat{\kappa}_{n_2 n'_2}, \quad (2.53)$$

όπου $\langle n_1 n'_1 | V^{pp} | n_2 n'_2 \rangle$ είναι τα στοιχεία πίνακα της αλληλεπίδρασης ζευγαρώματος δύο-σωμάτων. Οι συντελεστές RHB των U και V προκύπτουν από την αρχή μεταβολών, η οποία καταλήγει στις RHB εξισώσεις:

$$\begin{pmatrix} \hat{h}_D - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Στην σχετικιστική περίπτωση το αυτο-συνεπές μέσο-πεδίο αντιστοιχεί στην μονοσωματιδιακή Χαμιλτονιανή Dirac \hat{h}_D των εξισώσεων (2.22) ή (2.30). Το χημικό

δυναμικό λ καθορίζεται από τη δευτερεύουσα προϋπόθεση: η αναμενόμενη τιμή του τελεστή που δίνει τον αριθμό σωματιδίων στη βασική κατάσταση να είναι ίση με τον αριθμό των νουκλεονίων. Το πεδίο ζευγαρώματος $\hat{\Delta}$ είναι

$$\hat{\Delta}_{n_1 n'_1} = \frac{1}{2} \sum_{n_2 n'_2} \langle n_1 n'_1 | V^{pp} | n_2 n'_2 \rangle \hat{\kappa}_{n_2 n'_2}. \quad (2.55)$$

Τα διανύσματα στήλες του προβλήματος ιδιοτιμών στην εξ. (2.54) υποδηλώνουν τις κυματοσυναρτήσεις των ημισωματιδίων, και E_k είναι οι ημισωματιδιακές ενέργειες. Η διάσταση της RHB εξίσωσης πινάκων είναι διπλάσια από την αντίστοιχη Dirac εξίσωση πινάκων. Με αποτέλεσμα, για κάθε ιδιοδιάνυσμα (U_k, V_k) με θετική ημισωματιδιακή ενέργεια $E_k > 0$, να υπάρχει ένα ιδιοδιάνυσμα (V_k^*, U_k^*) με αρνητική ημισωματιδιακή ενέργεια $-E_k$. Μιας και οι βαρυονικοί τελεστές των ημισωματιδίων ικανοποιούν τις μεταθετικές σχέσεις φερμιονίων, οι καταστάσεις E_k και $-E_k$ δεν μπορούν να είναι ταυτόχρονα κατειλημμένες, αυτό σημαίνει ότι πρέπει να επιλέξει κανείς είτε τη θετική ή την αρνητική ιδιοτιμή και το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα [17]. Στην Hartree-Fock περίπτωση, η επιλογή ανάμεσα στη θετική ή την αρνητική τιμή της ενέργειας των ημισωματιδίων σημαίνει ότι η κατάσταση είναι είτε κατειλημμένη ή κενή. Στη μη-σχετικιστική HFB περίπτωση η βασική κατάσταση αντιπροσωπεύει το ελάχιστο της ενεργειακής επιφάνειας και, για το σχηματισμό του κενού ως προς τα ημισωματίδια, διαλέγει κάποιος μόνο τις θετικές ενέργειες των ημισωματιδίων

$$\alpha_k |\Phi\rangle = 0 \quad \text{για} \quad E_k > 0 \quad \text{ή} \quad |\Phi\rangle = \prod_{E_k > 0} \alpha_k |-\rangle. \quad (2.56)$$

Όπως αναφέραμε η $|\Phi\rangle$ ορίζει το κενό ως προς τα ημισωματίδια, ενώ $|-\rangle$ είναι το κενό των κανονικών σωματιδίων. Η $|\Phi\rangle$ αντιστοιχεί στην πλήρωση των καταστάσεων με τη χαμηλότερη ενέργεια, αφού όλα τα ημισωματίδια είναι διεγέρσεις με θετική ενέργεια. Η μονοσωματιδιακή πυκνότητα και ο ταυνοστής ζευγαρώματος στις Εξ. (2.51) που αντιστοιχούν σε αυτήν την κατάσταση μπορούν να εκφραστούν με όρους των κυματοσυναρτήσεων των ημισωματιδίων:

$$\hat{\rho}_{nn'} = \sum_{E_k > 0} V_{nk}^* V_{n'k}, \quad \hat{\kappa}_{nn'} = \sum_{E_k > 0} V_{nk}^* U_{n'k}. \quad (2.57)$$

Στη σχετικιστική περίπτωση υπάρχουν οι λύσεις στη “θάλασσα” Dirac (συνήθως λέγονται λύσεις αρνητικής ενέργειας και δηλώνονται με τον δείκτη a), και οι λύσεις πάνω από την “θάλασσα” Dirac (συνήθως καλούνται λύσεις με θετική ενέργεια και δηλώνονται με τον δείκτη p). Στην εξίσωση Dirac χωρίς τις συσχετίσεις ζεύγους μπορούν να διαχωριστούν εύκολα από το πρόσημο των αντίστοιχων ιδιοτιμών. Για την περίπτωση των εξισώσεων (2.54) αυτό δεν ισχύει πλέον, εξαιτίας

όμως του μεγάλου ενεργειακού χάσματος ανάμεσα στη “θάλασσα” Dirac και στη “θάλασσα” Fermi (≈ 1200 MeV). Μπορεί κανείς εύκολα να ξεχωρίσει τις καταστάσεις που ανήκουν στη “θάλασσα” Dirac $|E_a| > 1200$ MeV, από αυτές που βρίσκονται πάνω από αυτήν (να σημειωθεί ότι για τη Χαμιλτονιάνη $\hat{h} - M$ η μηδενική ενέργεια σηματοδοτεί το συνεχές των θετικών ενεργειών ενώ το συνεχές στις αρνητικές ενέργειες σηματοδοτείται από την ποσότητα $-2M$). Η *no-sea προσέγγιση* σημαίνει ότι πρέπει να επιλέξουμε τις λύσεις με τις θετικές ενέργειες ημισωματιδίων $E_p > 0$ για τις καταστάσεις πάνω από τη “θάλασσα” Dirac, και τις λύσεις με αρνητική ημισωματιδιακή ενέργεια $E_a < 0$ για όλες τις καταστάσεις που ανήκουν στη “θάλασσα” Dirac. Συνεπώς, η βασική κατάσταση στην περίπτωση του RHB μετασχηματισμού δίνεται από [104]

$$|\Phi\rangle = \prod_{E_p > 0} \alpha_p \prod_{E_a < 0} \alpha_a |-\rangle. \quad (2.58)$$

Τέλος, έχουμε για αυτήν την κυματοσυνάρτηση τις ακόλουθες εκφράσεις για τη μονοσωματιδιακή πυκνότητα και τον τελεστή ζευγαρώματος:

$$\hat{\rho}_{nn'} = \sum_{E_p > 0} V_{np}^* V_{n'p} + \sum_{E_a < 0} V_{na}^* V_{n'a}, \quad (2.59\alpha')$$

$$\hat{\kappa}_{nn'} = \sum_{E_p > 0} V_{np}^* U_{n'p} + \sum_{E_a < 0} V_{na}^* U_{n'a}. \quad (2.59\beta')$$

Πρέπει να σημειώσουμε ότι οι συντελεστές V_{na} είναι αμελητέοι εξαιτίας του μεγάλου χάσματος ανάμεσα στις θετικές και τις αρνητικές λύσεις της εξίσωσης Dirac, οπότε, σε πολλές πρακτικές εφαρμογές ο δεύτερος όρος στις εξισώσεις (2.59α') και (2.59β') απαλείφεται. Στην περίπτωση αυτή όμως, ο τανυστής ζευγαρώματος $\hat{\kappa}$ είναι μόνο κατά προσέγγιση αντισυμμετρικός.

Οι συσχετίσεις ζεύγους στους πυρήνες περιορίζονται σε ένα ενεργειακό παράθυρο λίγων MeV γύρω από την επιφάνεια Fermi, και η κλίμακα στην οποία παίζουν ρόλο είναι καλά διαχωρισμένη από την κλίμακα ενεργειών σύνδεσης, που είναι ανάμεσα σε μερικές εκατοντάδες έως κάποιες χιλιάδες MeV. Δεν υπάρχουν εμπειρικές ενδείξεις για κάποιο σχετικιστικό φαινόμενο που να σχετίζεται με το πυρηνικό πεδίο ζευγαρώματος $\hat{\Delta}$ και έτσι ένα υβριδικό μοντέλο [101] με μία μη-σχετικιστική αλληλεπίδραση ζευγαρώματος μπορεί να σχηματιστεί. Για μία γενική αλληλεπίδραση δύο-σωμάτων, τα στοιχεία πίνακα του σχετικιστικού πεδίου ζευγαρώματος δίνονται από

$$\hat{\Delta}_{n_1 p_1, n'_1 p'_1} = \frac{1}{2} \sum_{n_2 p_2, n'_2 p'_2} \langle n_1 p_1, n'_1 p'_1 | V^{pp} | n_2 p_2, n'_2 p'_2 \rangle \hat{\kappa}_{n_2 p_2, n'_2 p'_2}. \quad (2.60)$$

Οι δείκτες $(p_1, p_2, p_3, p_4 \equiv f, g)$ αναφέρονται στις μεγάλες και μικρές συνιστώσες

των σπινώρων των ημισωματιδίων Dirac:

$$U_k = \begin{pmatrix} f_k^{(U)} \\ ig_k^{(U)} \end{pmatrix} \quad V_k = \begin{pmatrix} f_k^{(V)} \\ ig_k^{(V)} \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

Σε πρακτικές εφαρμογές του RHB μοντέλου μόνο οι μεγάλες συνιστώσες των σπινώρων U_k και V_k χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία του μη-σχετικιστικού τανυστή ζευγαρώματος \hat{k} στην εξ. (2.57). Το πεδίο ζευγαρώματος που προκύπτει δίνεται από

$$\hat{\Delta}_{n_1 f, n_1' f} = \frac{1}{2} \sum_{n_2 n_2'} \langle n_1 f, n_1' f | V^{pp} | n_2 f, n_2' f \rangle_a \hat{k}_{n_2 f, n_2' f}. \quad (2.62)$$

Οι υπόλοιπες συνιστώσες: $\hat{\Delta}_{fg}$, $\hat{\Delta}_{gf}$, και $\hat{\Delta}_{gg}$ μπορούν να διαγραφούν με ασφάλεια[103].

Οι RHB εξισώσεις RHB (2.54) επιλύονται κυρίως σε μία διακριτή βάση, είτε στη βάση αρμονικού ταλαντωτή[78, 104] είτε στη βάση ενός δυναμικού τύπου Saxon-Woods[105–107] ή στο χώρο των συντεταγμένων [108–110].

2.4.1 Διάφορες δυνάμεις ζευγαρώματος

Έχουν υπάρξει διάφοροι τύποι φαινομενικών δυνάμεων ζεύγους V^{pp} που έχουν χρησιμοποιηθεί στη βιβλιογραφία. Η seniority δύναμη του Kerman[111] με σταθερά στοιχεία G του πίνακα ζευγαρώματος, λαμβάνει υπόψιν μόνο τα ζεύγη Cooper που είναι συζευγμένα με στροφορμή $J = 0$. Για προβλήματα με συμμετρία χρονικής-αναστροφής, ο αντίστοιχος πίνακας ζευγαρώματος $\hat{\Delta}$ στην εξ.(2.62) είναι γινόμενο της μονάδας για αυτήν τη δύναμη και η RHB θεωρία είναι ισοδύναμη με τη θεωρία σχετικιστικού μέσου-πεδίου με την προσθήκη της προσέγγισης BCS. Η δύναμη αυτή χρησιμοποιείται ευρέως, έχει όμως αρκετούς περιορισμούς, για παράδειγμα δεν περιλαμβάνει συσχετίσεις ζευγών με μεγαλύτερες τιμές στροφορμής, η σκέδαση ανάμεσα σε ζεύγη διαφορετικών φλοιών είναι σταθερή, κάτι που δεν είναι αληθές για πραγματικές δυνάμεις ζεύγους, η σύζευξη με το συνεχές δεν γίνεται με τον κατάλληλο τρόπο[112], και η ικανότητα πρόβλεψής της είναι περιορισμένη. Παρόλα αυτά η συγκεκριμένη μέθοδος χρησιμοποιείται στην προσέγγιση σταθερού χάσματος στην οποία το πεδίο ζευγαρώματος $\hat{\Delta}$ είναι διαγώνιο και σταθερό, και η RHB είναι στην ουσία ισοδύναμη με την προσέγγιση BCS. Οι πάνω και κάτω συνιστώσες $U_k(\mathbf{r})$ και $V_k(\mathbf{r})$ είναι ταυτόσημες, με τα πλάτη πιθανότητας κατάληψης της θεωρίας BCS u_k και v_k που δίνονται από τις σχέσεις

$$\begin{pmatrix} u_k^2 \\ v_k^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right]. \quad (2.63)$$

Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται στους περισσότερους υπολογισμούς μεγάλης κλίμακας για την προσαρμογή των παραμέτρων των συναλλοίωτων συναρτησοειδών. Πιο συγκεκριμένα για τις δυνάμεις DD-ME2[50] και DD-PC1[51], για κάθε πυρήνα που χρησιμοποιήθηκε στη διαδικασία προσαρμογής, η παράμετρος του χάσματος καθορίζεται εμπειρικά, απευθείας από τις διαφορές μαζών των γειτονικών άρτιων-περιττών πυρήνων με βάση τη σχέση

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{2} [E(N+2) - E(N+1) - (E(N+1) - E(N))] \quad (2.64)$$

Σε αυτήν την περίπτωση οι αριθμοί πληρότητας v_k^2 στην περιοχή της επιφάνειας Fermi που εξαρτώνται σημαντικά από την παράμετρο του χάσματος έχουν αρκετά λογικές τιμές και με αυτόν τον τρόπο όλες οι ποσότητες που εξαρτώνται μόνο από τους αριθμούς v_k^2 δεν επηρεάζονται πλέον από την τιμή του G ούτε από το κατώφλι του ζευγαρώματος. Φυσικά, η ενέργεια ζευγαρώματος (2.53) εξαρτάται από τη σταθερά G και από το κατώφλι ζευγαρώματος. Η πραγματική τιμή της G που αναπαράγει το εκάστοτε πειραματικό χάσμα καθορίζεται μόνο μετά την αυτοσυνεπή επίλυση των εξισώσεων της BCS προσέγγισης και εξαρτάται από τον υπό εξέταση πυρήνα και το κατώφλι του ζευγαρώματος.

Από την άλλη, για μία λογική τιμή κατωφλίου η ενέργεια σύνδεσης που οφείλεται στις συσχετίσεις ζεύγους, και ισούται με τη διαφορά ανάμεσα στην επιπλέον σύνδεση λόγω του ζευγαρώματος και στη μείωση της σύνδεσης λόγω της ανακατάληψης των μονοσωματιδιακών καταστάσεων, είναι σχετικά μικρή, μόνο μερικά MeV. Συνεπώς υπάρχει ένας σαφής διαχωρισμός ανάμεσα στις κλίμακες, της συνολικής ενέργειας σύνδεσης, η οποία για βαρείς πυρήνες είναι της τάξης των 1000 MeV και πάνω και της παραπάνω σύνδεσης λόγω συσχετίσεων ζεύγους μερικών MeV. Με αυτή τη λογική η συνηθισμένη διαδικασία για την προσαρμογή των παραμέτρων της Λαγκραντζιανής στη προσέγγιση σταθερού χάσματος με υπολογισμούς τύπου RMF+BCS και η χρήση για κάθε άλλο υπολογισμό μιας πιο ρεαλιστικής δύναμης ζευγαρώματος είναι αρκετά επιτυχής. Με τον τρόπο αυτό, αποφεύγονται όλα τα προβλήματα που έχουν να κάνουν με τη χρήση της μονοπολικής δύναμης για τις συσχετίσεις ζεύγους.

Για λόγους απλούστευσης σε πολλούς υπολογισμούς της σχετικιστικής Hartree-Bogoliubov προσέγγισης[108], και συγκεκριμένα σε αυτές που αποτελούν τη βάση για μελέτες πέρα από το μέσο-πεδίο[66, 113] έχει επιλεγεί για δύναμη ζευγαρώματος μία δύναμη με μηδενική εμβέλεια.

Ωστόσο, αυτή η δύναμη παρουσιάζει παρόμοια προβλήματα με τη μονοπολική δύναμη με σταθερά G , δηλαδή το πρόβλημα της υπερϊώδους απόκλισης και απαιτεί την χρήση κατωφλίου ζευγαρώματος. Οι δυνάμεις με πεπερασμένη εμβέλεια δεν παρουσιάζουν τέτοια προβλήματα. Οπότε το τμήμα της μη-σχετικιστικής Gogny δύναμης D1S[114], που περιγράφει τις συσχετίσεις ζεύγους έχει χρησιμοποιηθεί με μεγάλη επιτυχία για αρκετούς υπολογισμούς της RHB. Χαρακτηρι-

στικά παραδείγματα είναι η μελέτη ιδιοτήτων της πυρηνικής βασικής κατάστασης[101], η μελέτη των περιστροφικών ζωνών σε περιστρεφόμενα συστήματα αναφοράς[115], και η διερεύνηση των γιγαντιαίων συντονισμών στο πλαίσιο της σχετικιστικής ημισωματιδιακής τυχαίας φάσης προσέγγισης (relativistic quasiparticle random phase approximation (RQRPA))[70].

Στο επίπεδο του μέσου-πεδίου τέτοιου είδους υπολογισμοί είναι δυνατοί, απαιτούν όμως, τεράστια υπολογιστική προσπάθεια. Συνεπώς ο Tian κ.α. έχουν εισάγει μία διαχωρίσιμη εκδοχή της δύναμης ζευγαρώματος τύπου Gogny[116–118]. Η δύναμη αυτή είναι διαχωρίσιμη στον χώρο των ορμών, και καθορίζεται εντελώς από δύο παραμέτρους οι οποίες προσαρμόζονται έτσι ώστε να αναπαράγουν το χάσμα ζευγαρώματος της δύναμης Gogny στη συμμετρική πυρηνική ύλη. Η εξίσωση του χάσματος στο κανάλι 1S_0 είναι

$$\Delta(k) = - \int_0^\infty \frac{k'^2 dk'}{2\pi^2} \langle k|V^{1S_0}|k'\rangle \frac{\Delta(k')}{2E(k')}, \quad (2.65)$$

και η πυρηνική δύναμη διαχωρίζεται στο χώρο ορμής ως εξής

$$\langle k|V^{1S_0}|k'\rangle = -Gp(k)p(k'). \quad (2.66)$$

Υποθέτοντας την απλή γκαουσιανή μορφή $p(k) = e^{-a^2k^2}$, οι δύο παράμετροι G και a προσαρμόζονται για να αναπαράγουν την εξάρτηση από την πυκνότητα του χάσματος ζευγαρώματος στην επιφάνεια Fermi, όπως υπολογίζεται από τη δύναμη Gogny. Για την ομάδα παραμέτρων D1S[114] προκύπτουν οι τιμές: $G = 728 \text{ MeVfm}^3$ και $a = 0.644 \text{ fm}$. Η εξίσωση 2.66 μπορεί να μετασχηματιστεί από το χώρο ορμής στο χώρο συντεταγμένων, όπου έχει τη μορφή:

$$V^{pp}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = -G\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')P(\mathbf{r})P(\mathbf{r}'), \quad (2.67)$$

όπου $\mathbf{R} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ και $\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ είναι η συντεταγμένη του κέντρου μάζας και η σχετική συντεταγμένη αντίστοιχα, και $P(\mathbf{r})$ είναι ο μετασχηματισμός Fourier του $p(k)$

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{(4\pi a^2)^{3/2}} e^{-\mathbf{r}^2/2a^2}. \quad (2.68)$$

Η συγκεκριμένη δύναμη ζευγαρώματος έχει πεπερασμένη εμβέλεια και εξαιτίας του παράγοντα $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ παραμένει αναλλοίωτη κάτω από μετασχηματισμούς μεταφοράς στο χώρο. Παρότι ο όρος $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ συνεπάγεται ότι στο χώρο των συντεταγμένων αυτή η δύναμη δεν είναι απολύτως διαχωρίσιμη, αποδεικνύεται ότι τα αντισυμμετρικά pp στοιχεία πίνακα

$$\langle n_1 n_2 | V^{pp} | n'_1 n'_2 \rangle_a = \langle n_1 n_2 | V^{pp} | n'_1 n'_2 \rangle - \langle n_1 n_2 | V^{pp} | n'_2 n'_1 \rangle \quad (2.69)$$

μπορούν να αναπαρασταθούν ως ένα άθροισμα ενός πεπερασμένου αριθμού διαχωρίσιμων όρων στη βάση αρμονικού ταλαντωτή

$$\langle n_1 n_2 | V^{pp} | n'_1 n'_2 \rangle_a = G \sum_N^{N_{\max}} W_{n_1 n_2}^{N*} W_{n'_1 n'_2}^N. \quad (2.70)$$

Σε αυτήν την περίπτωση το πεδίο του ζευγαρώματος $\hat{\Delta}$ λαμβάνει τη μορφή

$$\hat{\Delta}_{n_1 n_2} = G \sum_N^{N_{\max}} P_N W_{n_1 n_2}^{N*} \quad \text{με} \quad P_N = \frac{1}{2} \text{Tr}(W^N \hat{\kappa}) \quad (2.71)$$

και η ενέργεια ζευγαρώματος στην βασική πυρηνική κατάσταση δίνεται από:

$$E_{\text{pair}} = -G \sum_N^{N_{\max}} P_N^* P_N. \quad (2.72)$$

2.5 Εφαρμογή σε πεπερασμένους πυρήνες

Σε αυτό το κεφάλαιο περιγράφουμε τη εφαρμογή της συναλλοίωτης θεωρίας συναρτησοειδών πυκνότητας-covariant density functional theory (CDFT)- για την περιγραφή των ιδιοτήτων της βασικής κατάστασης πεπερασμένων πυρήνων. Στην CDFT, το σχετικιστικό (συναλλοίωτο) ενεργειακό συναρτησοειδές πυκνότητας δημιουργείται ως ένα συναρτησοειδές του ταυστή της μονοσωματιδιακής πυκνότητας των νουκλεονίων που αντιστοιχεί σε ένα γινόμενο των μονο-σωματιδιακών ή μονο-ημισωματιδιακών καταστάσεων.

Εφόσον οι συμμετρίες απλοποιούν σημαντικά του υπολογισμούς, στις πρακτικές εφαρμογές, οι εξισώσεις κίνησης επιλύονται συνήθως υιοθετώντας αυτές τις συμμετρίες. Στη συνέχεια, θα αναφερθούμε κυρίως στη λύση της CDFT για άρτιους-άρτιους πυρήνες με σφαιρική συμμετρία και αξονική συμμετρία με τετραπολική παραμόρφωση από το σφαιρικό σχήμα. Επιπρόσθετα τα αποτελέσματα των συλλογικών πυρηνικών ιδιοτήτων όπως οι πυρηνικές μάζες και οι ακτίνες πυρηνικού φορτίου θα συζητηθούν.

Για πυρήνες με σφαιρική συμμετρία, οι σχετικιστικές εξισώσεις κίνησης στο χώρο των συντεταγμένων καταλήγουν σε ένα απλό σύνολο από ακτινικές ολοκληροδιαφορικές εξισώσεις [108–110]. Για παραμορφωμένους πυρήνες, από την άλλη, η επίλυση των ολοκληρο-διαφορικών εξισώσεων στο χώρο των συντεταγμένων είναι αριθμητικά χρονοβόρα. Μία αποτελεσματική εφαρμογή της θεωρίας σ' αυτήν την περίπτωση είναι η επίλυση των σχετικιστικών εξισώσεων κίνησης στο χώρο μορφής (configuration space) που ορίζεται από τις κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή με την εισαγωγή της κατάλληλης συμμετρίας, ενώ οι πυκνότητες

υπολογίζονται στο χώρο των συντεταγμένων. Η μέθοδος αυτή μπορεί να εφαρμοστεί τόσο σε σφαιρικούς πυρήνες όσο και σε πυρήνες με αξονική συμμετρία ή και καθόλου συμμετρία, και οι αντίστοιχοι αριθμητικοί κώδικες είναι διαθέσιμοι. [104, 119].

Όμως, πρέπει να σημειώσουμε ότι για πυρήνες πολύ μακριά από τη γραμμή της β -σταθερότητας, δηλαδή τους λεγόμενους εξωτικούς πυρήνες, η χρήση της βάσης του αρμονικού ταλαντωτή δεν παρέχει επαρκή ασυμπτωτική συμπεριφορά στις μεγάλες αποστάσεις για τις κυματοσυναρτήσεις που δεν είναι ισχυρά δέσμιες ή ανήκουν στο συνεχές. Οι λεπτομέρειες θα συζητηθούν στο κεφάλαιο 3.2

Για τη σχετικιστική Hartree-Bogoliubov (RHB) εξίσωση (2.54),

$$\begin{pmatrix} \hat{h}_D - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} \quad (2.73)$$

με τη Χαμιλτονιανή Dirac

$$\hat{h}_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta(M + S) + V^0 \quad (2.74)$$

Το αντίστοιχο πρόβλημα ιδιοτιμών στον χώρο μορφής γίνεται

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} - \lambda & \mathcal{B} & \Delta_{ff} & 0 \\ \mathcal{B}^T & \mathcal{C} - \lambda & 0 & 0 \\ -\Delta_{ff} & 0 & -\mathcal{A} + \lambda & -\mathcal{B} \\ 0 & 0 & -\mathcal{B}^T & -\mathcal{C} + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f^U \\ g^U \\ f^V \\ g^V \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f^U \\ g^U \\ f^V \\ g^V \end{pmatrix}. \quad (2.75)$$

Η διαγωνοποίηση του RHB πίνακα εξισώσεων μας δίνει τις κυματοσυναρτήσεις στον configuration χώρο. Ο πίνακας πυκνότητας που δημιουργείται σαν συνέπεια της διαγωνοποίησης υπολογίζεται στον configuration space

$$\begin{pmatrix} \rho_{nn'} & \rho_{n\tilde{n}'} \\ \rho_{\tilde{n}n'} & \rho_{\tilde{n}\tilde{n}'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum f_n^{V*} f_{n'}^V & i \sum f_n^{V*} g_{\tilde{n}'}^V \\ -i \sum g_{\tilde{n}}^{V*} f_{n'}^V & \sum g_{\tilde{n}}^{V*} g_{\tilde{n}'}^V \end{pmatrix}, \quad (2.76)$$

όπου n και \tilde{n} είναι οι αντίστοιχοι δείκτες του αναπτύγματος της μεγάλης και μικρής συνιστώσας του Dirac σπίνора στη βάση του ταλαντωτή. Ακολουθεί ο μετασχηματισμός του πίνακα της πυκνότητας στον χώρο των συντεταγμένων, και οι επακόλουθες διανυσματικές και βαθμωτές πυκνότητες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των δυναμικών.

Η απεικόνιση της ενεργειακής επιφάνειας σε συνάρτηση με τις παραμέτρους τις τετραπολικής παραμόρφωσης του πυρηνικού σχήματος, μπορεί να πραγματοποιηθεί με την επίλυση των RHB εξισώσεων υπό συγκεκριμένο περιορισμό για την αναμενόμενη τιμή της συλλογικής τετραπολικής ροπής για ένα δεδομένο πυρήνα. Η μέθοδος που θα εφαρμόσουμε στην παρούσα διατριβή είναι αυτή του τετραγωνικού περιορισμού που χρησιμοποιεί μία ελεύθερη μεταβολή της συνάρτησης

$$\langle \hat{H} \rangle + \sum_{\mu=0,2} C_{2\mu} (\langle \hat{Q}_{2\mu} \rangle - q_{2\mu})^2, \quad (2.77)$$

όπου $\langle \hat{H} \rangle$ είναι η συνολική ενέργεια και $\hat{Q}_{2\mu}$ είναι η αναμενόμενη τιμή του συλλογικού τετραπολικού τελεστή

$$\hat{Q}_{20} = 2z^2 - x^2 - y^2 \quad \text{και} \quad \hat{Q}_{22} = x^2 - y^2. \quad (2.78)$$

$q_{2\mu}$ είναι η συγκεκριμένη τιμή του περιορισμού της τετραπολικής ροπής και $C_{2\mu}$ είναι η αντίστοιχη σταθερά ελαστικότητας-ακαμψίας.

Για πυρήνες κοντά στη γραμμή της β -σταθερότητας, η προσέγγιση του μοντέλου BCS, είναι γενικώς πιο απλή από την επίλυση της εξίσωσης RHB, με τους αντίστοιχους ημισωματιδιακούς τελεστές να ορίζονται από έναν ειδικό μετασχηματισμό Bogoliubov (βλ. Κεφ.2.4). Στη μέθοδο BCS, το μέρος του μέσου-πεδίου και το μέρος του ζευγαρώματος δεν διαγωνοποιούνται απαραίτητα ταυτόχρονα, και έτσι η διάσταση του αντίστοιχου Χαμιλτονιανού πίνακα μειώνεται στο μισό.

2.5.1 Σφαιρικοί πυρήνες

Οι περισσότεροι πυρήνες που είναι μονά ή διπλά μαγικοί είναι σφαιρικοί. Συνεπώς, χρησιμοποιούμε σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, ϕ) , και οι πυκνότητες των νουκλεονίων εξαρτώνται μόνο από την ακτινική συντεταγμένη r . Ο σπινόρας ενός νουκλεονίου χαρακτηρίζεται από την πυρηνική στροφορμή j , την προβολή της m στον άξονα z , την ομοτιμία π , και την προβολή του ισοσπίν $t = \pm 1/2$ για πρωτόνια και νετρόνια αντίστοιχα

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, s, t) = \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}}(r) \Phi_{l_{\mathbf{k}} j_{\mathbf{k}} m_{\mathbf{k}}}(\theta, \phi, s) \\ i g_{\mathbf{k}}(r) \Phi_{\tilde{l}_{\mathbf{k}} j_{\mathbf{k}} m_{\mathbf{k}}}(\theta, \phi, s) \end{pmatrix} \chi_{t_{\mathbf{k}}}(t). \quad (2.79)$$

Εδώ, $\Phi_{l_{jm}}$ είναι ένας σπινόρας δύο διαστάσεων με τους κβαντικούς αριθμούς της στροφορμής l_{jm}

$$\Phi_{l_{jm}}(\theta, \phi, s) = [\chi_{\frac{1}{2}}(s) \otimes Y_l(\theta, \phi)]_{jm}. \quad (2.80)$$

Η τροχιακή στροφορμή που αντιστοιχεί στις μεγάλες (l) και μικρές (\tilde{l}) συνιστώσες του σπινόρα καθορίζεται από την ολική στροφορμή j και την ομοτιμία π μέσα από τις σχέσεις

$$l = j \pm \frac{1}{2}, \quad \tilde{l} = j \mp \frac{1}{2}, \quad \pi = (-)^l, \quad \kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right). \quad (2.81)$$

Η αντίστοιχη ακτινική εξίσωση Dirac γίνεται

$$\begin{pmatrix} M + S(r) + V(r) & \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa-1}{r} \\ -\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa+1}{r} & -M - S(r) + V(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_k \\ g_k \end{pmatrix} = \epsilon_k \begin{pmatrix} f_k \\ g_k \end{pmatrix}. \quad (2.82)$$

Το βαθμωτό δυναμικό $S(r)$ και το διανυσματικό δυναμικό $V(r)$ εξαρτώνται από τις βαθμωτές και διανυσματικές πυκνότητες.

Οι μεγάλες και μικρές συνιστώσες των Dirac σπινόρων μπορούν να αναπτυχθούν σε όρους των ακτινικών συναρτήσεων $R_{nl}(r, b_0)$ ενός δυναμικού σφαιρικού αρμονικού ταλαντωτή όπου b_0 είναι το αντίστοιχο μήκος ταλάντωσης

$$f_k(r) = \sum_n^{n_{\max}} f_n^{(i)} R_{nl_k}(r, b_0), \quad g_k(r) = \sum_{\tilde{n}}^{\tilde{n}_{\max}} g_{\tilde{n}}^{(i)} R_{\tilde{n}\tilde{l}_k}(r, b_0). \quad (2.83)$$

Οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις δίνονται από τη σχέση

$$R_{nl}(r, b_0) = b_0^{-3/2} R_{nl}(\xi) = b_0^{-3/2} N_{nl} \xi^l L_n^{l+1/2}(\xi^2) e^{-\xi^2/2}, \quad (2.84)$$

όπου $\xi = r/b_0$ αντιστοιχεί στην ακτινική απόσταση σε μονάδες μήκους ταλάντωσης. Ο κβαντικός αριθμός $n = 0, 1, 2, \dots$ μετράει τον αριθμό των ακτινικών κόμβων, και το $L_n^m(\xi^2)$ αντιστοιχεί στα συναφή πολυώνυμα Laguerre-(associated Laguerre polynomials). Ο παράγοντας κανονικοποίησης είναι

$$N_{nl} = \sqrt{\frac{2n!}{(l+n+1/2)!}}. \quad (2.85)$$

Τα άνω όρια n_{\max} και \tilde{n}_{\max} καθορίζονται από τον αντίστοιχο αριθμό των κβαντικών αριθμών των κύριων φλοιών $N_{\max} = 2n_{\max} + l_{\max}$ και $\tilde{N}_{\max} = 2\tilde{n}_{\max} + \tilde{l}_{\max}$. Για να αποφύγουμε τη συνεισφορά ψευδών-**spurious** λύσεων στην επίλυση της εξίσωσης Dirac [78], οι μικρές συνιστώσες αναπτύσσονται έως το $\tilde{N}_{\max} = N_{\max} + 1$.

Εάν χρησιμοποιήσουμε τα $|\alpha\rangle = |nljm\rangle$ για το ανάπτυγμα των ανωτέρω, και τα $|\tilde{\alpha}\rangle = |\tilde{n}\tilde{l}jm\rangle$ για το ανάπτυγμα των χαμηλότερων συνιστωσών του Dirac σπινόρα, τότε τα στοιχεία πίνακα της Χαμιλτονιανής Dirac στην Εξ.(2.75) για την

περίπτωση της σφαιρικής συμμετρίας δίνονται από τις σχέσεις

$$\mathcal{A}_{\alpha\alpha'} = \int_0^\infty r^2 dr R_{nl}(r) [M + S(r) + V(r)] R_{n'l}(r), \quad (2.86)$$

$$\mathcal{C}_{\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}'} = \int_0^\infty r^2 dr R_{\tilde{n}\tilde{l}}(r) [-M - S(r) + V(r)] R_{\tilde{n}'\tilde{l}'}(r), \quad (2.87)$$

$$\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\alpha}'} = \int_0^\infty r^2 dr R_{nl}(r) \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa - 1}{r} \right) R_{\tilde{n}'\tilde{l}'}(r). \quad (2.88)$$

Το δυναμικό των πρωτονίων συμπεριλαμβάνει και το πεδίο Coulomb,

$$V_C(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.89)$$

Ωστόσο, το ολοκλήρωμα έχει μία λογαριθμική ανωμαλία, η οποία κάνει τον αριθμητικό υπολογισμό δύσκολο. Με τη χρήση της ταυτότητας,

$$\Delta_{\mathbf{r}'} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.90)$$

το δυναμικό Coulomb μπορεί να γραφτεί διαφορετικά ως,

$$V_C(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{8\pi} \int d^3\mathbf{r}' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \Delta_{\mathbf{r}'} \rho_p(\mathbf{r}'). \quad (2.91)$$

Μετά την αναλυτική ολοκλήρωση του γωνιακού μέρους, το υπολειπόμενο ακτινικό μέρος γίνεται

$$V_C(r) = \frac{e^2}{4} \int_0^\infty dr' r'^2 \left(3r + \frac{r'^2}{r} \right) \frac{d^2 \rho_p(r')}{dr'^2}. \quad (2.92)$$

Για τα μοντέλα με ανταλλαγή μεσονίων, πρέπει επίσης να επιλυθούν και οι εξισώσεις Klein-Gordon για τα διαφορετικά μεσόνια. Για σφαιρική συμμετρία, οι εξισώσεις Klein-Gordon των πεδίων των μεσονίων $\phi = \sigma, \omega, \rho$ γίνονται

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + m_\phi^2 \right) \phi(r) = S_\phi(r). \quad (2.93)$$

Η λύση αυτής της εξίσωσης μπορεί να αναπτυχθεί στα ιδιοδιανύσματα μιας ολοκληρωμένης ορθοκανονικής βάσης

$$\phi(r) = \sum_{n=0}^{n_b} \phi_n R_{n0}(r, b_0), \quad S_\phi(r) = \sum_{n=0}^{n_b} s_n^\phi R_{n0}(r, b_0). \quad (2.94)$$

Το μέγιστο του ακτινικού κβαντικού αριθμού n_b στο ανάπτυγμα καθορίζεται από μία παράμετρο κατωφλίου $N_B = 2n_b$. Οπότε, η εξίσωση Klein–Gordon μπορεί να γραφτεί ως ένα σύστημα μη-ομογενών γραμμικών εξισώσεων,

$$\sum_{n'}^{n_b} \mathcal{H}_{nn'} \phi_{n'} = s_n^\phi \quad (2.95)$$

με στοιχεία πίνακα

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{nn'} = & -b_0^{-2} \delta_{nn'} (2n + 3/2) + b_0^{-2} \delta_{nn'+1} \sqrt{(n+1)(n+3/2)} \\ & + b_0^{-2} \delta_{n'n+1} \sqrt{(n'+1)(n'+3/2)}. \end{aligned} \quad (2.96)$$

Αντιστρέφοντας τον πίνακα \mathcal{H} , το σύστημα αυτών των εξισώσεων μπορεί να λυθεί εύκολα.

Τα στοιχεία του πίνακα ζευγαρώματος είναι αντισυμμετρικά και μπορούν να υπολογιστούν παρομοίως ανάλογα με τη συγκεκριμένη αλληλεπίδραση ζεύγους. Να σημειωθεί ότι οι ιδιότητες του ζευγαρώματος καθορίζονται από τις συσχετίσεις εντός ενός ενεργειακού παραθύρου μερικών MeV γύρω από την επιφάνεια Fermi, και συνεπώς τα στοιχεία πίνακα που σχετίζονται με τις μικρές συνιστώσες μπορούν να αγνοηθούν με ασφάλεια.

2.5.2 Αξονικά παραμορφωμένοι πυρήνες

Οι περισσότεροι πυρήνες του πίνακα νουκλιδίων είναι παραμορφωμένοι, και όπως έχει αποδειχτεί η πιο συνηθισμένη παραμόρφωση είναι η τετραπολική παραμόρφωση. Στην περίπτωση της τετραπολικής παραμόρφωσης με αξονική συμμετρία, η ομοτιμία και η τρίτη συνιστώσα j_z της ολικής στροφορμής διατηρούνται και ορίζουν τους κβαντικούς αριθμούς π_k και K_k που χαρακτηρίζουν τον σπινόρα των νουκλεονίων Dirac

$$\psi_k(\mathbf{r}, s, t) = \begin{pmatrix} f_k^+(r_\perp, z) e^{i\Lambda - \phi} \\ f_k^-(r_\perp, z) e^{i\Lambda + \phi} \\ i g_k^+(r_\perp, z) e^{i\Lambda - \phi} \\ i g_k^-(r_\perp, z) e^{i\Lambda + \phi} \end{pmatrix} \chi_{t_k}(t), \quad (2.97)$$

όπου $\Lambda_\pm = K_k \pm 1/2$, και (r_\perp, z, ϕ) είναι οι καθιερωμένες κυλινδρικές συντεταγμένες. Είναι βολικό να αναπτύξουμε τη κυματοσυνάρτηση των νουκλεονίων σε μια βάση που σχηματίζεται από τις ιδιοσυναρτήσεις μιας μονοσωματιδιακής Χαμιλτονιανής του αξονικά παραμορφωμένου αρμονικού ταλαντωτή [78, 104]

$$V_{\text{osc}}(z, r_\perp) = \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2} m \omega_\perp^2 r_\perp^2. \quad (2.98)$$

Επιβάλλοντας τη διατήρηση του όγκου, οι δύο συχνότητες ταλάντωσης $\hbar\omega_{\perp}$ και $\hbar\omega_z$ μπορούν να εκφραστούν με όρους μιας παραμέτρου παραμόρφωσης β_0

$$\hbar\omega_z = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_0}, \quad \hbar\omega_{\perp} = \hbar\omega_0 e^{\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_0}. \quad (2.99)$$

Οι αντίστοιχες παράμετροι των μηκών ταλάντωσης είναι

$$b_z = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}}, \quad b_{\perp} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}}}, \quad (2.100)$$

και $b_{\perp}^2 b_z = b_0^3$ εξαιτίας της διατήρησης του όγκου. Η βάση καθορίζεται τώρα από δύο σταθερές $\hbar\omega_0$ και β_0 . Οι ιδιοσυναρτήσεις του δυναμικού του παραμορφωμένου αρμονικού ταλαντωτή χαρακτηρίζονται από τέσσερις κβαντικούς αριθμούς

$$|\alpha\rangle = |n_z n_r \Lambda m_s\rangle, \quad (2.101)$$

όπου n_z και n_r είναι ο αριθμός των κόμβων στις z - και r_{\perp} -κατευθύνσεις, αντιστοίχως. Λ και m_s είναι οι συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής και του σπιν στον εσωτερικό z -άξονα, αντιστοίχως. Η ιδιοτιμή της j_z που είναι η προβολή στον άξονα z της ολικής μονοσωματιδιακής στροφορμής και η ομοτιμία καθορίζονται από

$$K = \Lambda + m_s, \quad \pi = (-1)^{n_z + \Lambda}. \quad (2.102)$$

Εισάγοντας δύο αδιάστατες παραμέτρους $\xi = z/b_z$ και $\eta = r_{\perp}^2/b_{\perp}^2$, οι ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή γίνονται

$$\Phi_{\alpha}(\mathbf{r}, s) = \varphi_{n_z}(z, b_z) \varphi_{n_r}^{\Lambda}(r_{\perp}, b_{\perp}) \frac{e^{i\Lambda\phi}}{\sqrt{2\pi}} \chi_{m_s}(s) \quad (2.103)$$

με

$$\varphi_{n_z}(z, b_z) = \frac{N_{n_z}}{\sqrt{b_z}} H_{n_z}(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (2.104)$$

$$\varphi_{n_r}^{\Lambda}(r_{\perp}, b_{\perp}) = \frac{N_{n_r}^{\Lambda}}{b_{\perp}} \sqrt{2\eta}^{|\Lambda|/2} L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta) e^{-\eta/2}, \quad (2.105)$$

όπου $H_{n_z}(\xi)$ και $L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta)$ είναι τα πολυώνυμα Hermite και τα συναφή πολυώνυμα Laguerre. Οι παράγοντες κανονικοποίησης είναι

$$N_{n_z} = \frac{1}{\sqrt{(\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!)}}, \quad N_{n_r}^{\Lambda} = \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + |\Lambda|)!}}. \quad (2.106)$$

Οι μεγάλες και μικρές συνιστώσες των Dirac σπινόρων αναλύονται ανεξάρτητα σε όρους ιδιοσυναρτήσεων του αρμονικού ταλαντωτή

$$f_k(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_k^+(r_\perp, z) e^{i\Lambda - \phi} \\ f_k^-(r_\perp, z) e^{i\Lambda + \phi} \end{pmatrix} = \sum_{\alpha}^{\alpha_{max}} f_{\alpha}^{(i)} \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}, s) \chi_{t_k}(t), \quad (2.107)$$

$$g_k(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} g_k^+(r_\perp, z) e^{i\Lambda - \phi} \\ g_k^-(r_\perp, z) e^{i\Lambda + \phi} \end{pmatrix} = \sum_{\tilde{\alpha}}^{\tilde{\alpha}_{max}} g_{\tilde{\alpha}}^{(i)} \Phi_{\tilde{\alpha}}(\mathbf{r}, s) \chi_{t_k}(t), \quad (2.108)$$

Για να αποφύγουμε την εμφάνιση των spurious καταστάσεων, οι κβαντικοί αριθμοί α_{max} και $\tilde{\alpha}_{max}$ επιλέγονται με τέτοιο τρόπο ώστε οι αντίστοιχοι κύριοι κβαντικοί αριθμοί $N = 2n_r + |\Lambda| + n_z$ να μην είναι μεγαλύτεροι των N_{max} και $N_{max} + 1$ για τις μεγάλες και μικρές συνιστώσες, αντίστοιχως.

Με τη μέθοδο του αναπτύγματος των εξισώσεων (2.107) και (2.108), τα στοιχειά πίνακα της Χαμιλτονιανής Dirac δίνονται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} &= \delta_{\Lambda\Lambda'} \delta_{m_s m'_s} \int_{-\infty}^{\infty} dz \varphi_{n_z}(z) \varphi_{n'_z}(z) \int_0^{\infty} dr_\perp r_\perp \varphi_{n_r}^\Lambda(r_\perp) \varphi_{n'_r}^\Lambda(r_\perp) \\ &\quad \times [M + S(r_\perp, z) + V(r_\perp, z)], \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}'} &= \delta_{\tilde{\Lambda}\tilde{\Lambda}'} \delta_{\tilde{m}_s \tilde{m}'_s} \int_{-\infty}^{\infty} dz \varphi_{\tilde{n}_z}(z) \varphi_{\tilde{n}'_z}(z) \int_0^{\infty} dr_\perp r_\perp \varphi_{\tilde{n}_r}^{\tilde{\Lambda}}(r_\perp) \varphi_{\tilde{n}'_r}^{\tilde{\Lambda}}(r_\perp) \\ &\quad \times [-M - S(r_\perp, z) + V(r_\perp, z)], \end{aligned} \quad (2.110)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\alpha\tilde{\alpha}} &= \delta_{\Lambda\tilde{\Lambda}} \delta_{m_s \tilde{m}_s} \delta_{n_r \tilde{n}_r} (-1)^{1/2 - m_s} \frac{1}{b_z} \left(\delta_{n_z \tilde{n}_z - 1} \sqrt{\frac{\tilde{n}_z}{2}} - \delta_{n_z \tilde{n}_z + 1} \sqrt{\frac{n_z}{2}} \right) \\ &\quad + \delta_{m_s \tilde{m}_s - 1} \delta_{n_z \tilde{n}_z} \\ &\quad \times \int_0^{\infty} dr_\perp r_\perp \varphi_{n_r}^\Lambda(r_\perp) \partial_{r_\perp} \varphi_{\tilde{n}_r}^{\tilde{\Lambda}}(r_\perp) - \tilde{\Lambda} \int_0^{\infty} \varphi_{n_r}^\Lambda(r_\perp) \varphi_{\tilde{n}_r}^{\tilde{\Lambda}}(r_\perp) \\ &\quad + \delta_{m_s \tilde{m}_s + 1} \delta_{n_z \tilde{n}_z} \\ &\quad \times \int_0^{\infty} dr_\perp r_\perp \varphi_{n_r}^\Lambda(r_\perp) \partial_{r_\perp} \varphi_{\tilde{n}_r}^{\tilde{\Lambda}}(r_\perp) + \tilde{\Lambda} \int_0^{\infty} \varphi_{n_r}^\Lambda(r_\perp) \varphi_{\tilde{n}_r}^{\tilde{\Lambda}}(r_\perp) \end{aligned} \quad (2.111)$$

Ομοίως με την σφαιρική περίπτωση, το δυναμικό Coulomb δίνεται από

$$V_C(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{8\pi} \int d^3 \mathbf{r}' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \Delta_{r'} \rho_p(\mathbf{r}'). \quad (2.112)$$

Μετά την ολοκλήρωση στην γωνία του αζιμούθιου ϕ , καταλήγει κανείς στην ακόλουθη έκφραση

$$V_C(r_\perp, z) = \frac{e^2}{2\pi} \int_0^{\infty} dr'_\perp r'_\perp \int_{-\infty}^{\infty} dz' d(r_\perp, z) E \left(\frac{4r_\perp r'_\perp}{d(r_\perp, z)} \right) \Delta \rho_p(r'_\perp, z') \quad (2.113)$$

με $d(r_{\perp}, z) = \sqrt{(z - z')^2 + (r_{\perp} + r'_{\perp})^2}$. Το πλήρες ελλειπτικό ολοκλήρωμα δευτέρου είδους υπολογίζεται προσεγγιστικά από την καθιερωμένη πολυωνυμική εξίσωση[120].

Για μοντέλα με ανταλλαγή μεσονίων, πρέπει επίσης να λύσουμε τις εξισώσεις Klein-Gordon για τα διάφορα μεσόνια. Στην περίπτωση της αξονικής συμμετρίας, οι εξισώσεις Klein-Gordon για τα μεσόνια $\phi = \sigma, \omega, \rho$ έχουν τη μορφή

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r_{\perp}^2} - \frac{1}{r_{\perp}} \frac{\partial}{\partial r_{\perp}} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + m_{\phi}^2 \right) \phi(r_{\perp}, z) = S_{\phi}(r_{\perp}, z). \quad (2.114)$$

Η λύση αυτής της εξίσωσης μπορεί να αναπτυχθεί σε όρους καταστάσεων μιας ολοκληρωμένης βάσης

$$\phi(r_{\perp}, z) = \sum_{n_z n_r}^{n_b} \phi_{n_z n_r} \varphi_{n_z}(z, b_z) \varphi_{n_r}^0(r_{\perp}, b_{\perp}). \quad (2.115)$$

Για λόγους ευκολίας χρησιμοποιούμε την ίδια παράμετρο παραμόρφωσης β_0 και την ίδια συχνότητα ταλάντωσης $\hbar\omega_0$ με αυτήν των κυματοσυναρτήσεων των νουκλεονίων. Εισάγοντας το ανάπτυγμα στις εξισώσεις Klein-Gordon αυτές μπορούν να ξαναγραφτούν σαν ένα σύστημα ανομοιογενών γραμμικών εξισώσεων,

$$\sum_{n'_z n'_r}^{n_b} \mathcal{H}_{n_z n_r n'_z n'_r} \phi_{n'_z n'_r} = S_{n_z n_r}^{\phi} \quad (2.116)$$

με τα στοιχεία πίνακα

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{n_z n_r n'_z n'_r} &= \delta_{n_r n'_r} \delta_{n_z n'_z} \left[b_z^{-2} (n_z + 1/2) + b_{\perp}^{-2} (2n_r + 1/2) + m_{\phi}^2 \right] \\ &\quad - \delta_{n_r n'_r} \frac{1}{2} b_z^{-2} \left(\sqrt{(n_z + 1)n'_z} \delta_{n_z n'_z - 2} + \sqrt{n_z (n'_z + 1)} \delta_{n_z n'_z + 2} \right) \\ &\quad + \delta_{n_z n'_z} b_{\perp}^{-2} (n'_r \delta_{n_r n'_r - 1} + n_r \delta_{n_r n'_r + 1}). \end{aligned} \quad (2.117)$$

Όπως και στην αντίστοιχη περίπτωση των σφαιρικών πυρήνων, το σύστημα αυτών των εξισώσεων μπορεί εύκολα να λυθεί, αντιστρέφοντας τον πίνακα \mathcal{H} .

Κεφάλαιο 3

Επεκτάσεις της θεωρίας

3.1 Τανυστικές δυνάμεις

Το αρχικό θεωρητικό μοντέλο που έχουμε περιγράψει μέχρι στιγμής είναι αρκετά επιτυχημένο στην περιγραφή ενός μεγάλου εύρους συλλογικών ιδιοτήτων όπως οι ενέργειες σύνδεσης, πυρηνικές ακτίνες, παράμετροι παραμόρφωσης κ.α.[70] Ωστόσο στις περισσότερες εφαρμογές σε πυρηνικά συστήματα της συναλλοιώτης θεωρίας συναρτησοειδών πυκνότητας, η προσέγγιση του μέσου-πεδίου γίνεται στο επίπεδο Hartree απ' όπου απουσιάζει το κομμάτι Fock της προσέγγισης. Σε αυτήν την προσέγγιση τα νουκλεόνια και τα μεσόνια σ , ω , ρ και ίσως το δ , αποτελούν τους συνολικούς βαθμούς ελευθερίας του συστήματος. Το ολικό μέσο-πεδίοπου δημιουργείται από την δράση των μεσονίων είναι τοπικού χαρακτήρα και εξαρτάται μόνο από την τοπική πυκνότητα $\rho(\mathbf{r})$, ενώ δεν περιλαμβάνει όρους ανταλλαγής που προέρχονται από τανυστικές δυνάμεις και εξαρτώνται από τη μη-τοπική πυκνότητα $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Η επίδρασή τους συνήθως συμπεριλαμβάνεται στα διάφορα μοντέλα με φαινομενικό τρόπο από την επαναπροσαρμογή των παραμέτρων.

Μία από τις ιδιότητες της πυρηνικής δύναμης είναι ο τανυστικός της χαρακτήρας. Το κομμάτι της αλληλεπίδρασης με μεγάλη εμβέλεια σχετίζεται με την ανταλλαγή του ελαφρύτερου μεσονίου, το πιόνιο, και έχει τανυστικό χαρακτήρα. Το δυναμικό ανταλλαγής ενός πιονίου (one pion exchange potential (OPEP)) είναι το πιο γνωστό κομμάτι της αλληλεπίδρασης Νουκλεονίου-Νουκλεονίου NN, όμως δεν είναι αρκετό από μόνο του για να εξηγήσει τη σύνδεση ανάμεσα σε δύο νουκλεόνια, καθώς η αναμενόμενη τιμή του είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με την κινητική ενέργεια της σχετικής κίνησης των δύο νουκλεονίων. Από την άλλη, η τανυστική δύναμη είναι εξαιρετικής σημασίας για την πυρηνική σύνδεση καθώς η ανταλλαγή δύο πιονίων, δηλαδή η δεύτερης τάξης επίδραση της τανυστικής δύναμης, δημιουργεί μια ισχυρή κεντρική έλξη για μηδενικό συνολικό ισοσπίν ($T = 0$).

Από τις πρώτες και πιο σημαντικές πειραματικές ενδείξεις του τανυστικού χαρακτήρα της αλληλεπίδρασης ανάμεσα στα νουκλεόνια αποτελεί η σύνδεση του δευτερίου και η ανακάλυψη της τετραπολικής ροπής του.[121]. Το δευτέριο είναι ο μικρότερος σύνθετος πυρήνας στη φύση. Αποτελείται από ένα πρωτόνιο και ένα νετρόνιο και εμφανίζει μία μικρή παραμόρφωση από το σφαιρικό σχήμα. Αν η δύναμη ανάμεσα στα δύο νουκλεόνια ήταν μόνο κεντρική και εξαρτώταν μόνο από τη μεταξύ τους απόσταση, τότε το δευτέριο θα είχε σφαιρικό σχήμα που είναι ενεργειακά προτιμητέο για τέτοιες δυνάμεις. Η ύπαρξη όμως της τετραπολικής ροπής δείχνει ότι η αλληλεπίδραση ανάμεσα στα νουκλεόνια εξαρτάται επίσης από τον σχετικό προσανατολισμό των μεμονωμένων σπιν. Αυτό σημαίνει ότι η πυρηνική δύναμη περιλαμβάνει και μία μη κεντρική συνιστώσα τανυστικής φύσης. Συνεπώς οποιαδήποτε προσπάθεια κατασκευής ενός μοντέλου περιγραφής του πυρήνα θα πρέπει να περιλαμβάνει θεωρητικά ένα δυναμικό με τανυστικούς όρους.

Στη βάση αυτή υπάρχουν αρκετές πρόσφατες έρευνες[52, 56, 122, 123] που υποστηρίζουν ότι η προσθήκη τανυστικών δυνάμεων στο μέσο-πεδίο έχουν επίδραση σε ορισμένα συγκεκριμένα μονοσωματιδιακά μεγέθη. Παρά το γεγονός ότι δεν υπάρχουν συγκεκριμένες πειραματικές ενδείξεις που να συνδέουν την τανυστική συνεισφορά του πιονίου με μετρήσιμα πειραματικά μεγέθη, εν τούτοις η εισαγωγή του έχει ορισμένα πολύ χαρακτηριστικά αποτελέσματα στις ιδιότητες των πυρηνικών φασμάτων των μονοσωματιδιακών ενεργειών. Για παράδειγμα αντίστοιχοι μη-σχετικιστικοί υπολογισμοί στο πλαίσιο του μοντέλου φλοιών[52] σε εξωτικούς πυρήνες έδειξαν ότι η τανυστική δύναμη έχει πολύ συγκεκριμένη επίδραση στην θέση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων. Συγκεκριμένα η τανυστική αλληλεπίδραση ανάμεσα σε πρωτόνια που καταλαμβάνουν μία τροχιά με ολική στροφορμή $j_> = l_\pi + \frac{1}{2}$ δηλαδή με σπιν παράλληλο στην τροχιακή στροφορμή, και σε νετρόνια μίας τροχιάς με $j_< = l_\nu + \frac{1}{2}$ με σπιν αντιπαράλληλο στην τροχιακή στροφορμή είναι ελκτική και αντιστρόφως. Από την άλλη είναι απωστική αν τα πρωτόνια και τα νετρόνια βρίσκονται σε τροχιές στις οποίες τα σπιν και των δύο είναι παράλληλα ή αντιπαράλληλα στην τροχιακή στροφορμή. Η συγκεκριμένη ιδιότητα είναι ουσιαστική για την αναπαραγωγή των πειραματικών δεδομένων τα οποία παρατηρήθηκαν από την ερευνητική ομάδα στο κέντρο πυρηνικών ερευνών στην Argonne [124]

Πέρα όμως από μία αρχική διερεύνηση στη δεκαετία του '70 [53], σε όλες τις καθιερωμένες και επιτυχείς εφαρμογές της θεωρίας του μέσου-πεδίου οι τανυστικές δυνάμεις δεν συμπεριλαμβάνονται καθόλου. Στις περισσότερες περιπτώσεις οι παράμετροι των συναρτησοειδών αυτών προσαρμόζονται σε δεδομένα συλλογικών ιδιοτήτων που αφορούν τον πυρήνα ως σύνολο. Συνεπώς, η μεταβολή στις μονοσωματιδιακές ενέργειες που περιγράψαμε, η οποία οφείλεται στην τανυστική αλληλεπίδραση δεν εμφανίζεται στα καθιερωμένα μοντέλα. Γι' αυτό το λόγο, έχουν προταθεί πιο πρόσφατα βελτιωμένα μοντέλα μέσου-πεδίου [122, 125–130].

Οι περισσότερες από αυτές τις μελέτες χρησιμοποιούν τανυστικές δυνάμεις μηδενικής εμβέλειας ενώ χρησιμοποιούν και δεδομένα μονοσωματιδιακών ενεργειών, κυρίως διαχωρισμών λόγω σπιν-τροχιάς για τον καθορισμό των παραμέτρων των μοντέλων. Σε αρκετές από αυτές, αναδεικνύεται η επίδραση των τανυστικών δυνάμεων σε συγκεκριμένες μονοσωματιδιακές καταστάσεις στην περιοχή των μαγικών αριθμών και επισημαίνεται η βελτίωση της περιγραφής μονοσωματιδιακών καταστάσεων από τη θεωρία μέσου-πεδίου συγκριτικά με τα πειραματικά δεδομένα.

3.1.1 Γενικά χαρακτηριστικά της τανυστικής δύναμης

Η τανυστική δύναμη ανάμεσα σε δύο νουκλεόνια συνήθως εκφράζεται ως [17]

$$V_T = (\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) S_{12} V(r) \quad (3.1)$$

όπου $\vec{\tau}_{1,2}$ είναι οι τελεστές του ισοσπίν για τα νουκλεόνια 1 και 2 αντίστοιχα, η πράξη (\cdot) δηλώνει το εσωτερικό γινόμενο και V είναι μία συνάρτηση με αρνητικό πρόσημο της απόστασης r ανάμεσα στα δύο νουκλεόνια. Η συνάρτηση S_{12} ορίζεται ως

$$S_{12} = 3(\vec{s}_1 \cdot \vec{r}/r)(\vec{s}_2 \cdot \vec{r}/r) - (\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2), \quad (3.2)$$

όπου $\vec{s}_{1,2}$ είναι το σπιν των νουκλεονίων 1 και 2, \vec{r} είναι η συντεταγμένη της σχετικής απόστασης από το νουκλεόνιο 1 στο 2 και r είναι η απόλυτη τιμή της. Αυτή η εξίσωση μπορεί επίσης να γραφτεί ισοδύναμα και ως

$$S_{12} = 3([\vec{s}_1 \times \vec{s}_2]^{(2)} \cdot [\vec{r} \times \vec{r}]^{(2)}/r^2), \quad (3.3)$$

$$= \sqrt{24\pi/5}([\vec{s}_1 \times \vec{s}_2]^{(2)} \cdot Y^{(2)}) \quad (3.4)$$

όπου το σύμβολο $[\times]^K$ υποδεικνύει τη σύζευξη δύο τελεστών μέσω ενός τανυστή τάξης K , ενώ οι σφαιρικές αρμονικές εισάγονται από τη σχέση:

$$[\vec{r} \times \vec{r}]^{(2)}/r^2 = \sqrt{8\pi/15}Y^{(2)}. \quad (3.5)$$

Έχουμε λοιπόν, μία αλληλεπίδραση που είναι ένας τανυστής δεύτερης τάξης και εξαρτάται από τον προσανατολισμό που έχουν τα σπιν των νουκλεονίων 1 και 2 μεταξύ τους καθώς και ξεχωριστά από την διεύθυνση που τα ενώνει.

Όπως προαναφέρθηκε, η πιο αξιοσημείωτη εμφάνιση του τανυστικού χαρακτήρα της αλληλεπίδρασης NN αναδεικνύεται από την ύπαρξη της τετραπολικής ροπής του δευτερίου. Συγκεκριμένα, η τανυστική δύναμη επιδρά στο σύστημα των δύο νουκλεονίων και στην κατάσταση σπιν τριπλέτας ($S = 1$), η οποία δημιουργείται από τη σύζευξή τους. Όταν το διάνυσμα της σχετικής απόστασης που συνδέει το πρωτόνιο και το νετρόνιο είναι παράλληλο με τον προσανατολισμό

των δύο σπιν, τότε το δευτέριο αποκτά μεγαλύτερη ενέργεια σύνδεσης μέσω της δράσης της τανυστικής αλληλεπίδρασης της εξίσωσης (3.1), μιας και η $V(r)$ είναι αρνητική και από την 3.2 έχουμε $S_{12} = 2$ για αυτήν την περίπτωση, οπότε συνολικά έχουμε μια επιπρόσθετη έλξη. Αντιθέτως, αν το διάνυσμα της σχετικής απόστασης είναι κάθετο στην διεύθυνση των σπιν, τότε το δευτέριο θα χάσει τη σύνδεσή του αφού σε αυτήν την περίπτωση έχουμε $S_{12} = -1$ και η συνολική επίδραση είναι απωστική. Συνεπώς, προκύπτει ότι η προτιμητέα διεύθυνση των δύο νουκλεονίων είναι όταν το ένα βρίσκεται πάνω από το άλλο και έτσι το δευτέριο γίνεται δέσμιο μόνο υπό την επίδραση της τανυστικής αλληλεπίδρασης έχοντας παραμορφωμένο μέσο σχήμα **prolate**¹ τύπου.

Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 1.4, η σύνδεση των νουκλεονίων στο εσωτερικό του πυρήνα περιγράφεται θεωρητικά με το μοντέλο της ανταλλαγής μεσονίων. Όπου τα νουκλεόνια και τα απαραίτητα μεσόνια αποτελούν τους συνολικούς βαθμούς ελευθερίας του συστήματος. Σε αυτό το πλαίσιο η κύρια συνεισφορά στην τανυστική συνιστώσα της αλληλεπίδρασης NN προέρχεται από τη σύζευξη πιονίου-νουκλεονίου και το τανυστικό κομμάτι της σύζευξης του ρ -νουκλεονίου, που εξαρτώνται από το σπιν και το ισοσπίν. Η ισοβαθμωτή τανυστική συνιστώσα προέρχεται από τη σύζευξη ω -νουκλεονίου.

Στον χώρο των ορμών, η ανταλλαγή ενός πιονίου γίνεται [26]

$$V_{OPEP}(\vec{k}) = -\frac{4\pi f_\pi^2}{m_\pi^2} \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 \frac{(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{k})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{k})}{k^2 + m_\pi^2}. \quad (3.6)$$

Η Εξ. 3.6 αναλύεται σε ένα κεντρικό και σε ένα τανυστικό κομμάτι ως εξής

$$V_{OPEP}(\vec{k}) = -\frac{4\pi f_\pi^2}{3m_\pi^2} \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 \left[\frac{3(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{k})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{k}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 k^2}{k^2 + m_\pi^2} + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \left(1 - \frac{m_\pi^2}{k^2 + m_\pi^2} \right) \right], \quad (3.7)$$

όπου η ψευδο-διανυσματική σταθερά σύζευξης πιονίου-νουκλεονίου είναι $f_\pi^2 = 0.08$, η μάζα του πιονίου είναι $m_\pi = 138\text{MeV}$ και \vec{k} είναι η μεταφερόμενη ορμή. Ο πρώτος όρος στις αγκύλες είναι μία τανυστική αλληλεπίδραση και ο δεύτερος όρος μία κεντρική αλληλεπίδραση. Ο όρος $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ της κεντρικής αλληλεπίδρασης που είναι ανεξάρτητος από την ορμή, θα γίνει $\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ σε έναν μετασχηματισμό Fourier στο χώρο των συντεταγμένων, και μπορεί να αφαιρεθεί καθώς υπερισχύει η μικρής εμβέλειας άπωση της NN αλληλεπίδρασης. Έτσι, η V_{OPEP} μετασχηματίζεται στο χώρο των συντεταγμένων στην ακόλουθη έκφραση,

$$V_{OPEP}(\vec{r}) = f_\pi^2 m_\pi \vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2 \left[\left(\frac{1}{3m_\pi r} + \frac{1}{(3m_\pi r)^2} + \frac{1}{(3m_\pi r)^3} \right) e^{-m_\pi r} S_{12} + \frac{1}{3} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \frac{e^{-m_\pi r}}{m_\pi r} \right]. \quad (3.8)$$

¹Ελλειψοειδές σχήμα με αξονική συμμετρία, που προκύπτει από την περιστροφή μίας έλλειψης γύρω από τον μεγάλο ημιάξονά της.

Το δυναμικό της ανταλλαγής του ρ -μεσονίου που προέρχεται από τη σύζευξη ρ -νουκλεονίου δίνεται στο χώρο των ορμών από τη σχέση

$$V_\rho(\vec{k}) = -\frac{4\pi f_\rho^2}{m_\rho^2} \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 \frac{(\vec{\sigma}_1 \times \vec{k})(\vec{\sigma}_2 \times \vec{k})}{k^2 + m_\rho^2}. \quad (3.9)$$

Όπως είναι φανερό έχει παρόμοια δομή με το δυναμικό της ανταλλαγής ενός πιονίου,

$$V_\rho(\vec{r}) = f_\rho^2 m_\rho \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 \left[-\left(\frac{1}{3m_\rho r} + \frac{1}{(3m_\rho r)^2} + \frac{1}{(3m_\rho r)^3} \right) e^{-m_\rho r} S_{12} \right. \\ \left. + \frac{2}{3} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \left(\frac{e^{-m_\rho r}}{m_\rho r} - \frac{4\pi}{m_\rho^3 \delta(\vec{r})} \right) \right]. \quad (3.10)$$

όπου $m_\rho = 770\text{MeV}$ και $f_\rho^2 m_\rho = 4.86$. Όπως παρατηρούμε το τανυστικό κομμάτι αυτού του δυναμικού έχει το αντίθετο πρόσημο σε σχέση με αυτό της ανταλλαγής πιονίου. Εν γένει, εξ αιτίας της μεγαλύτερης μάζας του το τανυστικό κομμάτι της ανταλλαγής του ρ -μεσονίου έχει μικρότερη εμβέλεια και έχει μικρότερη συνεισφορά στα στοιχεία πίνακα απ' ότι αυτό του πιονίου.

Τέλος το τανυστικό δυναμικό της ανταλλαγής του ω -μεσονίου γράφεται ως

$$V_\omega(\vec{k}) = -\frac{4\pi f_\omega^2}{m_\omega^2} \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 \frac{(\vec{\sigma}_1 \times \vec{k})(\vec{\sigma}_2 \times \vec{k})}{k^2 + m_\omega^2}. \quad (3.11)$$

στο χώρο ορμής. Αυτό το τανυστικό δυναμικό δεν εξαρτάται από το ισοσπίν και στον χώρο των συντεταγμένων γίνεται

$$V_\omega(\vec{r}) = f_\omega^2 m_\omega \left[-\left(\frac{1}{3m_\omega r} + \frac{1}{(3m_\omega r)^2} + \frac{1}{(3m_\omega r)^3} \right) e^{-m_\omega r} S_{12} \right. \\ \left. + \frac{2}{3} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \left(\frac{e^{-m_\omega r}}{m_\omega r} - \frac{4\pi}{m_\omega^3 \delta(\vec{r})} \right) \right]. \quad (3.12)$$

όπου η μάζα του ω είναι $m_\omega = 783\text{MeV}$.

3.1.2 Τανυστικές δυνάμεις και ο ρόλος του πιονίου στη συναλλοιώτη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας

Η καθιερωμένη προσέγγιση του μέσου-πεδίου από ένα συναλλοιώτο συναρτησοειδές πυκνότητας γίνεται στο πλαίσιο της θεωρίας Hartree δηλαδή δεν περιλαμβάνονται όροι ανταλλαγής άμεσα. Σε αυτό το πλαίσιο οι συζεύξεις τανυστικού τύπου

των π -, ρ - και ω -μεσονίων που αναφέραμε στην προηγούμενη ενότητα δεν συνεισφέρουν στον υπολογισμό του στατικού μέσου-πεδίου. Η πολύπλοκη επίδραση δυνάμεων δύο ή πολλών σωμάτων καθώς και οι διάφορες συσχετίσεις λαμβάνονται υπόψιν με φαινομενολογικό τρόπο και το ολικό μέσο-πεδίο έχει τελικά μόνο τοπικό χαρακτήρα ευθείας αλληλεπίδρασης Hartree. Τις περισσότερες φορές αυτή είναι μια καλή προσέγγιση, επειδή οι σταθερές σύζευξης των διάφορων σπιν-ισοσπιν καναλιών προσαρμόζονται σε πειραματικά δεδομένα και για δυνάμεις μηδενικής εμβέλειας το θεώρημα Fierz[131] αποδεικνύει ότι, οι όροι ανταλλαγής-Fock μπορούν να ξαναγραφτούν σε όρους ευθείας αλληλεπίδρασης με καινούριες φαινομενικές σταθερές σύζευξης που προέρχονται από ένα γραμμικό συνδυασμό των παλιών σταθερών σύζευξης στα διάφορα κανάλια σπιν-ισοσπιν. Η μέθοδος αυτή ακολουθείται επί μακρόν σε μη-σχετικιστικά συναρτησοειδή πυκνότητα τύπου Skyrme[7] για την ενσωμάτωση όρων ανταλλαγής. Αυτή η προσέγγιση εξακολουθεί να ισχύει και για τις αλληλεπιδράσεις που προέρχονται από την ανταλλαγή των μεσονίων σ , ω , δ και ρ , τα οποία έχουν μεγάλη μάζα και η αντίστοιχη εμβέλεια είναι αρκετά μικρή. Από την άλλη, η εφαρμογή του μετασχηματισμού Fierz στο πiónιο δεν είναι δυνατή ακριβώς λόγω της σχετικά μικρής του μάζας και της αντίστοιχα μεγάλης εμβέλειας της προκύπτουσας αλληλεπίδρασης. Παράλληλα ο ψευδο-βαθμωτός χαρακτήρας της σύζευξης πιονίου-Νουκλεονίου σημαίνει ότι το πiónιο δεν συνεισφέρει καθόλου στο επίπεδο Hartree.

Οι αρχικές προσπάθειες για την ενσωμάτωση των τανυστικών συζεύξεων του πιονίου και του ρ -μεσονίου στο πλαίσιο σχετικιστικών Hartree-Fock υπολογισμών, όπως στα [132–137], καταλήγουν σε εξισώσεις κίνησης που είναι αρκετά πολύπλοκες και η εφαρμογή τους περιορίζεται στην περίπτωση της άπειρης πυρηνικής ύλης και μερικών σφαιρικών πυρήνων με διπλά κλειστούς φλοιούς. Επιπλέον, η επιπρόσθετη πολυπλοκότητα των αντίστοιχων αριθμητικών υπολογισμών καθιστούσε αδύνατη την συστηματική προσαρμογή των παραμέτρων των μοντέλων αυτών σε πειραματικά δεδομένα. Για αυτούς τους λόγους τα αποτελέσματα αυτών των σχετικιστικών Hartree-Fock προσεγγίσεων δεν είχαν την ίδια επιτυχία με το καθιερωμένο μοντέλο του σχετικιστικού μέσου-πεδίου στην ποσοτική περιγραφή ιδιοτήτων πυρηνικής δομής.

Πιο πρόσφατα όμως, αναπτύχθηκε μία μέθοδος για την επίλυση των πολύπλοκων ολοκληρωτικο-διαφορικών εξισώσεων της σχετικιστικής Hartree-Fock μεθόδου, από την οποία προέκυψαν δύο βελτιωμένες ομάδες παραμέτρων [138, 139] με σταθερές σύζευξης μεσονίου-νουκλεονίου που εξαρτώνται από την πυκνότητα. Στην προκειμένη περίπτωση οι συζεύξεις ανάμεσα στα μεσόνια που δημιουργούν τη συνολική αλληλεπίδραση θεωρούνται μηδενικής εμβέλειας, στην πρώτη περίπτωση στο συναρτησοειδές PKO1[138] περιλαμβάνονται οι τανυστικές αλληλεπιδράσεις τόσο από το πiónιο όσο και από το ρ -μεσόνιο, ενώ στο δεύτερο συναρτησοειδές PKA1[139] μόνο αυτή του ρ -μεσονίου. Εν γένει, στη Λαγκραντζιανή που περιγράφει το κάθε συναρτησοειδές οι σταθερές σύζευξης των συγκεκριμένων

αλληλεπιδράσεων εισέρχονται με την τιμή που έχουν στον ελεύθερο χώρο. Επιτρέποντας όμως την εξάρτησή τους από την βαρυονική πυκνότητα, η προσαρμογή των ελεύθερων παραμέτρων της Λαγκραντζιανής σε πυρηνικά παρατηρούμενα μεγέθη, οδηγεί σε μείωση αυτών των σταθερών στο περιβάλλον της πυρηνικής ύλης. Ειδικά για την περίπτωση του ΡΚΟ1, η σύζευξη της τανυστικής σύζευξης του πιονίου ελαττώνεται σε τέτοιο βαθμό σε σχέση με αυτή που έχει στον ελεύθερο χώρο, ώστε πρακτικά η επίδραση του πιονίου να λαμβάνεται κυρίως υπόψιν φαινομενικά μέσα από την αλληλεπίδραση των υπόλοιπων μεσονίων του συναρτησοειδούς. Η συγκεκριμένη προσέγγιση της σχετικιστικής θεωρίας Hartree-Fock βελτιώσε την καθιερωμένη περιγραφή του σχετικιστικού μέσου-πεδίου. Ειδικότερα σε υπολογισμούς ιδιοτήτων βασικών καταστάσεων πυρήνων, είναι το ίδιο ή και καλύτερα επιτυχής στην αναπαραγωγή των πειραματικών μετρήσεων. Επίσης, η εισαγωγή μη-τοπικών επιδράσεων μέσα από τις τανυστικές αλληλεπιδράσεις βελτιώνει την περιγραφή της εξάρτησης της φαινομενικής μάζας πρωτονίων νετρονίων, μέσα στο περιβάλλον του πυρήνα από το ισοσπίν και την ενέργεια. Τέλος, με την χρήση του συναρτησοειδούς ΡΚΑ1[139] διορθώθηκε το πρόβλημα της εμφάνισης τεχνητών κλειστών φλοιών στα $N, Z=58$ και 92 το οποίο εμφανίζεται σε ορισμένους RMF υπολογισμούς.

Μία διαφορετική προσέγγιση της θεωρίας RHF αναπτύχθηκε από την ομάδα της *Serra κ.α.*[56, 140]. Σε αυτήν την περίπτωση η ανάλυση των εξισώσεων κίνησης γίνεται στο χώρο των λύσεων αρμονικού ταλαντωτή και ο όρος ανταλλαγής στο μέσο-πεδίο προέρχεται μόνο από την τανυστική σύζευξη του πιονίου. Για τα μεσόνια ρ και ω λόγω της μεγάλης μάζας και της μικρής εμβέλειας της προκύπτουσας αλληλεπίδρασης, οι αντίστοιχοι όροι ανταλλαγής θεωρείται ότι ενσωματώνονται στους ευθείς όρους μέσω των φαινομενικών σταθερών σύζευξης λόγω του θεωρήματος Fierz όπως γίνεται συνήθως στη σχετικιστική προσέγγιση Hartree και αναφέρθηκε νωρίτερα. Σε αντίθεση λοιπόν με τα συναρτησοειδή ΡΚΟ1 και ΡΚΑ1 που περιέχουν όρους σημειακής σύζευξης μεταξύ των μεσονίων, το συναρτησοειδές $E_{RHF}[\hat{\rho}, \phi]$ αυτής της προσέγγισης περιλαμβάνει όρους μη γραμμικής σύζευξης για το σ -μεσόνιο και κανέναν όρο ανταλλαγής για τα μεσόνια $\phi_m = \sigma, \omega, \rho, A$. Περιλαμβάνει επίσης και τον πρόσθετο Fock όρο $E_\pi[\hat{\rho}]$ που αντιστοιχεί στην αλληλεπίδραση πιονίου-Νουκλεονίου:

$$E_{RHF}[\hat{\rho}, \phi] = E_{RMF}[\hat{\rho}, \phi] + E_\pi[\hat{\rho}]. \quad (3.13)$$

Στην ουσία αποτελεί μία επέκταση των συναρτησοειδών μη-γραμμικής σύζευξης όπου στην βασική Λαγκραντζιανή 2.1 από την οποία προκύπτει, προστίθεται ο όρος που περιγράφει το ελεύθερο πiónιο

$$\mathcal{L}_\pi = \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\pi} \partial^\mu \vec{\pi} - m_\pi^2) \vec{\pi}^2, \quad (3.14)$$

όπου η μάζα του πιονίου ισούται με την πειραματική της τιμή $m_\pi = 138\text{MeV}$,

Πίνακας 3.1: Οι ομάδες παραμέτρων μετά την προσαρμογή με σταθερή τιμή για την σύζευξη πιονίου $f_\pi^2 = \lambda f_\pi^{2(free)}$, για διάφορες τιμές τις σταθεράς λ

	RHF(1.0)	RHF(1.0)	RH
M (MeV)	939.000	939.000	939.00
m_π (MeV)	138	138	138
g_ω	13.677	13.588	12.899
g_ρ	3.606	4.222	4.589
m_σ (MeV)	511.741	511.272	505.967
m_ω (MeV)	782.501	782.501	782.238
m_ρ (MeV)	763.000	763.000	763.000
g_σ	10.442	10.532	10.189
$g_2(fm^{-1})$	-7.192	-8.417	-10.209
g_3	-23.248	-26.468	-28.612
λ	1.00	0.50	0.00
χ^2	310	168	75

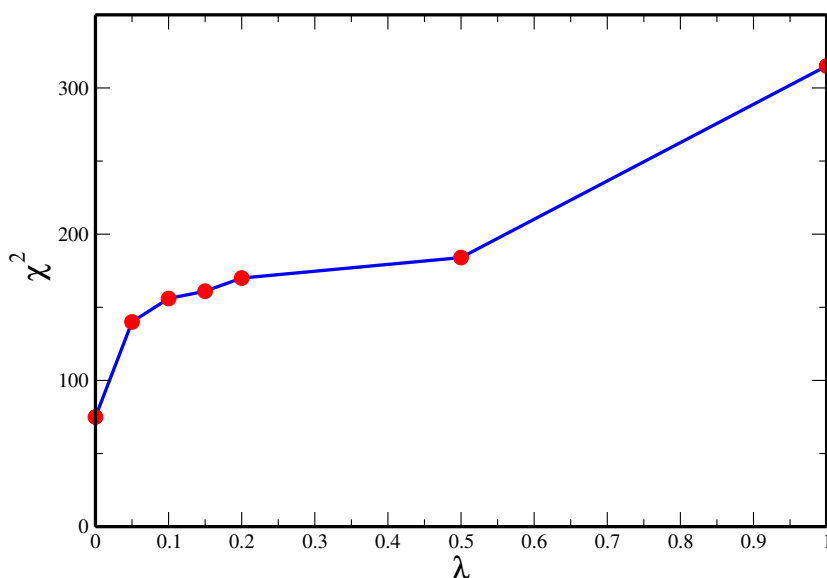
καθώς και ο όρος της ψευδο-διανυσματικού τύπου Yukawa δύναμης

$$\mathcal{L}_{pv} = -\frac{f_\pi}{m_\pi} \bar{\psi} \gamma_\pi \gamma_\mu \partial^\mu \vec{\pi} \vec{\tau} \psi \quad (3.15)$$

Η σταθερά σύζευξης f_π δίνεται από την πειραματική τιμή της αλληλεπίδρασης πιονίων-Νουκλεονίων στον ελεύθερο χώρο. Στην πραγματικότητα η ισχύς αυτής της αλληλεπίδρασης στο εσωτερικό πυρηνικό περιβάλλον μειώνεται δραματικά και σε πρακτικές εφαρμογές αυτού του μοντέλου η τιμή της σταθεράς σύζευξης έχει διαφορετική τιμή από αυτήν στον ελεύθερο χώρο. Συνεπώς, στην διαδικασία προσαρμογής των παραμέτρων του μοντέλου αποτελεί μία από τις ελεύθερες παραμέτρους που πρέπει να καθοριστούν. Αυτό έγινε στη συγκεκριμένη περίπτωση εισάγοντας έναν παράγοντα λ με τον οποίο πολλαπλασιάζεται η f_π δίνοντας τη φαινομενική σταθερά σύζευξης του πιονίου.

Η μέθοδος προσαρμογής είναι παρόμοια με αυτήν που ακολουθείται στο συναρτησοειδές NL3[48]. Λαμβάνοντας διάφορες τιμές της σταθεράς λ (ανάμεσα στο 0 και στο 1) ακολουθήθηκε η διαδικασία της προσαρμογής για τις υπόλοιπες έξι ελεύθερες παραμέτρους του μοντέλου, δηλαδή τη μάζα m_σ του σ -μεσονίου, τις

σταθερές σύζευξης g_σ , g_ω , g_ρ και τις δύο παραμέτρους g_2 και g_3 για τη μη γραμμική σύζευξη του σ -μεσονίου. Στον πίνακα 3.1 δίνονται τα αποτελέσματα αυτής της διαδικασίας ενδεικτικά για τρεις τιμές του λ . Η ομάδα παραμέτρων RHF(1.0) αντιστοιχεί στην περίπτωση, όπου η πλήρης σύζευξη του πιονίου λαμβάνεται υπόψη ($\lambda = 1$). Στη δεύτερη ομάδα RHF(0.5) η τανυστική αλληλεπίδραση του πιονίου μειώνεται στο μισό σε σχέση με την τιμή στον ελεύθερο χώρο. Τέλος η RH αντιστοιχεί σε $\lambda = 0$ δηλαδή στην αρχική δύναμη NL3 χωρίς το πόνιο. Σε κάθε περίπτωση δίνεται η τιμή χ^2 της διαδικασίας της προσαρμογής. Τα αποτε-



Σχήμα 3.1: Η τιμή χ^2 της διαδικασίας προσαρμογής σαν συνάρτηση της σταθεράς σύζευξης του πιονίου.

λέσματα φαίνονται στο σχήμα 3.1. Βλέπουμε ότι το χ^2 που δείχνει την ποιότητα της προσαρμογής βελτιώνεται όσο μικραίνει η τιμή του λ από τη μονάδα και έχει τη χαμηλότερη τιμή για την περίπτωση με $\lambda = 0$. Γίνεται δηλαδή φανερό ότι στην μορφή που έχει το συγκεκριμένο μοντέλο η εισαγωγή του πιονίου δεν είναι προτιμητέα προσέγγιση. Μελετώντας συλλογικές ιδιότητες ισότοπων σφαιρικών πυρήνων παρατηρήθηκε ότι δεν περιγράφονται ικανοποιητικά για πεπερασμένες τιμές του λ . Ιδιαίτερο ενδιαφέρον όμως εμφανίζουν τα αποτελέσματα της επίδρασης της τανυστικής δύναμης λόγω του πιονίου σε μικροσκοπικό επίπεδο. Αρχικά έδειξαν ότι ισχύει και εδώ ο γενικός κανόνας ότι η ελκτική ή απωστική φύση της τανυστικής αλληλεπίδρασης ανάμεσα σε νετρόνια και πρωτόνια εξαρτάται από την ολική στροφορμή και τον προσανατολισμό των σπιν στις τροχιές που καταλαμβάνουν. Επίσης χρησιμοποιώντας την ομάδα παραμέτρων NL3RHF0.5, μπόρεσαν να αναπαράγουν την αυξανόμενη ενεργειακή διαφορά ανάμεσα στις $\pi 1h_{11/2}$ και

$\pi 1g_{7/2}$ τροχιές που παρατηρήθηκε πειραματικά σε Sn(a,t)-αντιδράσεις στις εγκαταστάσεις της Argonne [124]. Τέλος, παρατηρήθηκε η επίδραση της ταυυστικής δύναμης στην ενέργεια σύνδεσης σε πυρήνες με κλειστούς φλοιούς, όπου μόνο μία από τις καταστάσεις ενός ζεύγους σπιν-τροχιάς είναι κατειλημμένη.

Βλέπουμε ότι και στις δύο προσεγγίσεις η εισαγωγή των ταυυστικών αλληλεπιδράσεων για τη δημιουργία σχετικιστικών Hartree-Fock μοντέλων έχει πολύ συγκεκριμένες συνέπειες κυρίως στην περιγραφή της μονοσωματιδιακής δομής εξωτικών πυρήνων. Υπάρχει πάντα η δυσκολία του καθορισμού των σταθερών σύζευξης των αλληλεπιδράσεων καθώς αυτές μειώνονται σημαντικά στο εσωτερικό του πυρήνα. Συνεπώς στα μοντέλα που εισάγονται επιπρόσθετα, πρέπει οι συνολικές παράμετροι να επαναπροσδιοριστούν, όμως δεν είναι ξεκάθαρος ο τρόπος να απομονωθεί πειραματικά η επίδραση των ταυυστικών δυνάμεων σε συγκεκριμένα μετρήσιμα μεγέθη.

3.2 Σύζευξη ημι-σωματιδίου δονήσεων

Μέτριας μάζας και βαριοί πυρήνες αποτελούν κβαντομηχανικά συστήματα Fermi, όπου οι βαθμοί ελευθερίας των ανεξάρτητων σωματιδίων και των δονήσεων εμφανίζουν ισχυρή σύζευξη. Οι συλλογικές δονήσεις οδηγούν σε ταλαντώσεις του σχήματος του μέσου πυρηνικού δυναμικού και, συνεπώς, τροποποιούν την μονοσωματιδιακή κίνηση. Για να συνυπολογιστεί αυτό το φαινόμενο, ήδη στο [141], είχαν προταθεί οι γενικές έννοιες έτσι ώστε το κομμάτι της αυτο-ενέργειας των μεμονωμένων νουκλεονίων να περιλαμβάνει και τη σύζευξη ημισωματιδίου-δονήσεων (Quasiparticle-Vibration Coupling (QVC)). Αυτή η ιδέα έχει εφαρμοστεί με διάφορους τρόπους ιστορικά όπως το μοντέλο Ημισωματιδίου-Φωνονίου (Quasiparticle-Phonon model) [142–144], η πυρηνική θεωρία πεδίου [145–149] και άλλοι [150–157]. Οι μελέτες αυτές, ωστόσο, είτε δεν είναι αυτό-συνεπής ή δεν περιλαμβάνουν συσχετίσεις ζεύγους. Πιο ειδικά, περιέχουν ένα μεγάλο αριθμό παραμέτρων προς τροποποίηση σε κάθε βήμα των υπολογισμών, αρχικά για το μονοσωματιδιακό δυναμικό, έπειτα για τον υπολογισμό των καταστάσεων δόνησης και τέλος για τους κόμβους σύζευξης ημισωματιδίων-δονήσεων.

Πιο πρόσφατα, εμφανίστηκαν αρκετές αυτό-συνεπείς προσεγγίσεις της QVC στο σχετικιστικό πλαίσιο [92, 158–163], όπου στις [159] και [161–163] συμπεριλαμβάνονται και συσχετίσεις ζεύγους. Τα μονοσωματιδιακά δυναμικά (αυτό-ενέργειες) καθώς και οι δονήσεις προκύπτουν με έναν πλήρως αυτο-συνεπή τρόπο από τα καθολικά σχετικιστικά ενεργειακά συναρτησοειδή πυκνότητας που αναλύσαμε στην αρχή του κεφαλαίου. Καμία επιπρόσθετη παράμετρος δεν εισάγεται ούτε είναι απαραίτητη. Οι **δεσμοί/κόμβοι** σύζευξης σωματιδίου-φωνονίου εξάγονται από το ίδιο συναρτησοειδές πυκνότητας. Έχει αποδειχτεί ότι η QVC βελτιώνει σημαντικά την περιγραφή των μονοσωματιδιακών καταστάσεων γύρω από

την επιφάνεια Fermi και εξηγεί τη διάσπαση των καταστάσεων βαθέων οπών και τις συλλογικές διεγέρσεις γιγαντιαίων συντονισμών.

Σε αυτήν την ενότητα θα εξετάσουμε τις τελευταίες προσεγγίσεις, και πως πραγματοποιείται η ενσωμάτωση τόσο των συσχετίσεων ζεύγους όσο και των δομήσεων, στο σχετικιστικό πλαίσιο.

3.2.1 Χρονικά εξαρτημένη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας

Όπως είδαμε και στην πρώτη ενότητα αυτού του κεφαλαίου η θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας που εισήχθη αρχικά από τους Kohn και Sham[2][3], στη δεκαετία του '60, βασίζεται στην έννοια του μέσου-πεδίου και ισχύει για την περιγραφή των βασικών καταστάσεων. Κατά τη διάρκεια μεταγενέστερων ερευνών έχει επεκταθεί για διεγερμένες καταστάσεις στο πλαίσιο της χρονικά εξαρτημένης θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας (time-dependent density functional theory (TDDFT))[68]. Οι Runge και Gross διατύπωσαν ένα θεώρημα[67] το οποίο αποτελεί επέκταση της μεθόδου Kohn-Sham.

Θεωρούν ένα πρόβλημα πολλών-σωμάτων μέσα σε ένα χρονικά-εξαρτώμενο εξωτερικό δυναμικό $f_{ext}(\mathbf{r}, t)$ και ξεκινούν από την ακριβή χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger

$$i\partial_t|\Psi(t)\rangle = (\hat{H} + f_{ext}(t))|\Psi(t)\rangle \quad (3.16)$$

με την ακριβή λύση $|\Psi(t)\rangle$ για μία δεδομένη αρχική συνθήκη $|\Psi(0)\rangle$. Έδειξαν ότι, για δεδομένες αρχικές συνθήκες, υπάρχει μία-προς-μία αντιστοίχιση ανάμεσα στην ακριβή χρονικά-εξαρτώμενη τοπική μονοσωματιδιακή πυκνότητα

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi(t) | \sum_i^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \Psi(t) \rangle \quad (3.17)$$

και στο εξωτερικό δυναμικό $f_{ext}(\mathbf{r}, t)$. Όπως και στη θεωρία Kohn-Sham, υπάρχει ένα υποθετικό σύστημα μη-αλληλεπιδρώντων σωματιδίων με μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις $\phi(\mathbf{r}, t)$ ($i = 1 \dots N$) που ικανοποιούν τις χρονικά-εξαρτώμενες εξισώσεις Kohn-Sham της μορφής

$$i\partial_t\phi(\mathbf{r}, t) = [-\nabla^2/2m + v_{KS}[\rho](\mathbf{r}, t)]\phi_i(\mathbf{r}, t) \quad (3.18)$$

για ένα καλά ορισμένο χρονικά-εξαρτώμενο μονοσωματιδιακό δυναμικό $v_{KS}[\rho](\mathbf{r}, t)$. Η πυκνότητα του συστήματος προκύπτει από τις συγκεκριμένες μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i^N |\phi_i(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (3.19)$$

είναι η ακριβής τοπική πυκνότητα του αλληλεπιδρώντος συστήματος πολλών-σωμάτων σε κάθε στιγμή t . Το χρονικά-εξαρτημένο δυναμικό Kohn-Sham $v_{KS}[\rho](\mathbf{r}, t)$ είναι συνάρτηση του \mathbf{r} και t , όμως είναι επίσης και ένα μοναδικό συναρτησοειδές της χρονικά-εξαρτημένης πυκνότητας $\rho(\mathbf{r}, t)$. Όπως και στη στατική περίπτωση το δυναμικό των συσχετίσεων ανταλλαγής v_{xc} ορίζεται από την συνθήκη:

$$v_{KS}[\rho](\mathbf{r}, t) = v[\rho](\mathbf{r}, t) + v_{xc}[\rho](\mathbf{r}, t) + f_{ext}(\mathbf{r}, t), \quad (3.20)$$

όπου v αντιστοιχεί στο δυναμικό Hartree. Οι εξισώσεις αυτές είναι παρόμοιες με τις στατικές εξισώσεις Kohn-Sham. Η παρούσα περιγραφή είναι όμως αρκετά πιο περίπλοκη από την στατική περίπτωση. Από τη στιγμή που το δυναμικό

$$v[\rho](\mathbf{r}, t) = v[\rho](\mathbf{r}, t) + v_{xc}[\rho](\mathbf{r}, t), \quad (3.21)$$

το οποίο συνήθως ονομάζεται *αυτό-ενέργεια* $\Sigma(\mathbf{r}, t)$, είναι ένα συναρτησοειδές της χρονικά-εξαρτημένης πυκνότητας $\rho(\mathbf{r}, t)$, περιέχει ολόκληρη την ιστορία του συστήματος και η εύρεσή του απαιτεί την πλήρη λύση της ακριβούς εξίσωσης Schrödinger 3.16 για αυθαίρετα συστήματα με την πυκνότητα $\rho(\mathbf{r}, t)$. Στην στατική περίπτωση μπορούμε να βρούμε το $v_s[\rho](\mathbf{r})$ ως την παράγωγο του στατικού ενεργειακού συναρτησοειδούς πυκνότητας $E[\rho_s]$, όμως, από τη στιγμή που θέλουμε να αποφύγουμε περαιτέρω προσεγγίσεις, δεν υπάρχει αντίστοιχη σχέση γνωστή για την χρονικά-εξαρτώμενη περίπτωση.

Υπάρχει, ωστόσο, μία περίπτωση όπου η κατάσταση μπορεί να απλοποιηθεί σημαντικά και αυτή η περίπτωση ισχύει και για την πυρηνική φυσική. Αφορά προβλήματα όπου το εξωτερικό δυναμικό $f_{ext}(\mathbf{r}, t)$ είναι αρκετά ασθενές, όπως για παράδειγμα η περίπτωση ενός εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Σε αυτήν τη περίπτωση είναι εφαρμόσιμη η θεωρία της γραμμικής απόκρισης. Υπό αυτήν τη συνθήκη δεν είναι απαραίτητο να γνωρίζουμε το συναρτησοειδές $v[\rho](\mathbf{r}, t)$ για αυθαίρετα μεταβαλλόμενες πυκνότητες, αρκεί μόνο να το γνωρίζουμε στην περιοχή της αρχικής πυκνότητας, δηλαδή της στατικής πυκνότητας $\rho_s(\mathbf{r})$ της βασικής κατάστασης του συστήματος, οπότε μπορούμε να γράψουμε

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_s(\mathbf{r}) + \delta\rho(\mathbf{r}, t) \quad (3.22)$$

. Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε για όρους πρώτης τάξης στο f_{ext}

$$v[\rho_s + \delta\rho](\mathbf{r}, t) = v[\rho_s](\mathbf{r}) + \int dt' \int d^3r' V[\rho^s](\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \delta\rho(\mathbf{r}', t'). \quad (3.23)$$

Εδώ το V είναι μία *effective* αλληλεπίδραση δύο-σωμάτων και προκύπτει ως συναρτησοειδής παράγωγος του μέσου-πεδίου 3.21 ως προς την πυκνότητα

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') = \left. \frac{\delta u(\mathbf{r}, t)}{\delta \rho(\mathbf{r}', t')} \right|_{\rho=\rho_s}, \quad (3.24)$$

στην τιμή της στατικής πυκνότητας. Είναι ένα συναρτησοειδές της στατικής πυκνότητας ρ_s και για τη χρονικά-ανεξάρτητη Χαμιλτονιανή εξαρτάται μόνο από τη χρονική διαφορά $t - t'$. Στα συστήματα Coulomb ισούται με το άθροισμα του δυναμικού Coulomb και το τμήμα των συσχετίσεων ανταλλαγής [68]. Εισάγοντας, όπως συνήθως γίνεται, την συνάρτηση απόκρισης $R(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t')$

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' \int dt' R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') f_{ext}(\mathbf{r}', t'), \quad (3.25)$$

βρίσκουμε μετά από έναν μετασχηματισμό Fourier στο χρόνο την γνωστή γραμμική εξίσωση απόκρισης [17]

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = R_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \int d^3r_1 \int d^3r_2 R_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) R(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}', \omega). \quad (3.26)$$

Εδώ R_0 είναι η συνάρτηση απόκρισης χωρίς αλληλεπίδραση, δηλαδή για την απόκριση ενός συστήματος ανεξάρτητων σωματιδίων που υπακούουν στη στατική μορφή της Εξ. 3.18. Φυσικά, όλες αυτές οι ποσότητες είναι συναρτησοειδή της ακριβούς πυκνότητας της βασικής κατάστασης $\rho_s(\mathbf{r})$.

Υπό τη συνθήκη ότι το εξωτερικό πεδίο f_{ext} είναι ασθενές, οι εξισώσεις αυτές είναι ακριβείς, όμως δεν γνωρίζουμε φυσικά το συναρτησοειδές $v[\rho](\mathbf{r}, t)$ στην Εξ. 3.21 ούτε τη συναρτησοειδή παράγωγο στο σημείο $\rho = \rho_s$. Ως συνήθως, στη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας το θεώρημα Runge-Gross δε μας δίνει κανένα στοιχείο για τον τρόπο εύρεσης αυτών των ποσοτήτων. Επίσης δεν κάνει καμία πρόταση για τη σχέση ανάμεσα σε αυτό το συναρτησοειδές και στο ακριβές συναρτησοειδές πυκνότητας $E[\rho_s]$ του Hohenberg-Kohn της βασικής κατάστασης. Οπότε χρειαζόμαστε κάποιου είδους μοντέλου για το μονοσωματιδιακό δυναμικό $v[\rho](\mathbf{r}, t)$ της εξίσωσης Kohn-Sham. Σε κάθε περίπτωση το δυναμικό αυτό είναι συναρτησοειδές της $\rho(\mathbf{r}, t)$ και έτσι εξαρτάται από την “ιστορία” του συστήματος, δηλαδή έχει μνήμη.

Υπάρχει μία πολύ κοινή προσέγγιση, η λεγόμενη *αδιαβατική προσέγγιση*. Σε αυτήν αγνοεί κανείς την μνήμη και θεωρεί ότι η πυκνότητα $\rho(\mathbf{r}, t)$ μεταβάλλεται πολύ αργά με το χρόνο, έτσι ώστε σε κάθε χρονική στιγμή t το δυναμικό να δίνεται από το δυναμικό της στατικής θεωρίας Kohn-Sham $v_s(\mathbf{r}) \equiv v[\rho_s]_{KS}(\mathbf{r})$ το οποίο αντιστοιχεί σε αυτήν την πυκνότητα:

$$v[\rho](\mathbf{r}, t) \approx v_s[\rho_s](\mathbf{r}, t)_{\rho_s=\rho(t)}. \quad (3.27)$$

Σε αυτή την προσέγγιση το $v[\rho]$ δεν είναι πλέον ένα συναρτησοειδές που εξαρτάται από μία συνάρτηση της $\rho(\mathbf{r}, t)$ με τέσσερις μεταβλητές, αλλά είναι ένα συναρτησοειδές που εξαρτάται από τη συνάρτηση $\rho_s(\mathbf{r})$ με τρεις μεταβλητές. Η πυκνότητα $\rho(\mathbf{r}, t)$ αλλά μόνο λίγο με το χρόνο και σε κάθε δεδομένη στιγμή t χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση $\rho_s(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, t)$ που εξαρτάται μόνο από τρεις

μεταβλητές κάθε στιγμή. Εδώ ο χρόνος είναι μόνο μία παράμετρος και, συνεπώς, το δυναμικό $v[\rho](\mathbf{r}, t)$ εξαρτάται από τον χρόνο. Από τη στιγμή που στη στατική περίπτωση, το δυναμικό $v_s[\rho_s]$ είναι μόνο η παράγωγος του ενεργειακού συναρτησοειδούς πυκνότητας $E[\rho_s]$ ως προς τη στατική πυκνότητα, από την εξίσωση 3.24 προκύπτει ότι στην αδιαβατική προσέγγιση, η ενεργός αλληλεπίδραση

$$V_{ad}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') = \left. \frac{\delta E[\rho_s]}{\delta_s(\mathbf{r})\delta_s(\mathbf{r}')} \right|_{\rho_s=\rho(t)} \delta(t - t'), \quad (3.28)$$

που είναι τοπική στο χρόνο. Στο χώρο Fourier αυτή η αλληλεπίδραση δεν εξαρτάται από την ενέργεια. Είναι απλώς η δεύτερη παράγωγος ως προς τη στατική πυκνότητα. Η προσέγγιση αυτή είναι αρκετά γνωστή. Αντιστοιχεί στο όριο του μικρού πλάτους των εξισώσεων του χρονικά εξαρτημένου μέσου-πεδίου [17], δηλαδή στην προσέγγιση τυχαίας φάσης (random phase approximation (RPA)), ή στα υπερρευστά συστήματα στην ημισωματιδιακή RPA (QRPA). Χρησιμοποιείται ευρέως στην πυρηνική φυσική. Στην σχετικιστική περίπτωση έχουμε την σχετικιστικές εκδοχές RRPA[69] και QRPA[164] με πολλές εφαρμογές στη βιβλιογραφία[70, 165, 166]

Σε αυτήν την ενότητα θα αναφερθούμε σε μεθόδους που επεκτείνονται πέρα από την προσέγγιση του χρονικά εξαρτώμενου μέσου-πεδίου. Ξεκινάμε με ένα μονοσωματιδιακό δυναμικό το οποίο διατηρεί τα χαρακτηριστικά μνήμης, ή αλλιώς, από μία ενεργειακά εξαρτημένη αυτό-ενέργεια $\Sigma(\omega)$. Στη γλώσσα των συναρτήσεων Green επιλύουν με κάποια προσέγγιση τη λεγόμενη εξίσωση Dyson[167], η οποία είναι μη-τοπική στο χρόνο και στο χώρο. Προς το παρόν είναι αδύνατο να εξαχθεί αυτή η μη-τοπικότητα από θεμελιακές αρχές: αντί γι' αυτό εισάγομε ένα μοντέλο με το οποίο χωρίζουμε την πλήρη αυτό-ενέργεια, η οποία λέγεται και *τελεστής μάζας*, σε δύο μέρη:

$$\Sigma(\omega) = \tilde{\Sigma} + \Sigma^{(e)}(\omega). \quad (3.29)$$

Το πρώτο κομμάτι είναι η στατική αυτό-ενέργεια $\tilde{\Sigma}$ που προέρχεται από τη στατική θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας. Περιέχει τα γνωστά αυτό-συνεπή βαθμωτά, διανυσματικά δυναμικά όπως και το δυναμικό που αντιστοιχεί στις συσχετίσεις ζεύγους, της πυρηνικής βασικής κατάστασης. Το δεύτερο κομμάτι $\Sigma^{(e)}(\omega)$ περιλαμβάνει όλα τα υπόλοιπα, και συγκεκριμένα την εξάρτηση από την ενέργεια. Θα προσεγγιστεί από τα συνήθη διαγράμματα της σύζευξης σωματιδίου ή ημισωματιδίου με τις δονήσεις. Υπολογίζονται μαζί με τις κυματοσυναρτήσεις των φωνονίων που προκύπτουν από αυτό-συνεπής RPA ή QRPA. Με αυτόν τον τρόπο έχουμε ένα μοντέλο για την ενεργειακά εξαρτημένη αυτό-ενέργεια, η οποία εξαρτάται μόνο από ένα στατικό συναλλοίωτο συναρτησοειδές πυκνότητας και είναι ελεύθερο από επιπρόσθετες παραμέτρους. Στη συνέχεια θα συζητήσουμε τις λεπτομέρειες, και πιο συγκεκριμένα, τον τρόπο επίλυσης της εξίσωσης Dyson και τις συνέπειες της ενεργειακής εξάρτησης της αυτό-ενέργειας.

3.2.2 Φαινόμενα σύζευξης ημισωματιδίου-δόνησης στη δομή πυρηνικών φλοιών

Στις προσεγγίσεις που βασίζονται στην έννοια των συναρτησοειδών πυκνότητας, μονοσωματιδιακές ιδιότητες, όπως οι ενέργειες και τα φασματοσκοπικά πλάτη, είναι τα βασικά συστατικά για την περιγραφή των πυρηνικών μαζών, των ιδιοτήτων σχάσης και της απόκρισης σε διάφορα εξωτερικά πεδία. Με τη σειρά του, οι τελευταίες ποσότητες είναι ουσιώδες τμήμα της πυρηνικής φυσικής που υπεισέρχεται σε αστροφυσικές εφαρμογές όπως η αντίδραση *r-process* σε μελέτες πυρηνοσύνθεσης[168] οι οποίες απαιτούν ακριβής πληροφορίες για αρκετούς πυρήνες συμπεριλαμβανομένων και εξωτικών πυρήνων. Έχειδειχτεί πρόσφατα ότι η δομή των φλοιών στους πυρήνες με ακραίες τιμές του λόγου N/Z αποκλίνουν από τη συνηθισμένη εικόνα και οι μαγικοί αριθμοί φαίνεται να αλλάζουν συναρτησικά των N και Z [169] στην περιοχή των νετρονιακών και πρωτονιακών γραμμών υπερχειλίσης (*drip lines*). Αυτά και μια σειρά άλλα θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα (για μία ανασκόπηση βλ.[170]) έχουν δείξει ότι συνηθισμένες έννοιες στην κατανόηση της δομής των πυρηνικών φλοιών πρέπει να αναθεωρηθούν.

Η δομή των φλοιών στους υπερβαρείς πυρήνες αποτελεί ακόμη μία πρόκληση για τα μικροσκοπικά μοντέλα: για να γίνει οριοθέτηση των χασμάτων ανάμεσα στους σφαιρικούς φλοιούς σε αυτήν την περιοχή του πυρηνικού χάρτη, είναι απαραίτητο να καθοριστούν οι περιοχές σταθερότητας αυτών των πυρήνων. Μέχρι στιγμής, δεν υπάρχει γενική συναίνεση για το κλείσιμο των σφαιρικών φλοιών πάνω από τον αριθμό πρωτονίων $Z = 82$ και νετρονίων $N = 126$: προβλέψεις για μαγικούς αριθμούς τους, $Z = 114$, $Z = 120$ ή $Z = 126$ για τα πρωτόνια και $N = 162$ ή $N = 184$ για τα νετρόνια, μπορούν να βρεθούν στη βιβλιογραφία[171–173] Το κλείσιμο των φλοιών στους αριθμούς $Z = 120$ και $N = 162$ που προβλέπεται από τα σχετικιστικά και κάποια από τα Skyrme μοντέλα μέσου-πεδίου φαίνεται να έχουν σχέση με την κεντρική ελάττωση στην κατανομή της πυρηνικής πυκνότητας [171, 174] Το στοιχείο με ατομικό αριθμό $Z = 120$ αποτελεί μία πρόκληση για μελλοντικά πειράματα καθώς βρίσκεται στα όρια της πρόσβασης με αντιδράσεις κρύας σύντηξης, με αποτέλεσμα να απαιτούνται ακριβείς εκτιμήσεις για τα χαρακτηριστικά του από τα θεωρητικά μοντέλα.

Οι προβλέψεις που γίνονται με βάση μοντέλα μέσου-πεδίου δεν περιλαμβάνουν, όμως, συσχετίσεις που ενδέχεται να παίζουν σημαντικό ρόλο στην περιοχή των υπέρ-βαρέων πυρήνων όπου τα αναμενόμενα χάσματα των σφαιρικών φλοιών είναι αρκετά μικρότερα (2–3 MeV) από τα αντίστοιχα σε ελαφρύτερους πυρήνες και οι συσχετίσεις ζεύγους υπερρευστής φύσης να υπάρχουν ακόμη και σε κλειστούς φλοιούς. Σαν συνέπεια, έχει βρεθεί στα άρθρα [158] και [159] ότι οι υπερβαρείς πυρήνες είναι πολύ μαλακά αντικείμενα: έχουν ένα πολύ πλούσιο φάσμα από χαμηλές συλλογικές δονήσεις (φωνόνια). Οπότε, οι συσχετίσεις λόγω της σύζευξης ημισωματιδίου-δόνησης γίνονται ο επόμενος σημαντικός μηχανισμός που

έχει ιδιαίτερη επιρροή στη δομή των φλοιών[159]. Μια άλλη σημαντική συνέπεια της QVC είναι ότι οι κύριοι όροι στη διόρθωση λόγω δονήσεων στην ολική ενέργεια είναι αρνητικοί, δηλαδή οδηγούν σε ισχυρότερη σύζευξη[17], κάτι που σημαίνει ότι θεωρητικά τέτοιου είδους πυρήνες να μπορεί σταθεροποιούνται όχι μόνο μέσω της δομής των φλοιών αλλά και από τις δονήσεις[159].

3.2.3 Χρονικές και χωρικές μη-τοπικότητες στον μονοσωματιδιακό τελεστή μάζας

Οι βαθμοί ελευθερίας των μεμονωμένων σωματιδίων στους πυρήνες χαρακτηρίζονται από τις μονοσωματιδιακές ενέργειες και τις πιθανότητες κατάληψης (ή τα φασματοσκοπικά πλάτη) που μπορούν να καθοριστούν πειραματικά από αντιδράσεις μεταφοράς ή εκδίωξης ενός νουκλεονίου. Στα μικροσκοπικά μοντέλα πολλών-σωμάτων αυτές οι ποσότητες υπεισέρχονται στο πολύ γνωστό ανάπτυγμα Lehman συνάρτησης Green για ένα σώμα στο υπόβαθρο ενός συστήματος N -σωμάτων πάνω στις ιδιοσυναρτήσεις ενός συστήματος $N \pm 1$ -σωμάτων[175]:

$$G(\xi, \xi'; \varepsilon) = \sum_n \frac{(\Psi(\xi))_{0n} (\Psi^\dagger(\xi'))_{n0}}{\varepsilon - (E_n^{(N+1)} - E_0^N) + i\delta} + \sum_m \frac{(\Psi^\dagger(\xi'))_{0m} (\Psi(\xi))_{m0}}{\varepsilon + (E_m^{(N-1)} - E_0^N) - i\delta}, \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} (\Psi^\dagger(\xi))_{n0} &= \langle \Phi_n^{(N+1)} | \Psi^\dagger(\xi) | \Phi_0^{(N)} \rangle, \\ (\Psi^\dagger(\xi))_{m0} &= \langle \Phi_m^{(N-1)} | \Psi(\xi) | \Phi_0^{(N)} \rangle, \end{aligned} \quad (3.31)$$

όπου $\delta \rightarrow +0$, $\Phi_0^{(N)}$, $\Phi_n^{(N)}$ είναι οι πολυ-σωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις της βασικής κατάστασης και της διεγερμένης κατάστασης n του συστήματος των N -σωμάτων, $E_0^{(N)}$, $E_n^{(N)}$ είναι οι ενέργειες της βασικής και της διεγερμένης κατάστασης αντιστοίχως, και η μεταβλητή ξ περιλαμβάνει το σύνολο των μονοσωματιδιακών μεταβλητών σε μία αυθαίρετη αναπαράσταση. Οι αριθμητές στην εξ.3.30 δίνουν τα φασματοσκοπικά πλάτη των καταστάσεων n . Για τις προσεγγίσεις μέσου-πεδίου, όπως οι (σχετικιστικοί) Hartree ή Hartree-Fock (RHF), αυτά τα πλάτη παίρνουν τις τιμές 0 (1) για τις άδειες (κατειλημμένες) καταστάσεις. Για τις προσεγγίσεις μέσου-πεδίου που περιλαμβάνουν και συσχετίσεις ζεύγους υπέρρευστου τύπου, όπως οι Hartree-Bogoliubov (RHB) ή Hartree-Fock-Bogoliubov (RHFB) αυτά τα πλάτη παίρνουν κλασματικές τιμές ανάμεσα στο 0 και το 1. Οι κυματοσυναρτήσεις πολλών-σωμάτων είναι ορίζουσες τύπου Slater των μονοσωματιδιακών κυματοσυναρτήσεων. Στην αναπαράσταση αυτών των συναρτήσεων,

η συνάρτηση Green ενός-σώματος της προσέγγισης μέσου-πεδίου έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\tilde{G}_{k_1 k_2}^{\eta_1 \eta_2}(\varepsilon) = \delta_{k_1 k_2} \delta_{\eta_1 \eta_2} \tilde{G}_{k_1}^{\eta_1}(\varepsilon), \quad \tilde{G}_{k_1}^{\eta_1}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \eta_1 E_{k_1} + i\eta_1 \delta}, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (3.32)$$

Σε αυτό το σημείο και στις ακόλουθες εφαρμογές ο χώρος των Dirac σπινόρων $|\psi_k^\eta\rangle$ που διαγωνοποιούν την RHB Χαμιλτονιανή:

$$\mathcal{H}_{RHB} |\psi_k^\eta\rangle = \eta E_k |\psi_k^\eta\rangle \quad (3.33)$$

αποτελεί τη βάση στην οποία δουλεύουμε. Σε αυτήν την περίπτωση $\xi = \{k, \eta\}$, όπου k είναι το σύνολο των μονοσωματιδιακών κβαντικών αριθμών του σφαιρικού σχετικιστικού μέσου-πεδίου (RMF) και $\eta \pm 1$ διαχωρίζει τις άνω και κάτω συνιστώσες στον χώρο των ημισωματιδίων Bogoliubov. Συγκρίνοντας τις εξ.3.32 και 3.30, μπορεί να δει κανείς ότι οι ενέργειες E_k αντιστοιχούν στις ενεργειακές διαφορές στους παρανομαστές της εξίσωσης 3.30. Η συνάρτηση Green 3.32 και η RHB Χαμιλτονιανή συνδέονται με την ακόλουθη εξίσωση τελεστών:

$$(\varepsilon - \mathcal{H}_{RHB}) \tilde{G}(\varepsilon) = 1 \quad (3.34)$$

Η Χαμιλτονιανή \mathcal{H}_{RHB} μπορεί να γραφτεί ως:

$$\mathcal{H}_{RHB} = \begin{pmatrix} h^{\mathcal{D}} - m - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^{\mathcal{D}*} + m + \lambda \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

όπου λ είναι το χημικό δυναμικό το οποίο μετريέται από το όριο του συνεχούς φάσματος, m είναι η μάζα ενός νουκλεονίου και Δ είναι το χάσμα ζευγαρώματος. Σε αυτήν την έρευνα θα εφαρμόσουμε την QVC σε συστήματα όπου διατηρούνται αναλλοίωτα κάτω από τη χρονική αναστροφή και τα ρεύματα εξαφανίζονται. Στην περίπτωση αυτή, η μονοσωματιδιακή Χαμιλτονιανή Dirac γίνεται:

$$h^{\mathcal{D}} = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + \beta(m + \tilde{\Sigma}). \quad (3.36)$$

Ο όρος $\tilde{\Sigma}$ είναι η αυτο-ενέργεια του σχετικιστικού μέσου-πεδίου

$$\tilde{\Sigma}(\mathbf{r}) = \sum_m \Gamma_m \phi_m(\mathbf{r}) \quad (3.37)$$

και περιέχει, γενικά, την άθροιση πάνω σε όλα τα πεδία των μεσονίων ϕ_m με τους κόμβους σύζευξης Γ_m να υπολογίζονται στη στατική περίπτωση. Ένα δυναμικό κομμάτι χρονικά εξαρτώμενο που επεκτείνεται πέρα από το μέσο-πεδίο μπορεί να ενσωματωθεί ως ένα επιπρόσθετο δυναμικό του οποίου ο μετασχηματισμός

Fourier $\Sigma^{(e)}(\varepsilon)$ είναι συνάρτηση της μεταβλητής της εξωτερικής ενέργειας. Υπό την παρουσία αυτού το δυναμικού, η εξίσωση τελεστών για τη συνάρτηση Green ενός σωματιδίου γίνεται:

$$\left(\varepsilon - \mathcal{H}_{RHB} - \Sigma^{(e)}(\varepsilon) \right) G(\varepsilon) = 1. \quad (3.38)$$

Στην αναπαράσταση των Dirac σπινόρων $|\psi_k^\eta\rangle$ όλες οι ποσότητες της εξίσωσης 3.38 είναι 2×2 υπερπίνακες στον χώρο των Bogoliubov ημισωματιδίων[161]:

$$\sum_{\eta=\pm 1} \sum_k \left((\varepsilon - \eta_1 E_{k_1}) \delta_{\eta_1 \eta} \delta_{k_1 k} - \Sigma_{k_1 k}^{(e)\eta_1 \eta}(\varepsilon) \right) G_{kk_2}^{\eta \eta_2}(\eta) = \delta_{\eta_1 \eta_2} \delta_{k_1 k_2}, \quad (3.39)$$

όπου υποδεικνύονται από τους δείκτες η, η_i . Η μορφή του συναρτησοειδούς της αυτο-ενέργειας $\Sigma^{(e)}$ καθορίζεται από τη σύζευξη ημισωματιδίου-δόνησης που δίνει τη κυρίαρχη διόρθωση πόλωσης [141] στην αδιατάρακτη κίνηση των ημισωματιδίων στο μέσο-πεδίο. Η QVC συνυπολογίζει της μεγάλης εμβέλειας συσχετίσεις ανάμεσα στα νουκλεόνια λόγω της ανταλλαγής κβάντων συλλογικών διεγέρσεων (φωνόνια ή δονήσεις). Εδώ ακολουθούμε την εκδοχή του σχετικιστικού μοντέλου της QVC το οποίο αναπτύχθηκε στην έρευνα. [159] γενικεύοντας την προσέγγιση στην αναφ. [92] για υπέρρευστα συστήματα. Στη βάση των $|\psi_k^\eta\rangle$ τα στοιχειά πίνακα της $\Sigma^{(e)}$ δίνονται από τη σχέση:

$$\Sigma_{k_1 k}^{(e)\eta_1 \eta}(\varepsilon) = \sum_{\eta=\pm 1} \sum_{\eta_\mu=\pm 1} \sum_{k, \mu} \frac{\delta_{\eta_\mu, \eta} \gamma_{\mu; k_1 k}^{\eta_\mu; \eta_1 \eta} \gamma_{\mu; k_2 k}^{\eta_\mu; \eta_2 \eta^*}}{\varepsilon - \eta E_k - \eta_\mu (\Omega_\mu - i\delta)}, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (3.40)$$

Ο δείκτης k τυπικά διατρέχει όλο το φάσμα των μονών ημισωματιδιακών καταστάσεων περιλαμβανομένων και των αντισωματιδίων με αρνητική ενέργεια. Στον διπλάσιο χώρο των ημισωματιδίων δεν μπορούμε πλέον να διακρίνουμε ανάμεσα σε κατειλημμένες και κενές καταστάσεις μιας και όλες οι τροχιές είναι μερικώς κατειλημμένες. Σε πρακτικές εφαρμογές υποτίθεται ότι δεν υπάρχουν συσχετίσεις ζεύγους στη θάλασσα Dirac [176] και οι τροχιές με αρνητική ενέργεια αντιμετωπίζονται στην *no-sea* προσέγγιση, αν και έχει αποδειχτεί ότι σε υπολογισμούς πυρήνων με κλειστούς φλοιούς στην αναφ. [92], η αριθμητική συνεισφορά των διαγραμμάτων με ενδιάμεσες καταστάσεις k με αρνητική ενέργεια είναι πολύ μικρή λόγω του παρανομαστή μεγάλης ενέργειας στους αντίστοιχους όρους της αυτο-ενέργειας (3.40)[92]. Ο δείκτης μ στην εξίσωση (3.40) χαρακτηρίζει το σύνολο των φωνονίων που λαμβάνονται υπόψη, Ω_μ είναι οι συχνότητές τους, και $\eta_\mu = \pm 1$ χαρακτηρίζει τις συνιστώσες τους που κινούνται μπροστά ή πίσω. Οι *κόμβοι/κορυφές* $\gamma_{\mu; k_1 k_2}^{\eta_\mu; \eta_1 \eta_2}$ καθορίζουν τη σύζευξη των ημισωματιδίων με την κατάσταση συλλογικής δόνησης (φωνόνιο) μ και ορίζονται στις ακόλουθες ενότητες.

3.2.4 Διαχωρισμός των μονοσωματιδιακών καταστάσεων

Σε ένα σφαιρικό σύστημα, τα μόνα μη διαγώνια στοιχεία πίνακα της αυτό-ενέργειας (3.40) που δεν μηδενίζονται είναι αυτά που συνδέουν καταστάσεις με διαφορετικούς κύριους κβαντικούς αριθμούς ταλάντωσης. Με τη σειρά τους, αυτά τα στοιχεία είναι αρκετά μικρά έτσι ώστε η χρήση της διαγώνιας προσέγγισης να είναι δικαιολογημένη. Σε αυτήν την περίπτωση, η συνάρτηση Green είναι επίσης διαγώνια και στην αναπαράσταση $\{k\eta\}$ μπορεί να γραφτεί στην απλούστερη μορφή:

$$G_k^\eta(\varepsilon) = \sum_{\nu} \frac{\tilde{S}_k^{\eta(\nu)}}{\varepsilon - \eta E_k^{(\nu)}}, \quad (3.41)$$

η οποία δεν είναι άλλη από το ανάπτυγμα Lehmann (3.30) για τα διαγώνια στοιχεία την συνάρτησης Green ενός σώματος. Οι πόλοι $E_k^{(\nu)}$ αυτού του διαδότη καθορίζονται από την εξίσωση:

$$\varepsilon - \eta E_k - \Sigma_{kk}^{(e)\eta\eta}(\varepsilon) = 0. \quad (3.42)$$

Αντικαθιστώντας την (3.41) στην Εξ. 3.38 και παραγωγίζοντας ως προς την μεταβλητή ε , καταλήγουμε στην σχέση που δίνει τους φασματοσκοπικούς παράγοντες:

$$\tilde{S}_k^{\eta(\nu)} = \left(1 - \left. \frac{d\Sigma_{kk}^{(e)\eta\eta}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=E_k^{(\nu)}} \right)^{-1}, \quad (3.43)$$

με $\tilde{S}_k^{+(\nu)} = \tilde{S}_k^{-(\nu)} = \tilde{S}_k^{(\nu)}$. Οπότε κάθε κατάσταση του μέσου-πεδίου με κβαντικούς αριθμούς k και ενέργεια E_k χωρίζεται σε ένα σύνολο επιπέδων $\{\nu\}$ με τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς και ενέργειες $\lambda \pm E_k^{(\nu)}$. Αυτά τα επίπεδα κατανέμονται με βάση τους φασματοσκοπικούς παράγοντες $S_k^{(\nu)} = v_k^2 \tilde{S}_k^{(\nu)}$ (για τις καταστάσεις κάτω από την ενέργεια Fermi λ και $S_k^{(\nu)} = (1 - v_k^2) \tilde{S}_k^{(\nu)}$ (τις καταστάσεις πάνω από την ενέργεια Fermi), όπου v^2 είναι οι πιθανότητες κατάληψης Bogoliubov. Είναι εύκολο να δειχτεί ότι για την αυτό-ενέργεια της μορφής (3.40) ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις:

$$\sum_{\nu} \tilde{S}_k^{(\nu)} = 1, \quad E_k = \sum_{\nu} E_k^{(\nu)} \tilde{S}_k^{(\nu)}, \quad (3.44)$$

έτσι ώστε ο μέσος αριθμός σωματιδίων και η μέση ενέργεια των φραγμάτων να διατηρείται, όταν το τμήμα $\Sigma^{(e)}$ της αυτό-ενέργειας προστίθεται. Η παρούσα προσέγγιση έχει δύο περαιτέρω απλοποιήσεις: πρώτον, η αρχή του Pauli παραβιάζεται στην αυτό-ενέργεια (3.40) λόγω του γεγονότος ότι τα φωνόνια δημιουργούνται από ημίσωματίδια. Έχει αποδειχτεί (βλ. [177]) ότι η αρχή Pauli μπορεί να ληφθεί

υπόψη στο μοντέλο ημισωματιδίου φωνονίου εφαρμόζοντας τους ακριβείς μεταθέτες των τελεστών των ημισωματιδίων και των φωνονίων. Οι αντίστοιχες διορθώσεις είναι συγκρίσιμες για τις ενέργειες των συλλογικών καταστάσεων, αλλά για τη μονοσωματιδιακή δομή είναι πολύ μικρές[178]. Δεύτερον, οι σχηματισμοί πολλών φωνονίων μπορούν, θεωρητικά, να προκαλέσουν περαιτέρω διάσπαση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων. Όμως από τη στιγμή που η αυτό-ενέργεια ενός φωνονίου (3.40) παρέχει την κυρίαρχη συνεισφορά για τους σφαιρικούς πυρήνες, η μελέτη των σχηματισμών με πολλά φωνόνια ξεφεύγει από την παρούσα εργασία μιας και η εφαρμογή της QVC γίνεται σε σφαιρικούς πυρήνες.

Κεφάλαιο 4

Εξάρτηση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν στους $N=20$ ισότονους πυρήνες

4.1 Εισαγωγή

Ένας από τους βαθμούς ελευθερίας της μικροσκοπικής περιγραφής του πυρήνα, όπως αναφέρθηκε στην ενότητα (1.3), είναι το σπιν των σωματιδίων και η σύζευξη του με την τροχιακή στροφορμή. Η σημασία της σύζευξης σπιν-τροχιάς αναδεικνύεται από την αρχή της θεμελίωσης του μοντέλου φλοιών των ανεξάρτητων σωματιδίων[17]. Η ανακάλυψη των μαγικών αριθμών $Z = 2, 8, 20, 40, 82$ για τα πρωτόνια και $N = 2, 8, 20, 50, 82, 126$ για τα νετρόνια, προέκυψε από πειραματικά δεδομένα που έδειχναν ότι πυρήνες με αριθμό πρωτονίων ή νετρονίων ίσο με έναν από αυτούς τους αριθμούς έχουν τις εξής ιδιότητες

- Οι ενέργειες των πρώτων διεγερμένων καταστάσεων είναι υψηλότερες από αυτές γειτονικών πυρήνων
- Οι ενέργειες απομάκρυνσης ενός πρωτονίου ή ενός νετρονίου είναι πολύ μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες σε γειτονικούς πυρήνες
- Το σχήμα της βασικής τους κατάστασης είναι σφαιρικό.

Σε αναλογία με τους ηλεκτρονικούς φλοιούς σε συστήματα ατόμων, αυτές οι ιδιότητες αποδεικνύουν την ύπαρξη της δομής φλοιών τους οποίους καταλαμβάνουν τα νουκλεόνια στο εσωτερικό του πυρήνα. Η διαπίστωση αυτή αποτελεί στην ουσία τη βάση για την περιγραφή του πυρήνα σαν ένα σύστημα αποτελούμενο από μεμονωμένα ανεξάρτητα σωματίδια, τα οποία κινούνται υπό την επίδραση ενός

μέσου-πεδίου. Το πεδίο αυτό δημιουργείται εμμέσως από τη συνολική συνεισφορά όλων των νουκλεονίων, καταλαμβάνοντας συγκεκριμένες τροχιές. Η πρώτη διατύπωση του μοντέλου φλοιών έγινε με την εισαγωγή ενός φαινομενολογικού δυναμικού τύπου Woods-Saxon ή αρμονικού ταλαντωτή. Σε αυτήν την πρώτη προσέγγιση, η δομή φλοιών ήταν εμφανής όμως οι αριθμοί πλήρωσης δεν αναπαρήγαγαν σωστά όλους τους μαγικούς αριθμούς. Πολύ γρήγορα έγινε αντιληπτό από τη σημαντική συνεισφορά των Goerpert-Mayer [11] και Haxel, Jensen, και Suess [10], ότι η εισαγωγή στο δυναμικό ενός όρου σύζευξης σπιν τροχιάς με τη μορφή $f(r)\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$, είναι απαραίτητη για την σωστή αναπαραγωγή των μαγικών αριθμών. Η εισαγωγή αυτού του όρου αίρει τον εκφυλισμό διαχωρίζοντας ενεργειακά τις τροχιές με την ίδια στροφορμή l . Όσο μεγαλύτερη είναι η στροφορμή τόσο μεγαλύτερος είναι και ο ενεργειακός διαχωρισμός. Ακόμη ο ελκτικός χαρακτήρας ενός δυναμικού σπιν-τροχιάς σημαίνει ότι οι τροχιές με $j_> = l + \frac{1}{2}$ βρίσκονται ενεργειακά χαμηλότερα από αυτές με $j_< = l - \frac{1}{2}$, όπως παρατηρείται πειραματικά. Το αποτέλεσμα τελικά είναι ορισμένες τροχιές με $j_>$ να μετακινούνται τόσο πολύ, ώστε να είναι πιο κοντά στον φλοιό που σχηματίζεται από καταστάσεις με μικρότερη στροφορμή, τροποποιώντας έτσι την αρχική δομή των φλοιών.

Έχοντας αυτά ως βάση, αντιλαμβανόμαστε ότι η σύζευξη σπιν-τροχιάς αποτελεί ένα ουσιαστικό συστατικό και των ενεργειακών συναρτησοειδών πυκνότητας, τα οποία έχουν επίσης ως αφετηρία το μοντέλο των ανεξάρτητων μεμονωμένων σωματιδίων. Υπάρχουν δύο γενικές κατηγορίες τέτοιων συναρτησοειδών. Η πιο καθιερωμένη και αυτή που αναπτύχθηκε πρώτα, βασίζεται σε μη-σχετικιστικά συναρτησοειδή. Τα πιο διαδεδομένα αυτού του είδους είναι τα συναρτησοειδή τύπου Skyrme, βασισμένα σε αλληλεπιδράσεις μηδενικής εμβέλειας [7] και τα συναρτησοειδή τύπου Gogny με αλληλεπιδράσεις πεπερασμένης εμβέλειας [20]. Αργότερα εμφανίστηκαν συναλλοιώτα συναρτησοειδή πυκνότητας τα οποία αποτελούν το αντικείμενο της παρούσας διατριβής.

Τόσο τα σχετικιστικά όσο και τα μη-σχετικιστικά μοντέλα είναι αρκετά επιτυχή στην περιγραφή συλλογικών ιδιοτήτων και της δομής των πυρήνων σε όλο το μήκος της γραμμής της βήτα σταθερότητας, δίνοντας αρκετά παρόμοια αποτελέσματα. Υπάρχουν όμως σημαντικές διαφορές στη μελέτη ειδικών παρατηρήσιμων μεγεθών εξωτικών πυρήνων με μεγάλες τιμές ισοσπίν. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι η αποτυχία των συνηθισμένων συναρτησοειδών τύπου Skyrme, να αναπαράγουν την απότομη καμπή που παρατηρείται στην καμπύλη των ισοτοπικών μετατοπίσεων στις ακτίνες φορτίου του μολύβδου Pb. Αντιθέτως, τα σχετικιστικά συναρτησοειδή ήταν αρκετά επιτυχή στην αναπαραγωγή αυτού του φαινομένου [179]. Όπως αναγνωρίστηκε αργότερα, η διαφορά ανάμεσα στα αποτελέσματα των δύο προσεγγίσεων οφείλεται στο διαφορετικό τρόπο με τον οποίο αντιμετωπίζουν την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς. Στα μοντέλα Skyrme Hartree Fock (SHF) η σημαντική αυτή αλληλεπίδραση ανάμεσα στο σπιν και την τροχιά, συμπεριλαμβάνεται φαινομενολογικά στη μορφή του συναρτησοειδούς, με την

προσθήκη μιας επιπλέον παραμέτρου η οποία πρέπει να προσαρμοστεί με τις παραμέτρους των υπόλοιπων όρων σε πειραματικά δεδομένα. Αντιθέτως όπως θα δείξουμε στη συνέχεια, στα συναλλοιώτα συναρτησοειδή, η σύζευξη σπιν-τροχιάς προκύπτει με φυσικό τρόπο από τη δομή της εξίσωσης Dirac [180, 181].

Σε όλα τα καθιερωμένα μη-σχετικιστικά μοντέλα ο όρος του σπιν-τροχιάς προκαλείται από μία μηδενικής εμβέλειας αλληλεπίδραση δύο σωμάτων [7, 20, 59]. Ο αντίστοιχος όρος ανταλλαγής-Fock που προκύπτει, οδηγεί σε μία ισχυρή εξάρτηση των διαχωρισμών σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν. Αυτή η συγκεκριμένη εξάρτηση είναι η αιτία της αποτυχίας αναπαραγωγής της ανωμαλίας στις ισοτοπικές μετατοπίσεις που αναφέραμε πιο πριν. Στα συναλλοιώτα μοντέλα, η σύζευξη σπιν-τροχιάς είναι ένα φαινόμενο μονοσωματιδιακό, που προκύπτει απευθείας από την εξίσωση Dirac. Η ισοτοπική της εξάρτηση προέρχεται από το ρ -μεσόνιο. Η ισχύς της καθορίζεται από την ενέργεια συμμετρίας και συνήθως έχει ως αποτέλεσμα μόνο μια ασθενή ισοτοπική εξάρτηση [71, 180]. Η εισαγωγή του πρόσθετου βαθμωτού ισοδιανυσματικού δ -μεσονίου σε ορισμένα συναρτησοειδή, δεν αλλάζει πολύ αυτήν την κατάσταση [182].

Φυσικά, υπάρχει τρόπος να αποφευχθεί η ισχυρή εξάρτηση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν στα καθιερωμένα μη-σχετικιστικά συναρτησοειδή πυκνότητας. Αυτό μπορεί να γίνει αν θεωρήσουμε πως δεν ισχύει πλέον η υπόθεση ότι το συναρτησοειδές πυκνότητας εξάγεται από την αναμενόμενη τιμή μία φαινομενικής Χαμιλτονιανής, κάτι που οδηγεί αναπόφευκτα σε όρους ανταλλαγής. Με αυτόν τον τρόπο, προσπάθειες σε αυτήν την κατεύθυνση οδήγησαν στην δημιουργία τροποποιημένων συναρτησοειδών Skyrme, όπου η ισχύς του όρου-Fock χρησιμοποιείται σαν ελεύθερη παράμετρος. [183]. Με αυτήν τη μέθοδο, προτάθηκε η επέκταση των συναρτησοειδών Skyrme από τους Reinhard κ.α. [184] στην οποία χρησιμοποιούν την εξέλιξη των πυρηνικών ακτίνων σε σχέση με τον αριθμό νετρονίων N , για τα ισότοπα του μολύβδου Pb και του ασβεστίου Ca για την προσαρμογή των παραμέτρων. Τα αντίστοιχα συναρτησοειδή μπορούσαν πλέον να αναπαράγουν την ανωμαλία των ισοτοπικών μετατοπίσεων του μολύβδου Pb.

Ένα ακόμη παράδειγμα των διαφορών ανάμεσα στις δύο προσεγγίσεις στο κομμάτι του σπιν-τροχιάς έχει παρατηρηθεί στο άρθρο [185]. Διαπιστώθηκε τότε ότι στο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας μέσου-πεδίου, υπάρχει μία σημαντική μείωση στο δυναμικό του σπιν-τροχιάς σε ελαφρείς πυρήνες κοντά στη γραμμή υπερχειλίσης οι οποίοι έχουν μεγάλες τιμές ισοσπίν. Αυτό είχε σαν αποτέλεσμα τα ενεργειακά χάσματα ανάμεσα στα ίδια ζευγάρια σπιν-τροχιάς να μειώνονται για πυρήνες Ne και Mg, με την αύξηση του αριθμού των νετρονίων. Πάλι, όπως και στο προηγούμενο παράδειγμα, αποδείχτηκε ότι μία τροποποίηση στον όρο του σπιν-τροχιάς στα Skyrme συναρτησοειδή δίνει παρόμοια αποτελέσματα με το σχετικιστικό μέσο-πεδίο.

Πρόσφατα, έχει ανανεωθεί το ενδιαφέρον για τη μελέτη του τμήματος της πυρηνικής δύναμης που αφορά τη σύζευξη σπιν-τροχιάς. Πιο συγκεκριμένα πραγ-

ματοποιήθηκαν δύο εξειδικευμένα πειράματα [186, 187], στα οποία μελετήθηκε η δομή του σφαιρικού πυρήνα ^{34}Si με $N = 20$ νετρόνια. Η επιλογή των συγκεκριμένων ισότονων έγινε κυρίως για δύο λόγους. Ο πρώτος και πιο πρακτικός είναι το γεγονός ότι το μέγεθος ενεργειακών διαχωρισμών σπιν-τροχιάς είναι σχετικά μικρό, οπότε είναι πιο εύκολο να μελετηθούν ταυτόχρονα από το ίδιο πείραμα. Ο δεύτερος λόγος έχει να κάνει με την χαρακτηριστική δομή του ^{34}Si . Την ύπαρξη δηλαδή ενός κεντρικού κοιλώματος στην ακτινική κατανομή της πυρηνικής πυκνότητας, και η οποία εμφανίζεται και σε άλλους εξωτικούς πυρήνες, οι οποίοι αναφέρονται και ως "bubble" πυρήνες ή πυρήνες "φούσκες".

Προγενέστεροι θεωρητικοί υπολογισμοί [188] της δομής του ^{34}Si βασισμένοι τόσο σε σχετικιστικά όσο και σε μη-σχετικιστικά μοντέλα κατέδειξαν την ύπαρξη αυτού του ιδιαίτερου χαρακτηριστικού. Η ύπαρξη αυτού του κοιλώματος γύρω από το κέντρο της κατανομής πυρηνικής πυκνότητας, οφείλεται κυρίως στην αντίστοιχη μείωση της πυκνότητας πυρηνικού φορτίου στο κέντρο του πυρήνα λόγω του γεγονότος ότι η πρωτονιακή κατάσταση $2s_{1/2}$ είναι ουσιαστικά κενή. Αυτό ακριβώς αποδείχτηκε πειραματικά στο πολύ πρόσφατο πείραμα των Mutschler κ.ά. [187], όπου χρησιμοποίησαν την αντίδραση αφαίρεσης ενός πρωτονίου ($-1p$), για να ανιχνεύσουν το εσωτερικό του πυρήνα ^{34}Si και να δείξουν ότι η $2s_{1/2}$ είναι όντως κενή.

Κατά συνέπεια, ακολουθώντας την ταυτοποίηση του ^{34}Si ως πυρήνα τύπου "bubble", πραγματοποιήθηκε ένα εξειδικευμένο πείραμα από τους Burgunder κ.ά. [186] προσπαθώντας να θέσει πιο ακριβείς περιορισμούς στην ισχύ της δύναμης σπιν-τροχιάς. Αυτό έγινε μετρώντας τις ενέργειες και τους φασματοσκοπικούς παράγοντες των πρώτων $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ νετρονιακών καταστάσεων του πυρήνα ^{35}Si μέσα από την αντίδραση μεταφοράς (d, p). Συγκρίνοντας αυτά τα αποτελέσματα με προηγούμενα πειράματα πυρήνων στη αλυσίδα των ισότονων με αριθμό νετρονίων $N = 20$ όπως στο άρθρο [189], υπολογίστηκε η μείωση στο μέγεθος του ενεργειακού σχίσματος ανάμεσα στις $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ καταστάσεις. Αυτό το φαινόμενο έχει αποδοθεί στην ύπαρξη της κοιλότητας-bubble, δηλαδή της τοπικής μείωσης της πυκνότητας των πρωτονίων στο κέντρο του πυρήνα όταν μεταβαίνει κανείς από το ^{36}S στο ^{34}Si . Έτσι, αυτό το συγκεκριμένο αποτέλεσμα μπορεί να λειτουργήσει συμπληρωματικά με όσα αναφέρθηκαν προηγουμένως και με τις θεωρητικές μελέτες, για την περαιτέρω κατανόηση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στο πλαίσιο των μοντέλων του μέσου-πεδίου.

Υπάρχει ακόμη μια πρόσφατη μελέτη στο πλαίσιο της μη-σχετικιστικής προσέγγισης μέσου-πεδίου [190], όπου οι $2p$ και $1f$ νετρονιακοί διαχωρισμοί σπιν-τροχιάς στους $N = 20$ ισότονους ^{40}Ca , ^{36}S και ^{34}Si έχουν αναλυθεί για διάφορα συναρτησοειδή τύπου Skyrme και Gogny. Εμπνευσμένοι από αυτή την εργασία πραγματοποιήσαμε μία μελέτη, ακολουθώντας την αυτοσυνεπή προσέγγιση των σχετικιστικών συναρτησοειδών πυκνότητας των ίδιων πυρήνων καθώς και του ^{38}Ar . Επικεντρώνοντας στις πρώτες $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ καταστάσεις νε-

τρονίων, υπολογίζουμε τους διαχωρισμούς σπιν-τροχιάς των $2p$ και $1f$ τροχιακών και τους συγκρίνουμε με τα αντίστοιχα μη-σχετικιστικά και πειραματικά αποτελέσματα. Ο στόχος μας είναι να εξετάσουμε αρχικά αν η διαφορετική ενσωμάτωση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς ανάμεσα στα σχετικιστικά και μη-σχετικιστικά μοντέλα παρουσιάζει σημαντικές διαφορές σε αυτές τις συγκεκριμένες μετρήσεις, καθώς και ποια από τα σχετικιστικά μοντέλα παρέχουν την καλύτερη περιγραφή των πειραματικών αποτελεσμάτων.

Αρχικά αγνοούμε τις αλληλεπιδράσεις ζεύγους, όπως ακριβώς έχει γίνει και στην μη-σχετικιστική περίπτωση στο άρθρο [190] και υπολογίζουμε τις μονοσωματιδικές ενέργειες με το σχετικιστικό Hartree (relativistic Hartree model (RH)) μοντέλο, βασιζόμενοι σε διάφορα μοντέρνα μη-γραμμικά και εξαρτώμενα από την πυκνότητα συναλλοίωτα συναρτησοειδή πυκνότητας. Στη συνέχεια, προχωρούμε πέρα από αυτή τη βασική προσέγγιση με διάφορους τρόπους: μελετούμε την επίδραση των συσχετίσεων ζεύγους μέσα στο πλαίσιο του relativistic Hartree-Bogoliubov (RHB), συμπεριλαμβανόμε ταυσοτικές δυνάμεις στη θεωρία relativistic Hartree-Fock (RHF), και τέλος επεκτείνοντας πέρα από το μέσο-πεδίο εισάγουμε τη σύζευξη σωματιδίου-δόνησης particle vibration coupling (PVC).

4.2 Εξάρτηση του σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν

Όπως σημειώνεται και στα [180, 181], η σύζευξη σπιν-τροχιάς προκύπτει φυσικά στο σχετικιστικό πλαίσιο από την πρόσθεση των δύο μεγάλων πεδίων, του διανυσματικού πεδίου V το οποίο δημιουργείται κυρίως από τη μικρής εμβέλειας άπωση του ω μεσονίου, και του βαθμωτού πεδίου S το οποίο κυρίως προέρχεται από το ελκτικό σ μεσόνιο. Τα ισοδιανυσματικά μεσόνια δ και ρ συνεισφέρουν στην ισοδιανυσματική εξάρτηση των χασμάτων σπιν-τροχιάς [182].

Αυτό γίνεται εμφανές αν μελετήσουμε το μη-σχετικιστικό ανάπτυγμα της εξίσωσης Dirac [191] ο όρος του σπιν-τροχιάς αποκτάει τη μορφή

$$V_{S.O.} = \mathbf{W} \cdot (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma}) \quad (4.1)$$

με

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2M_{eff}^2} \nabla(V - S) \quad (4.2)$$

και την effective μάζα

$$M_{eff} = M - \frac{1}{2}(V - S) \quad (4.3)$$

Για να δείξουμε πως προκύπτει αυτός ο όρος αναλύουμε τους σπίνορες ψ σε

δύο συνιστώσες τη μεγάλη και τη μικρή

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} f(\mathbf{r}) \\ g(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

οι οποίες ικανοποιούν το σύστημα των εξισώσεων

$$\begin{pmatrix} M + S + V & \sigma \mathbf{p} \\ \sigma \mathbf{p} & -M - S + V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = (M + \epsilon) \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Σε αυτήν την περίπτωση οι μονοσωματιδιακές ενέργειες ϵ ξεκινούν από το συνεχές όριο.

Στο επόμενο βήμα απαλείφουμε τις μικρές συνιστώσες από τη δεύτερη εξίσωση αντιστρέφοντας τον τελεστή $(2M + \epsilon + S - V)$

$$g = \frac{q}{2M + \epsilon + S - V} \sigma \mathbf{p} f, \quad (4.6)$$

και στη συνέχεια εισάγοντας αυτήν την έκφραση στην πρώτη εξίσωση:

$$\left\{ \sigma \mathbf{p} \frac{q}{2M + \epsilon + S - V} \sigma \mathbf{p} + V + S \right\} f = \epsilon f. \quad (4.7)$$

Αυτή η εξίσωση περιλαμβάνει μόνο τη μεγάλη συνιστώσα. Δεν είναι πλέον ένα γραμμικό πρόβλημα ιδιοτιμών, όμως οι λύσεις της εξακολουθούν να αντιστοιχούν σε ακριβείς λύσεις της εξίσωσης Dirac. Από την άλλη αυτή η εξίσωση είναι ήδη αρκετά παρόμοια σε μορφή με την εξίσωση Schrödinger, με τη μάζα όμως να εξαρτάται από τις συντεταγμένες στον παρανομαστή του πρώτου όρου, όπως χρησιμοποιείται επίσης και στους Hartree-Fock υπολογισμούς με εξαρτώμενες από την πυκνότητα Skyrme δυνάμεις [7]. Η μόνη διαφορά είναι η εξάρτηση από το ϵ του παρανομαστή. Οι περισσότερες μη σχετικιστικές προσεγγίσεις αναπτύσσουν αυτόν τον παρανομαστή με κάποιον τρόπο. Είναι επίσης ξεκάθαρο ότι αν κάποιος θέλει να καταλήξει σε μια ισοδύναμη με τη Schrödinger εξίσωση, πρέπει να προχωρήσει σε ένα ανάπτυγμα γραμμικών όρων ως προς το ϵ . Αλλιώς δεν θα είναι ένα γραμμικό πρόβλημα ιδιοτιμών.

Οι μέθοδοι που υπάρχουν έχουν διαφορετική επιλογή για την μικρή παράμετρο αυτού του αναπτύγματος. Στην ατομική φυσική, όπου χρησιμοποιείται ο μετασχηματισμός Foldy-Wouthuysen, συχνά λαμβάνεται η $(\epsilon + S - V)/2M$ σαν μικρή ποσότητα. Στην πυρηνική φυσική τα πεδία S και V είναι και τα δύο της τάξης των αρκετών εκατοντάδων MeV, το S όντας ελκτικό και το V απωστικό. Οπότε

και η τιμή της διαφοράς $V - S$ είναι της τάξης των 750 MeV. Ο λόγος συνεπώς $(\epsilon + S - V)/2M \approx 40\%$ δεν μπορεί να θεωρηθεί αρκετά μικρός και έτσι πρέπει να βρεθεί κάποια άλλη ποσότητα για να γίνει το ανάπτυγμα. Ένας τρόπος να γίνει προτάθηκε από τον Reinhard στο άρθρο [192], όπου το ανάπτυγμα γίνεται στην ποσότητα $(\epsilon - S - V)/2M^*$ και σε μηδενικής τάξης όρους η μάζα $M^*(bmr)$ είναι η effective μάζα της προκύπτουσας εξίσωσης Schrödinger. Μιας και το άθροισμα $V + S$ είναι το βάθος του πυρηνικού δυναμικού και είναι της τάξης των 50 MeV, αυτός ο λόγος είναι σημαντικά μικρότερος. Είναι $\approx 5\%$ στο συνεχές όριο ($\epsilon = 0$). Προφανώς η ακρίβεια αυτού του ανάπτυγματος εξαρτάται από την ενεργειακή περιοχή που μας ενδιαφέρει. Στην περιοχή της ενέργειας Fermi, που είναι η κρίσιμη περιοχή για τους υπολογισμούς φαινομένων φλοιών, έχουμε περίπου $\epsilon \approx 7$ MeV και έτσι $(\epsilon - S - V)/2M^* \approx 4\%$.

Από τη στιγμή που ενδιαφερόμαστε για την περιοχή γύρω από την επιφάνεια Fermi, εισάγουμε έναν ελαφρώς διαφορετικό ορισμό της effective μάζας

$$M_{eff}(\mathbf{r}) = M - \frac{1}{2}(V(\mathbf{r}) - S(\mathbf{r})) \quad (4.8)$$

Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε τον λόγο $\epsilon/2M_{eff}$ για την μικρή ποσότητα γύρω από την οποία θα κάνουμε το ανάπτυγμα. Στην επιφάνεια Fermi είναι περίπου $\approx 0.6\%$ και πλησιάζει το μηδέν στο όριο του συνεχούς. Αυτός είναι ένας αρκετά μικρός αριθμός για τις ποσότητες γύρω από την επιφάνεια Fermi, συνεπώς το ανάπτυγμα σταματάει ήδη στους όρους μηδενικής τάξης, δηλαδή απαλείφουμε την παράμετρο ϵ στον παρονομαστή του πρώτου μέρους της 4.7. Στο τέλος καταλήγουμε στην ακόλουθη εξίσωση

$$\left\{ \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \frac{q}{2M_{eff}} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} + V + S \right\} f = \epsilon f. \quad (4.9)$$

Αυτή μπορεί να ξαναγραφτεί με τη μορφή μιας μη-σχετικιστικής εξίσωσης Schrödinger

$$\left\{ \mathbf{p} \frac{1}{2M_{eff}(\mathbf{r})} \mathbf{p} + V_{pot}(\mathbf{r}) + \frac{1}{(2M)^2} (\nabla V_{ls}(\mathbf{r})) (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma}) \right\} f_i = \epsilon_i f_i. \quad (4.10)$$

με μια εξαρτώμενη από τις συντεταγμένες μάζα $M_{eff}(\mathbf{r})$ 4.8, ένα κανονικό δυναμικό

$$V_{pot}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + S(\mathbf{r}) \quad (4.11)$$

και ένα δυναμικό σπιν-στροφορμής

$$V_{ls}(\mathbf{r}) = \frac{M}{M_{eff}(\mathbf{r})} (V(\mathbf{r}) - S(\mathbf{r})). \quad (4.12)$$

Στην περίπτωση σφαιρικής συμμετρίας ο όρος του σπιν-τροφορμής έχει την γνωστή μορφή

$$\frac{1}{2M^2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} V_{ls}(r) \right) \mathbf{l} \mathbf{s}. \quad (4.13)$$

Για να αποκτήσουμε μία πρώτη εκτίμηση της εξάρτησης από το ισοσπίν υιοθετούμε τις ακόλουθες προσεγγίσεις: (i) αγνοούμε μη-γραμμικές συζεύξεις νουκλεονίων καθώς και την εξάρτησης των σταθερών σύζευξης από την πυκνότητα, (ii) αγνοούμε τη διαφορά ανάμεσα στη βαθμωτή και τη διανυσματική πυκνότητα, και (iii) επιλύουμε τις εξισώσεις Klein-Gordon στην προσέγγιση της τοπικής πυκνότητας, δηλαδή αγνοούμε τις Λαπλασιανές.

Με αυτόν τον τρόπο για τα μοντέλα με σύζευξης μεσονίων έχουμε $C_i = g_i^2/m_i^2$

$$V - S = (C_\omega + C_\sigma)(\rho_p + \rho_n) + \tau_3(C_\rho + C_\delta)(\rho_p - \rho_n) \quad (4.14)$$

όπου για τα μοντέλα με σύζευξη μεσονίων $C_i = g_i^2/m_i^2$ ($i = \sigma, \omega, \delta, \rho$) και για τα μοντέλα σημειακής σύζευξης $C_i = \alpha_S, \alpha_V, \alpha_{TS}, \alpha_{TV}$. Αυτό οδηγεί στην

$$\mathbf{W}_\tau = W_1 \nabla \rho_\tau + W_2 \nabla \rho_{\tau' \neq \tau} \quad (4.15)$$

με W_1 πολύ κοντά στο W_2 :

$$\frac{W_1}{W_2} \approx 1 + 2 \frac{C_\rho + C_\delta}{C_\omega + C_\sigma} \quad (4.16)$$

Φυσικά, υπάρχει επίσης μία μικρή εξάρτηση από το ισοσπίν στην φαινομενική μάζα \tilde{M} , και εξαιτίας της εξάρτησης από την πυκνότητα οι παράμετροι αυτοί εξαρτώνται από την συντεταγμένη r . Όμως για τη σχετική περιοχή, για όλα τα μοντέλα, οι ισοδιανυσματικές σταθερές σύζευξης $C_\rho + C_\delta$ φτάνουν μόνο στο 10 – 20% των αντίστοιχων ισοβαθμωτών.

Γενικά η προσαρμογή των παραμέτρων σε πειραματικά δεδομένα πεπερασμένων πυρήνων, επιτρέπει τον προσδιορισμό μόνο της διαφοράς $C_\rho - C_\delta$ και όχι των C_ρ και C_δ ανεξάρτητα [182]. Συνεπώς το δ -μεσόνιο αγνοείται ($C_\delta = 0$) στα περισσότερα σετ παραμέτρων που είναι και τα πιο επιτυχή. Θεωρητικά το άθροισμα $C_\rho + C_\delta$ μπορεί να έχει μεγάλη τιμή, όπως συμβαίνει στην ισοβαθμωτή περίπτωση με πολύ μεγάλα βαθμωτά και διανυσματικά δυναμικά S και V , τα οποία ακυρώνουν το κανονικό μέσο πεδίο, προστίθενται όμως στον όρο σπιν-τροχιάς.

Στα μη-σχετικιστικά συναρτησοειδή τύπου Skyrme και Gogny ο όρος του σπιν-τροχιάς προκύπτει από μία μηδενικής εμβέλειας αλληλεπίδραση δύο σωμάτων της μορφής

$$V_{12}^{(SO)}(\mathbf{r}_{12}) = iW_0(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot (\hat{\mathbf{k}}^\dagger \times \delta(\mathbf{r}_{12})\hat{\mathbf{k}}) \quad (4.17)$$

με $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, and $\hat{\mathbf{k}} = -(i/2)(\nabla_1 - \nabla_2)$. Η παράμετρος W_0 , μαζί με τις υπόλοιπες παραμέτρους, καθορίζεται φαινομενολογικά μέσω προσαρμογής σε πεπερασμένους πυρήνες. Μιας και αυτοί είναι Hartree-Fock υπολογισμοί, ο όρος ανταλλαγής οδηγεί σε μια πολύ συγκεκριμένη εξάρτηση του όρου του σπιν-τροχιάς από το ισοσπιν που έχει τη μορφή της Εξ.(4.1) με,

$$\mathbf{W}_\tau(\mathbf{r}) = W_1 \nabla \rho_\tau + W_2 \nabla \rho_{\tau' \neq \tau}. \quad (4.18)$$

εδώ οι παράμετροι W_1 και W_2 είναι σταθεροί και εξαιτίας του όρου ανταλλαγής κανείς βρίσκει

$$\frac{W_1}{W_2} = 2. \quad (4.19)$$

Όπως βλέπουμε σε αυτόν τον καθιερωμένο φορμαλισμό των μη-σχετικιστικών δυνάμεων, δεν υπάρχει άμεση εξάρτηση από το ισοσπιν ή την πυκνότητα στον όρο του σπιν-τροχιάς, όμως ο όρος ανταλλαγής της δύναμης εισάγει μία ισχυρή έμμεση εξάρτηση από το ισοσπιν λόγω του τελεστή ανταλλαγής $\hat{P}^\tau = \frac{1}{2}(1 + \hat{\tau}_1 \cdot \hat{\tau}_2)$. Έχειδειχθεί ότι αυτή η εξάρτηση από το ισοσπιν προκαλεί σημαντικά προβλήματα στην αναπαραγωγή των ισοτοπικών διαφορών ανάμεσα στην πυρηνικές ακτίνες στην περιοχή του Pb, κάτι που δεν ισχύει για τα σχετικιστικά μοντέλα.

Βεβαίως, δεν είναι απαραίτητο η θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας για τους πυρήνες να ξεκινάει με μία Χαμιλτονιανή στην προσέγγιση Hartree-Fock. Θεωρητικά, μπορεί κάποιος να χρησιμοποιήσει γενικά συναρτησοειδή πυκνότητας, όπου η συνεισφορά της ανταλλαγής περιέχει μία ελεύθερη παράμετρο x_w . Στην περίπτωση αυτή το συναρτησοειδές πυκνότητας, π.χ. η αναμενόμενη τιμή της ενέργειας, καθορίζεται στην Hartree-προσέγγιση από έναν ελαφρώς τροποποιημένο όρο σπιν-τροχιάς [184, 193]

$$V_{SO} = iW_0 \frac{1}{2}(1 + x_w \hat{P}^\tau)(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \hat{\mathbf{k}}^\dagger \times \delta(\mathbf{r}_{12}) \hat{\mathbf{k}}. \quad (4.20)$$

Όταν το μονοσωματιδιακό πεδίο εξάγεται από αυτό το συναρτησοειδές καταλήγουμε με ένα δυναμικό σπιν-τροχιάς της μορφής (4.18) με $W_1 = W_0(1 + x_w)/2$, $W_2 = W_0/2$. Κάνοντας χρήση αυτού του τροποποιημένου Skyrme συναρτησοειδούς, δίνεται η δυνατότητα να αλλάξει η εξάρτηση του όρου σπιν-τροχιάς από το ισοσπιν μέσα από την παράμετρο x_w [184, 193]. Με αυτού του είδους την τροποποίηση κατέστη δυνατή η αναπαραγωγή των πειραματικών δεδομένων σχετικά με τις ισοτοπικές διαφορές στους Pb πυρήνες.

4.3 Λεπτομέρειες των αριθμητικών υπολογισμών

Στο σύνολο αυτής της έρευνας, η εξίσωση Dirac (2.22) και οι εξισώσεις Klein-Gordon (2.24α') επιλύονται με τη μέθοδο του αναπτύγματος σε σειρές. Πιο συ-

γκεκριμένα η μικρή και η μεγάλη συνιστώσα των Dirac σπινόρων και των μεσο-νικών πεδίων αναλύονται σε μία βάση που σχηματίζεται από τις ιδιοσυναρτήσεις του κβαντομηχανικού σφαιρικού ταλαντωτή (see Ref. [78]) με συχνότητα ταλάντωσης $\hbar\omega = 41A^{-1/3}$. Μιας και αυτές οι ιδιοσυναρτήσεις σχηματίζουν ένα άπειρο σύνολο, είναι απαραίτητο να θέσουμε ένα όριο στο μέγεθος της βάσης σε ένα συγκεκριμένο αριθμό κύριων φλοιών ταλάντωσης. Στην παρούσα εργασία το μέγιστο που λαμβάνουμε είναι $N_F = N_B = 20$ για τα πεδία φερμιονίων και μποζονίων αντίστοιχα. Όπως όμως συμβαίνει και στην αντίστοιχη μη σχετικιστική περίπτωση [190] η νετρονιακή τροχιά $1f_{5/2}$ στους πυρήνες ^{38}Ar και ^{36}S , καθώς και οι $1f_{5/2}$ και $2p_{1/2}$ τροχιές στον πυρήνα ^{34}Si είναι μη δέσμιες, για όλες τις δυνάμεις που μελετούμε. Έχουν δηλαδή θετική ενέργεια και ανήκουν στο συνεχές τμήμα του ενεργειακού φάσματος.

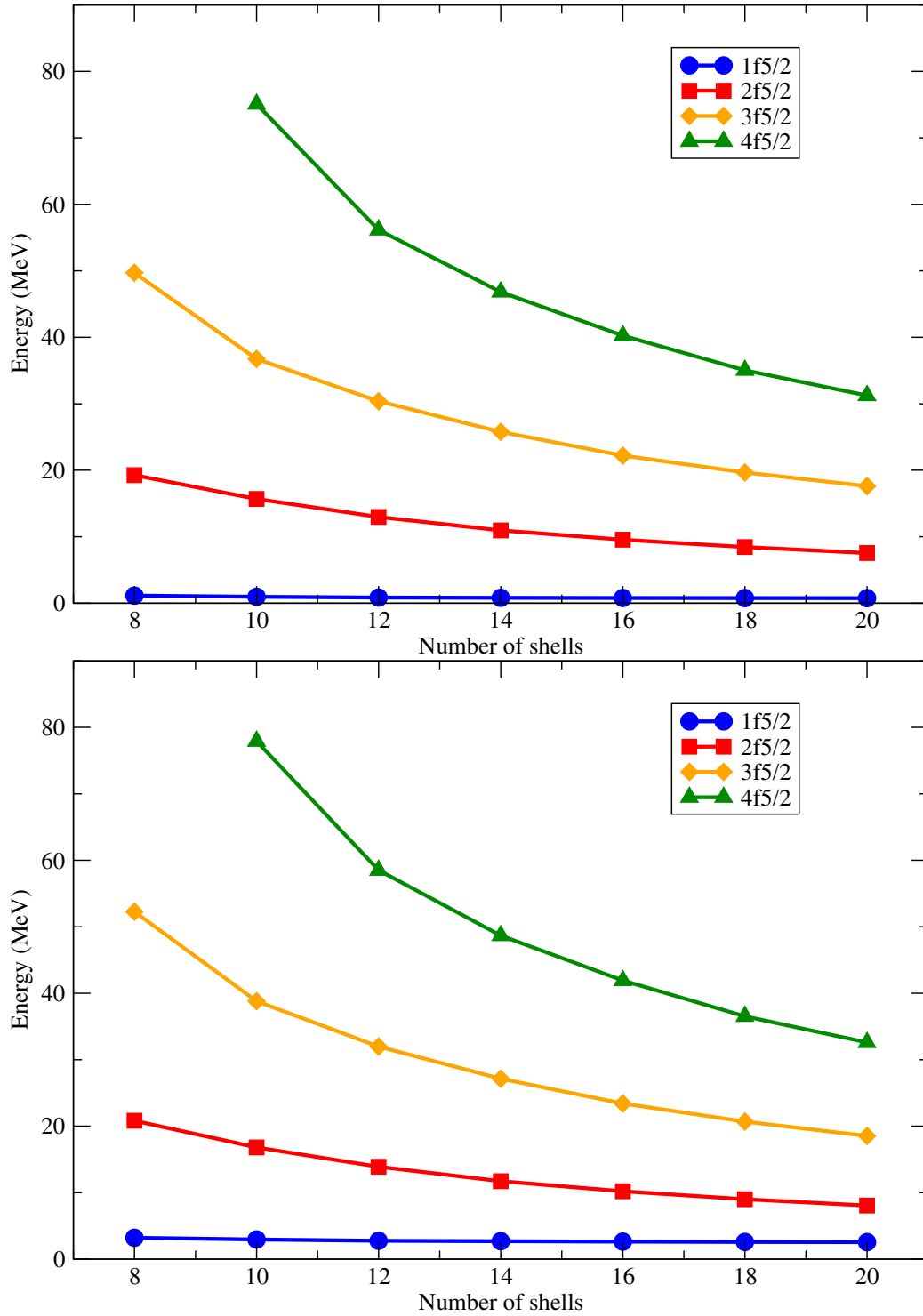
Για να καθορίσουμε τις ενέργειες των μη δέσμιων καταστάσεων ακολουθούμε δύο κριτήρια που χρησιμοποιούνται με ανάλογο τρόπο και στην μελέτη [190]. Πιο συγκεκριμένα, το πρώτο κριτήριο αναφέρει ότι οι ενέργειες των συγκεκριμένων μονοσωματιδιακών καταστάσεων, δεν πρέπει να αλλάζουν όταν αυξάνεται ο αριθμός των φλοιών. Το δεύτερο κριτήριο αναφέρει ότι, το ακτινικό προφίλ των κυματοσυναρτήσεων των αντίστοιχων καταστάσεων, πρέπει να είναι παρόμοιο με αυτό που έχουν οι ίδιες καταστάσεις σε πυρήνες όπου είναι δέσμιες.

Για να εξετάσουμε το πρώτο κριτήριο υπολογίσαμε όλες τις μονοσωματιδιακές ενέργειες στους αντίστοιχους πυρήνες, μεταβάλλοντας τον αριθμό των φλοιών από 8 έως 20. Στο Σχ.4.1 έχουμε σχεδιάσει την εξέλιξη των πρώτων τεσσάρων $f_{5/2}$ νετρονιακών τροχιών για τους πυρήνες ^{38}Ar και ^{36}S , ενώ στο Σχ.4.2 έχουμε προσθέσει και την εξέλιξη των πρώτων $p_{1/2}$ νετρονιακών τροχιών για τον πυρήνα ^{34}Si . Παρατηρούμε ότι για αρκετά μεγάλο αριθμό φλοιών, τόσο η $1f_{5/2}$ τροχιά στους τρεις πυρήνες όσο και η $2p_{1/2}$ στον ^{34}Si , μεταβάλλονται πολύ λίγο και συγκλίνουν σε μία συγκεκριμένη τιμή. Αυτό μας δίνει τη δυνατότητα να προσδιορίσουμε την ενέργειά τους, παρά το γεγονός ότι είναι μη δέσμιες καταστάσεις. Με βάση τα διαγράμματα αυτά βλέπουμε ότι για 20 φλοιούς έχουμε αρκετά ικανοποιητική σύγκλιση. Οπότε για την πραγματοποίηση των υπολογισμών χρησιμοποιήσαμε τον συγκεκριμένο αριθμό.

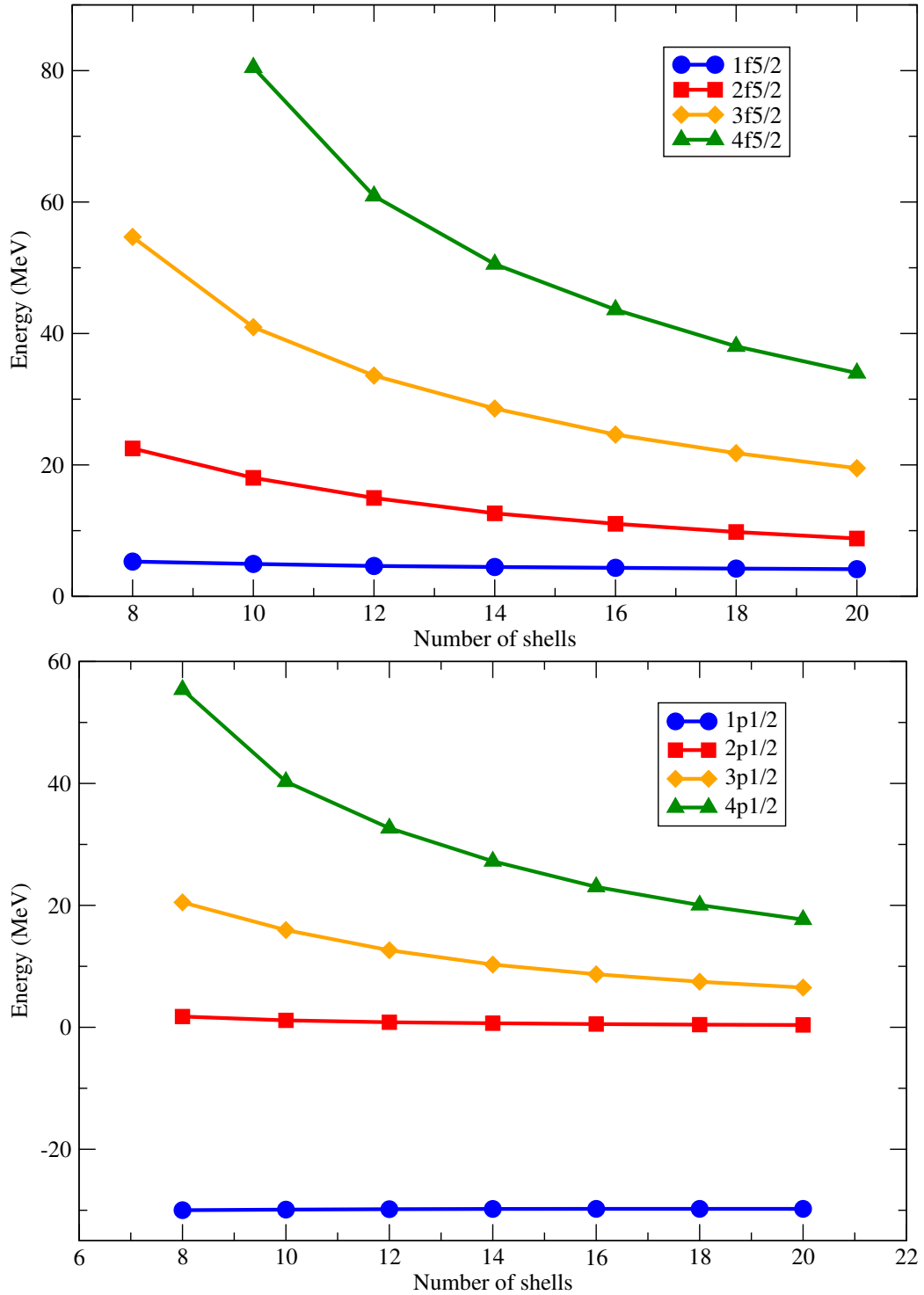
Για να εξετάσουμε το δεύτερο κριτήριο, έχουμε σχεδιάσει στο Σχ.4.3 τα ακτινικά προφίλ των κυματοσυναρτήσεων των $1f_{5/2}$ και $2p_{1/2}$ καταστάσεων υπολογισμένα με την δύναμη DD-ME2 για τον πυρήνα ^{40}Ca στον οποίο είναι δέσμιες και για τον πυρήνα ^{34}Si στον οποίο είναι μη δέσμιες. Βλέπουμε ότι έχουν παρόμοιο ακτινικό προφίλ στους δύο πυρήνες, συνεπώς και το δεύτερο κριτήριο ισχύει.

Στην περίπτωση των τανυστικών δυνάμεων (βλ.3.1.2) οι εξισώσεις Dirac-Hartree-Fock επιλύονται με τον ίδιο τρόπο αναπτύγματος σε στοιβάδες σφαιρικού ταλαντωτή όπως αναλύεται στα εργασίες [56, 140], καθώς και στοιχεία πίνακα δύο-σωμάτων του όρου ανταλλαγής υπολογίζονται σε αυτή τη βάση.

Για τον υπολογισμό με τη σύζευξη σωματιδίου-δόνησης, για το κομμάτι της

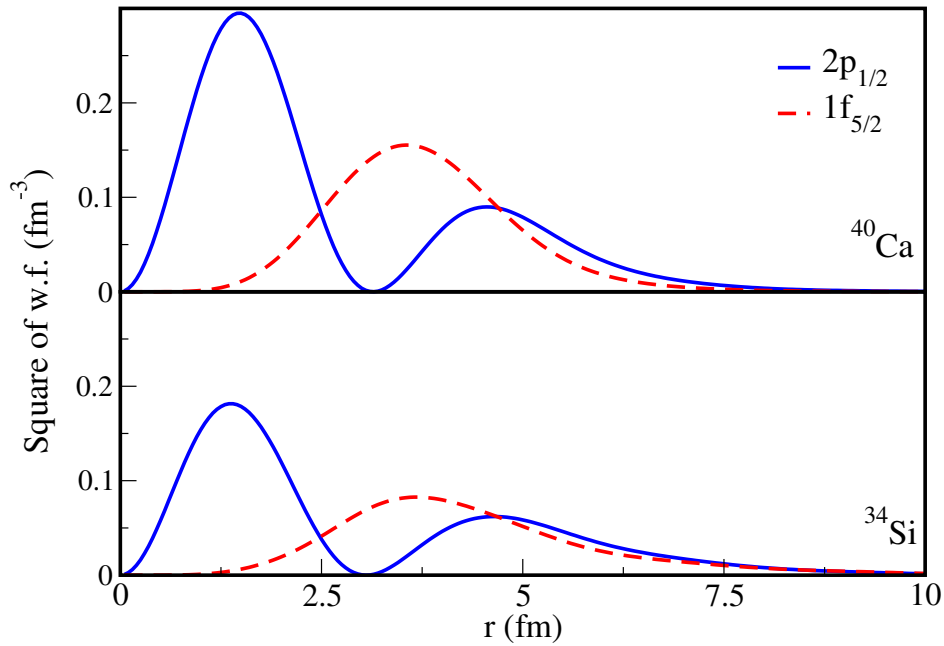


Σχήμα 4.1: Εξέλιξη της ενέργειας των νετρονιακών $f_{5/2}$ καταστάσεων στους πυρήνες ³⁸Ar και ³⁶S με την αύξηση του αριθμού των στοιβάδων



Σχήμα 4.2: Εξέλιξη της ενέργειας των νετρονιακών $f_{5/2}$ και $p_{1/2}$ καταστάσεων στον πυρήνα ^{34}Si με την αύξηση του αριθμού των στοιβάδων

δύναμης που αφορά τις συσχετίσεις ζεύγους χρησιμοποιήθηκε η λεγόμενη seniority force. Στην περίπτωση αυτή το δυναμικό ζευγαρώματος είναι πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα και οι εξισώσεις-RHB είναι ταυτόσημες με τις εξισώσεις τύπου RMF+BCS. Η ισχύς της σταθεράς σύζευξης της δύναμης ζευγαρώματος τροποποιείται με τέτοιο τρόπο, ώστε το χάσμα που προκύπτει να είναι ίσο με $\Delta = 2$ MeV που είναι κοντά στην εμπειρική τιμή.



Σχήμα 4.3: Ακτινικό προφίλ των κυματοσυναρτήσεων $1f_{5/2}$ και $2p_{1/2}$ των νετρονιακών καταστάσεων για το ^{40}Ca και το ^{34}Si .

4.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τα αριθμητικά αποτελέσματα της παρούσας μελέτης στη σειρά των $N = 20$ ισότονων πυρήνων. Για τον υπολογισμό των μονοσωματιδιακών ενεργειών χρησιμοποιήσαμε τρεις διαφορετικούς τύπους συναλλοίωτων συναρτησοειδών πυκνότητας, όπως αυτοί περιγράφονται στην ενότητα 2 και είναι τα εξής.

- Συναρτησοειδή μη γραμμικής αλληλεπίδρασης μεταξύ των μεσονίων: NL3[48], NL3*[194] και FSUGold[85].
- Συναρτησοειδή ανταλλαγής μεσονίων με σταθερές σύζευξης εξαρτώμενες από την πυκνότητα: DD-ME2[50] και DD-ME δ [60].

- Συναρτησοειδή σημειακής σύζευξης με σταθερές εξαρτώμενες από την πυκνότητα: DD-PC1[51] και PC-PF1[91].

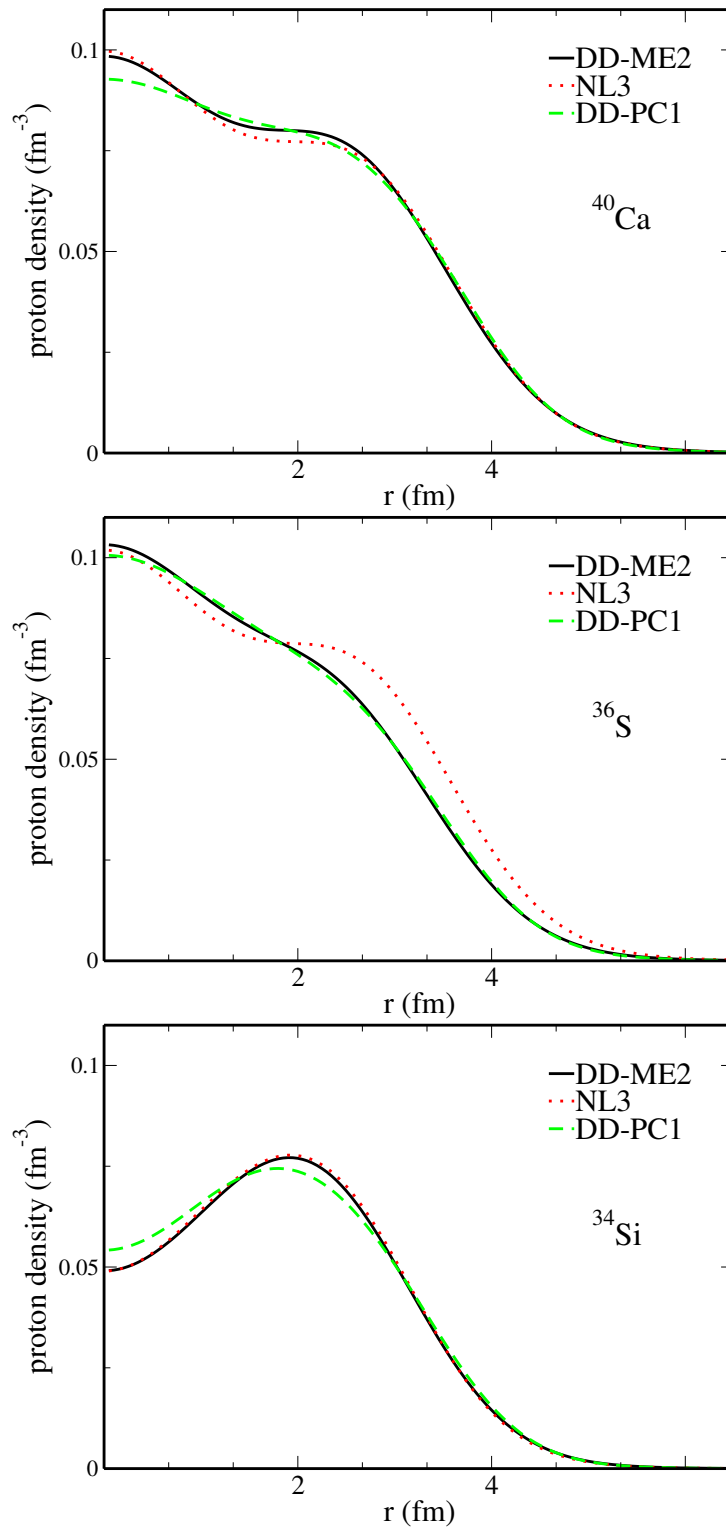
Ξεκινάμε από τον πυρήνα ^{40}Ca με $Z = 20$ πρωτόνια, όπου τα τελευταία τέσσερα πρωτόνια συμπληρώνουν την $1d_{3/2}$ τροχιά. Αφαιρώντας δύο πρωτόνια πηγαίνουμε στον πυρήνα ^{38}Ar και αφαιρώντας δύο ακόμη πηγαίνουμε στον πυρήνα ^{36}S που έχει τα τελευταία δύο πρωτόνια στην τροχιά $2s_{1/2}$. Η κυματοσυνάρτηση αυτής της κατάστασης είναι συγκεντρωμένη στο κέντρο του πυρήνα οπότε όταν αφαιρούνται τα δύο αυτά πρωτόνια και καταλήγουμε στον πυρήνα ^{34}Si , έχουμε σαν αποτέλεσμα μία κεντρική μείωση στην πυκνότητα των πρωτονίων και τον σχηματισμό μίας κοιλότητας γύρω από το κέντρο της πυκνότητας του πυρηνικού φορτίου.

Για να δείξουμε καλύτερα αυτό το φαινόμενο έχουμε σχεδιάσει την πυκνότητα για τους πυρήνες ^{40}Ca , ^{36}S και ^{34}Si σε συνάρτηση με την ακτινική απόσταση από το κέντρο του κάθε πυρήνα. Σε κάθε διάγραμμα έχουμε χρησιμοποιήσει ενδεικτικά των διαφορετικών τύπων συναρτησοειδών, τις δυνάμεις NL3, DD-ME2 και DD-PC1. Πιο συγκεκριμένα στο Σχ.4.4 δείχνουμε την πυκνότητα των πρωτονίων, στο Σχ.4.5 την πυκνότητα των νετρονίων και στο Σχ.4.6 τη συνολική πυκνότητα για κάθε πυρήνα. Όπως περιγράφηκε παρατηρούμε ότι στους πυρήνες ^{40}Ca , και ^{36}S και οι τρεις πυκνότητες έχουν παρόμοιο προφίλ. Στην περίπτωση του ^{34}Si βλέπουμε ότι κοντά στο κέντρο η πυκνότητα πρωτονίων ελαττώνεται σημαντικά. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα και η συνολική πυκνότητα του συγκεκριμένου πυρήνα να έχει διαφορετικό προφίλ σε σχέση με τους πρώτους δύο.

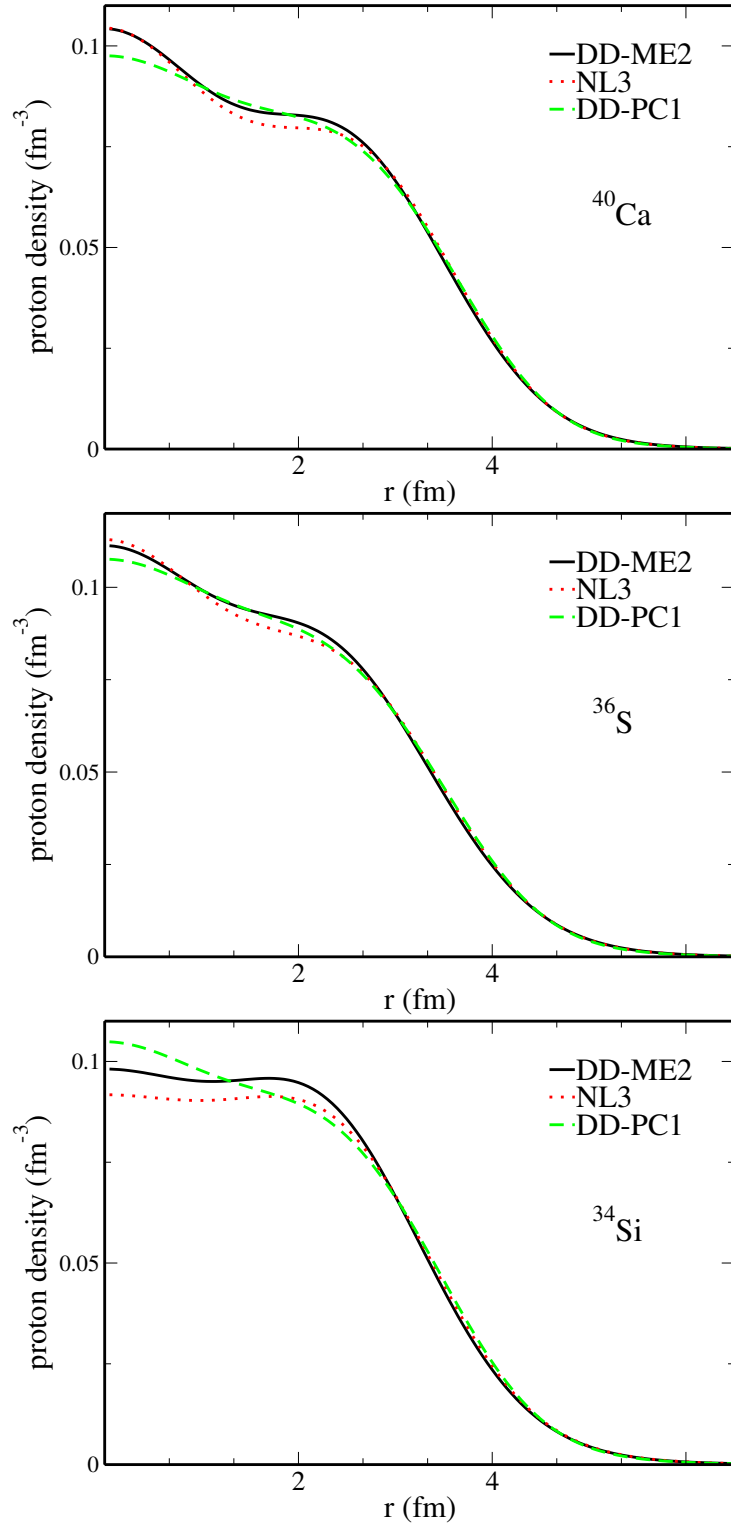
Η πειραματική επιβεβαίωση αυτού του φαινομένου πραγματοποιήθηκε πολύ πρόσφατα από τους Mutschler *κ.α.* στο [187], όπου μελετήθηκε η αντίδραση αφαίρεσης ενός πρωτονίου $^{34}\text{Si}(-1p)^{33}\text{Al}$. Παρόλο που η πληρότητα μιας μονοσωματιδιακής κατάστασης δεν είναι απευθείας παρατηρήσιμο μέγεθος, η τιμή της μπορεί να υπολογιστεί με βάση πειραματικά δεδομένα, όπως περιγράφεται στην ενότητα των μεθόδων στο συγκεκριμένο άρθρο. Συνεπώς, για την πρωτονιακή τροχιά $2s_{1/2}$ στον πυρήνα ^{34}Si υπολόγισαν την πληρότητα στο 0.17(3), η οποία είναι μόνο στο 10% της πληρότητας της ίδιας τροχιάς στον πυρήνα ^{36}S που είναι 1.7(4), έτσι έχουμε μία διαφορά ίση με $\Delta(2s_{1/2}) = 1.53$.

Αυτή η μέτρηση ήρθε να συμπληρώσει ουσιαστικά την προηγούμενη πειραματική έρευνα των Burgunder *κ.α.* [186] όπου μετρήθηκαν οι ενέργειες και οι φασματοσκοπικοί παράγοντες των πρώτων $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ νετρονιακών τροχιών στον πυρήνα ^{34}Si , μέσω της αντίδρασης μεταφοράς $^{34}\text{Si}(d, p)^{35}\text{Si}$. Μαζί με τα αποτελέσματα των [189, 195], αποκαλύφθηκε πράγματι, ότι ο ενεργειακός διαχωρισμός σπιν-τροχιάς $2p = 2p_{1/2} - 2p_{3/2}$ μειώνεται σημαντικά και απότομα από τον πυρήνα ^{36}S στον ^{34}Si .

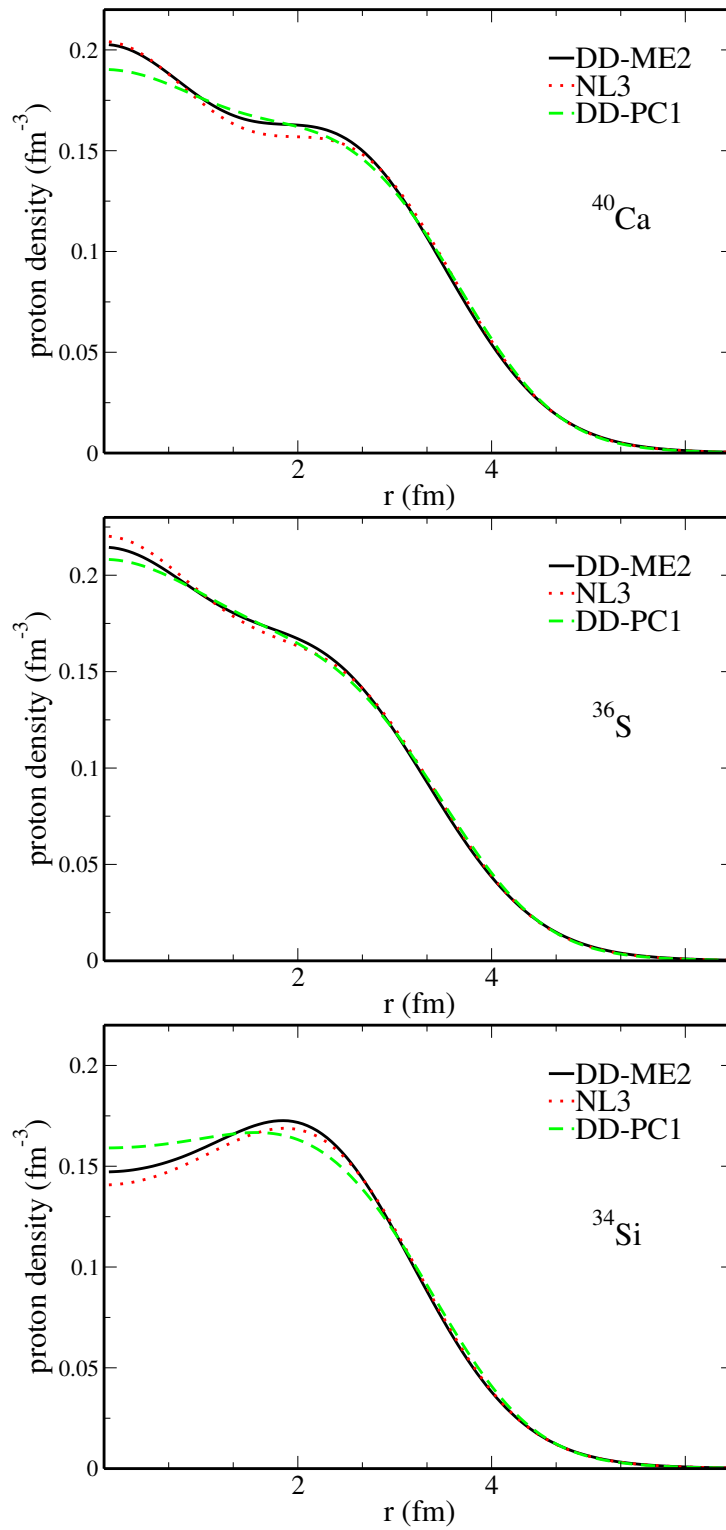
Το συγκεκριμένο φαινόμενο, είναι ο κύριος λόγος για τον οποίο επιλέχτηκε αυτή η σειρά πυρήνων, για την πειραματική μελέτη της εξάρτησης της αλληλε-



Σχήμα 4.4: Πυκνότητα πρωτονίων για τους πυρήνες ^{40}Ca , ^{36}S και ^{34}Si , με τις δυνάμεις NL3, DD-ME2 και DD-PC1.



Σχήμα 4.5: Πυκνότητα νετρονίων για τους πυρήνες ^{40}Ca , ^{36}S και ^{34}Si , με τις δυνάμεις NL3, DD-ME2 και DD-PC1.



Σχήμα 4.6: Συνολική πυκνότητα για τους πυρήνες ⁴⁰Ca, ³⁶S και ³⁴Si, με τις δυνάμεις NL3, DD-ME2 και DD-PC1.

πίδρασης σπιν-τροχιάς από την πυκνότητα και το ισοσπίν. Όπως διατυπώνεται ξεκάθαρα και στις προαναφερθείσες έρευνες [186, 187] τα αποτελέσματα των δύο αυτών πειραμάτων είναι ιδανικά για την περαιτέρω διερεύνηση του ρόλου της δύναμης σπιν-τροχιάς στη θεωρία των πυρηνικών συναρτησοειδών πυκνότητας. Πιο συγκεκριμένα, η ακραία ασυμμετρία μεταξύ νετρονίων και πρωτονίων στην περίπτωση του ^{34}Si και η επακόλουθη μεγάλη και ξαφνική ελάττωση στο μέγεθος του p -spitting, μπορεί να παρέχει έναν καλύτερο περιορισμό της δύναμης σπιν-τροχιάς. Ειδικά από τη στιγμή που αυτά τα αποτελέσματα επικεντρώνουν στις συνεισφορές που προέρχονται κυρίως από την εξάρτηση από την πυκνότητα και από το ισοσπίν και ελαχιστοποιούν την επίδραση άλλων παραγόντων.

Όπως αναλύεται και στην ενότητα 4.2, ο τρόπος με τον οποίο υπεισέρχεται ο όρος της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στα σχετικιστικά συναρτησοειδή πυκνότητας είναι ουσιωδώς διαφορετικός από τις μη σχετικιστικές περιπτώσεις. Ο λόγος W_1/W_2 παίζει πολύ σημαντικό ρόλο. Στην πρώτη περίπτωση είναι εξαρτώμενος από την πυκνότητα και έχει τιμή κοντά στη μονάδα, ενώ από την άλλη στα μη σχετικιστικά συναρτησοειδή έχει σταθερή τιμή ίση με 2. Όπως έχει ήδη σημειωθεί, αυτή είναι η κύρια αιτία των τόσο διαφορετικών αποτελεσμάτων, ανάμεσα στις δύο περιπτώσεις σε υπολογισμούς που επηρεάζονται από τους διαχωρισμούς σπιν-τροχιάς.

Υπολογισμοί με βάση μη σχετικιστικά μοντέλα παρουσιάζονται στο άρθρο [190], όπου χρησιμοποιήθηκε το συναρτησοειδές τύπου Skyrme SLy5 [196] και το συναρτησοειδές τύπου Gogny D1S [114], καθώς και συγκεκριμένες επεκτάσεις αυτών με τανυστικές δυνάμεις. Μελετήθηκαν οι ενεργειακοί διαχωρισμοί των νετρονιακών f και p τροχιών για τους πυρήνες ^{40}Ca , ^{36}S , και ^{34}Si , στο επίπεδο του Hartree-Fock μέσου-πεδίου. Στον Πίνακα 4.1 φαίνονται τα αποτελέσματα χωρίς τις συγκεκριμένες τανυστικές επεκτάσεις και θα τα χρησιμοποιήσουμε για σύγκριση με τα αποτελέσματα από τη δική μας έρευνα.

4.4.1 Καθαρό Μέσο-Πεδίο

Ξεκινάμε την μελέτη με απλούς υπολογισμούς μέσου-πεδίου χωρίς την εισαγωγή συσχετίσεων ζεύγους. Επιλύουμε τις σχετικιστικές εξισώσεις Dirac Hartree, εξετάζοντας τη συμπεριφορά των μονοσωματιδιακών νετρονιακών ενεργειών στη σειρά των $N = 20$ ισότονων πυρήνων. Σε αυτήν την περίπτωση οι μονοσωματιδιακές τροχιές είναι είτε πλήρως κατειλημμένες ή εντελώς άδειες. Οπότε η πληρότητα της πρωτονιακής κατάστασης $2s_{1/2}$ είναι 2 για τους πυρήνες ^{40}Ca , ^{38}Ar , και ^{36}S και 0 για τον ^{34}Si . Αυτό θα μας δώσει την καθαρή επίδραση του σχετικιστικού μέσου-πεδίου στους διαχωρισμούς σπιν-τροχιάς.

Τα αποτελέσματα σε αυτήν την περίπτωση δίνονται στον Πίνακα 4.2. Στο πάνω μέρος δείχνουμε τις $f = 1f_{7/2} - 1f_{5/2}$ και $p = 2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ ενεργειακές διαφορές για κάθε συγκεκριμένο συναρτησοειδές και για κάθε πυρήνα ^{40}Ca , ^{38}Ar ,

	⁴⁰ Ca		³⁶ S		³⁴ Si	
Splitting	<i>f</i>	<i>p</i>	<i>f</i>	<i>p</i>	<i>f</i>	<i>p</i>
SLy5	8.39	2.19	7.88	2.01	5.86	1.21
D1S	8.66	2.16	7.98	1.88	6.37	1.07

	⁴⁰ Ca → ³⁶ S		³⁶ S → ³⁴ Si	
Splitting	<i>f</i>	<i>p</i>	<i>f</i>	<i>p</i>
SLy5	6%	8%	26%	40%
D1S	8%	13%	20%	43%

Πίνακας 4.1: Μεγέθη και σχετικές μειώσεις των νετρονιακών *p* και *f* διαχωρισμών για τη μη σχετικιστική περίπτωση βλ.[190].

³⁶S, και ³⁴Si. Στο κάτω τμήμα παρουσιάζουμε τις σχετικές μειώσεις των *f* και *p* διαχωρισμών πάλι για κάθε ένα συναρτησοειδές, πρώτα όπως πηγαίνουμε από τον ⁴⁰Ca στον ³⁶S και έπειτα όπως πηγαίνουμε από το ³⁶S στον ³⁴Si. Επίσης δείχνουμε στην τελευταία γραμμή τις αντίστοιχες πειραματικές τιμές των διαχωρισμών και των μειώσεων για ⁴⁰Ca[195], ³⁶S[189], και ³⁴Si[186]. Πιο συγκεκριμένα, για τον πυρήνα ⁴⁰Ca χρησιμοποιούμε τις κεντρικές τιμές των κατανομών των αντίστοιχων φραγμάτων. Αυτά τα δεδομένα μπορούν να συγκριθούν απευθείας με τα δικά μας θεωρητικά αποτελέσματα. Στις άλλες δύο περιπτώσεις αυτό δεν είναι δυνατό, καθώς οι πειραματικές τιμές των κεντρικών σημείων δεν είναι γνωστές. Συνεπώς για τη διαφορά $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ τόσο στο ³⁶S όσο και στο ³⁴Si χρησιμοποιούμε τις τιμές των κυρίων φραγμάτων κάθε τροχιάς. Για την τροχιά $1f_{5/2}$ στον πυρήνα ³⁶S η κύρια συνεισφορά προέρχεται από τρία φράγματα γύρω από την ενέργεια των 5.61 MeV με συνολικό φασματοσκοπικό παράγοντα $SF = 0.36$, και στον πυρήνα ³⁴Si από την ευρύτερη κατανομή κοντά στα 5.5 MeV με φασματοσκοπικό παράγοντα $SF = 0.32$. Αν και γνωρίζουμε ότι τα τελευταία δεδομένα δεν είναι απευθείας συγκρίσιμα με τα δικά μας αποτελέσματα, τα χρησιμοποιούμε ως ένδειξη για το μέγεθος της μείωσης που θα έπρεπε να περιμένουμε.

Μία σχηματική απεικόνιση της εξέλιξης των ενεργειακών διαφορών που υπολογίσαμε για τις τρεις δυνάμεις NL3, DD-ME2 και DD-PC1, φαίνεται στο Σχ. 4.7, όπου τα ορθογώνια (a), (b), (c) και (d) αντιστοιχούν στους πυρήνες ⁴⁰Ca, ³⁸Ar ³⁶S και ³⁴Si. Η τροχιά $1f_{7/2}$ θεωρείται σαν βάση για τις υπόλοιπες ενώ αναφέρονται και οι αντίστοιχες ενεργειακές διαφορές ανάμεσα στις *p* και *f* καταστάσεις. Συλ-

	^{40}Ca			^{38}Ar		^{36}S		^{34}Si	
	$\frac{W_1}{W_2}$	f	p	f	p	f	p	f	p
NL3	1.11	7.21	1.69	6.90	1.77	6.43	1.80	6.08	0.71
NL3*	1.11	7.07	1.76	6.77	1.85	6.30	1.90	5.92	0.75
FSUGold	1.03	7.14	1.38	6.75	1.37	6.18	1.31	5.80	0.60
DD-ME2	1.07	7.40	1.71	7.04	1.72	6.52	1.65	6.12	0.87
DD-ME δ	1.32	6.97	1.51	6.97	0.93	6.36	1.32	5.96	0.80
DD-PC1	1.07	7.83	1.77	7.57	1.74	7.12	1.64	6.61	0.88
PC-PF1	1.11	6.88	1.76	6.64	1.87	6.25	1.93	5.87	0.84
Exp.		6.98	1.66			5.61	1.99	5.5	1.13

	$^{40}\text{Ca} \rightarrow ^{36}\text{S}$		$^{36}\text{S} \rightarrow ^{34}\text{Si}$	
	f	p	f	p
NL3	11%	-6%	5%	61%
NL3*	11%	-8%	6%	60%
FSUGold	13%	5%	6%	54%
DD-ME2	12%	3%	6%	47%
DD-ME δ	9%	13%	6%	40%
DD-PC1	9%	8%	7%	46%
PC-PF1	9%	-10%	6%	57%
Exp.	20%	-20%	2%	43%

Πίνακας 4.2: Ενεργειακοί διαχωρισμοί σπιν-τροχιάς σε MeV (πάνω μέρος) και οι σχετικές μειώσεις (κάτω μέρος) για τις f και p νετρονιακές τροχιές χωρίς συσχετίσεις ζεύγους.

λογικά, στο Σχ.4.8, έχουν σχεδιαστεί για κάθε ένα από τα μοντέλα που χρησιμοποιήσαμε μαζί με τα αποτελέσματα των μη σχετικιστικών μοντέλων, διαγράμματα της μεταβολής των p και f διαχωρισμών καθώς αλλάζει ο μαζικός αριθμός A των

πυρήνων.

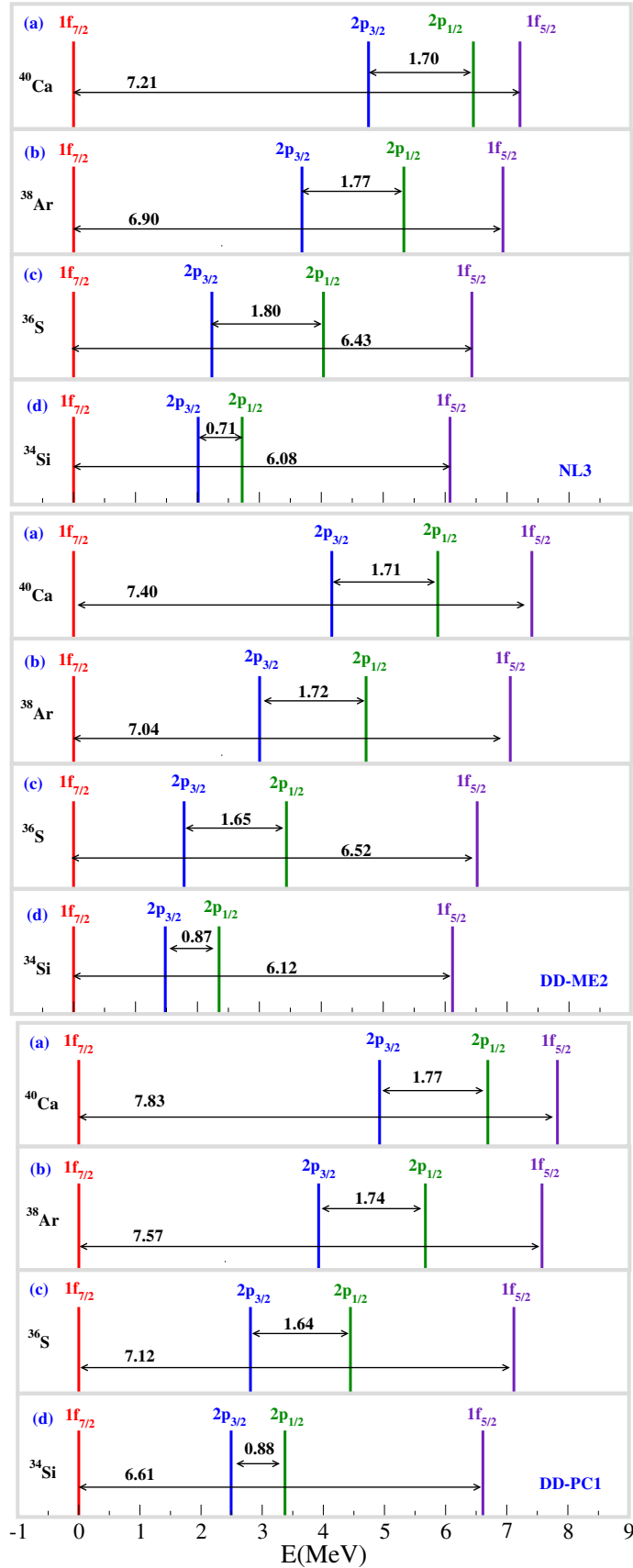
Γενικά βλέπουμε ότι για όλες τις δυνάμεις το μέγεθος των f μεταβάλλεται σχετικά ελάχιστα και σταδιακά και είναι κοντά στα 6-7 MeV. Κάτι αντίστοιχο ισχύει και στους p διαχωρισμούς για τους τρεις πρώτους πυρήνες με την ενεργειακή διαφορά να είναι ανάμεσα στα 1.6-1.8 MeV. Ενώ στον τελευταίο πυρήνα της αλυσίδας μειώνεται δραστικά και πέφτει στα 0.7-0.8 MeV.

Πιο ειδικά, σε αυτήν την αρχική προσέγγιση του σχετικιστικού μέσου-πεδίου, παρατηρούμε τις εξής λεπτομέρειες. Μία σταδιακή μείωση στους f διαχωρισμούς της τάξης των 0.3-0.4 MeV σε κάθε βήμα καθώς κινούμαστε προς τα κάτω στην σειρά των ισότονων πυρήνων. Αυτό είναι εμφανές και από το γεγονός ότι οι καμπύλες που δείχνουν την εξέλιξη των f διαχωρισμών στο Σχ. 4.8 έχουν παρόμοια κλίση για κάθε ξεχωριστό συναρτησοειδές. Η συνολική σχετική μείωση είναι ανάμεσα στο 15-19% και στο 5-7% σε κάθε βήμα.

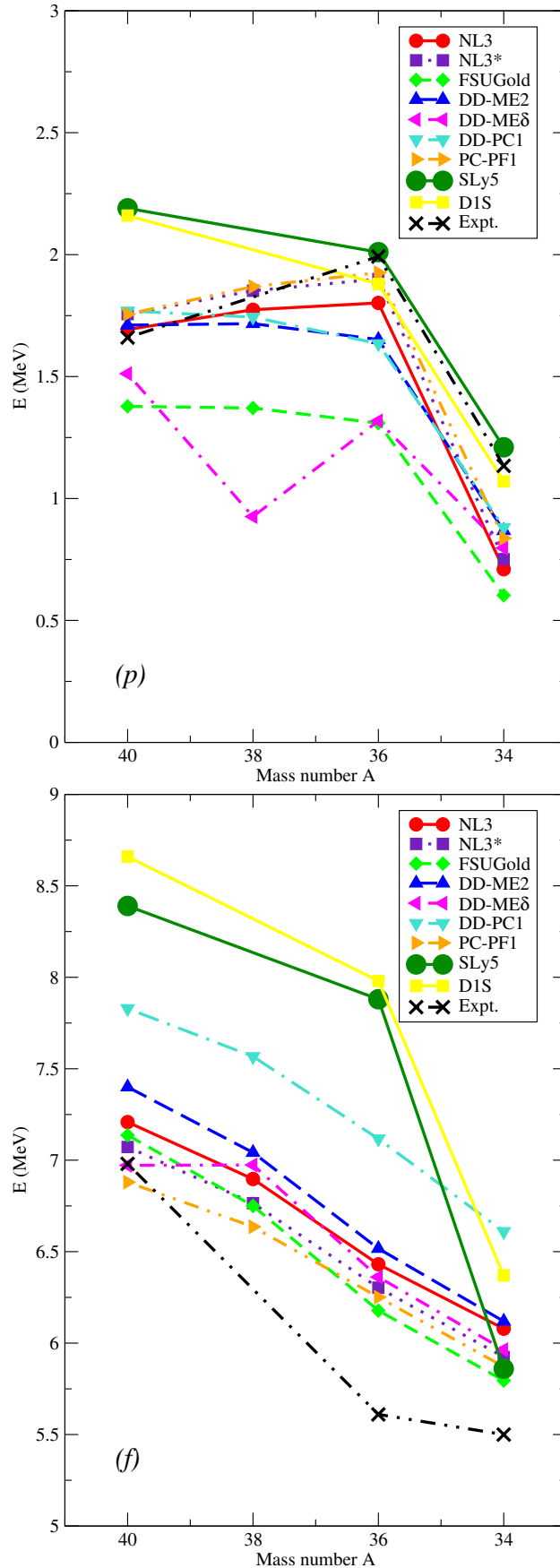
Σε αντίθεση με τους f διαχωρισμούς, οι p διαχωρισμοί μεταβάλλονται ελάχιστα για τους τρεις πρώτους πυρήνες της αλυσίδας, με μόνη εξαίρεση το συναρτησοειδές DD-MEδ. Μόνο όταν μεταβαίνουμε από το ^{36}S στο ^{34}Si βρίσκουμε μία μεγάλη μείωση για τους p διαχωρισμούς της τάξης του 40% με 60%. Ποιοτικά, αυτή η εικόνα είναι σύμφωνη με το πείραμα. Όμως, το απόλυτο μέγεθος των p διαχωρισμών στον πυρήνα ^{34}Si για τα περισσότερα από τα μοντέλα μας είναι μικρότερο από την αντίστοιχη πειραματική τιμή. Αυτό οδηγεί σε ορισμένες περιπτώσεις σε ακόμη μεγαλύτερη σχετική ελάττωση από αυτή που θα έπρεπε να περιμένουμε.

Στην περίπτωση των μη σχετικιστικών υπολογισμών μέσου-πεδίου, τα αποτελέσματα που δίνονται στον Πίνακα 4.1, δείχνουν μία παρόμοια ποιοτική συμπεριφορά. Από τον πυρήνα ^{40}Ca στον ^{36}S οι f και p διαχωρισμοί μειώνονται πολύ λίγο με σχετικές μεταβολές 6% και 8% σε 8% και 13%. Στη μετάβαση από τον ^{36}S στον ^{34}Si βλέπουμε επίσης την ξαφνική και μεγάλη ελάττωση στο μέγεθος του p διαχωρισμού με σχετική μεταβολή 43%, μαζί όμως και με μία μεγάλη μείωση στο μέγεθος των f διαχωρισμών.

Όταν συγκρίνουμε τα σχετικιστικά με τα μη σχετικιστικά αποτελέσματα, παρατηρούμε τις ακόλουθες διαφορές. Γενικά, τα μεγέθη των διαχωρισμών σε όλα τα σχετικιστικά μοντέλα είναι μικρότερα από τους αντίστοιχους διαχωρισμούς στα μη σχετικιστικά SLy5 και D1S μοντέλα. Πιο συγκεκριμένα στους πυρήνες ^{40}Ca και ^{36}S , όπου η πυκνότητα των πρωτονίων έχει κανονικό προφίλ, δηλαδή δεν εμφανίζει κεντρική ελάττωση, η διαφορά στο μέγεθος των f διαχωρισμών είναι της τάξης των 1-2 MeV και στο μέγεθος των p διαχωρισμών γύρω στο 0.5 MeV. Κάτι που αποτυπώνεται και στο Σχ.4.8 από τη θέση των γραμμών που αντιστοιχούν στα μοντέλα SLy5 και D1S, και είναι πάντα πάνω από όλα τα σχετικιστικά.



Σχήμα 4.7: Απεικόνιση των τροχιών $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ ως προς την $1f_{7/2}$, για τους πυρήνες ^{40}Ca , ^{38}Ar , ^{36}S , ^{34}Si και τις δυνάμεις NL3, DD-ME2, DD-PC1



Σχήμα 4.8: Εξέλιξη των νετρονιακών p και f ενεργειακών διαχωρισμών σπιν-τροχιάς ως προς τον μαζικό αριθμό A , για το καθαρό μέσο-πεδίο

Στην ξεχωριστή περίπτωση του bubble πυρήνα ^{34}Si , οι f διαχωρισμοί ανάμεσα στις δύο κατηγορίες συναρτησοειδών, είναι στο ίδιο μέγεθος. Αυτό οφείλεται στη μεγαλύτερη σχετική μείωση που εμφανίζεται στις μη σχετικιστικές περιπτώσεις και απουσιάζει από τα σχετικιστικά μοντέλα. Ωστόσο, υπάρχει η διαφορά στους p διαχωρισμούς οι οποίοι είναι και εδώ μικρότεροι σε μέγεθος για όλα τα σχετικιστικά συναρτησοειδή. Αυτό μεταφράζεται σε μία σχετική μείωση των p διαχωρισμών στη μετάβαση από ^{36}S στο ^{34}Si , η οποία είναι πιο ενισχυμένη για τα περισσότερα σχετικιστικά μοντέλα σε σύγκριση με την αντίστοιχη μείωση για τα μη σχετικιστικά. (βλ. Πίνακες 4.1 και Σχ.4.2).

Για να κατανοήσουμε όλα αυτά τα αποτελέσματα πρέπει να ερευνήσουμε τον όρο σπιν-τροχιάς και ιδιαίτερα την εξάρτησή του από το ισοσπίν η οποία είναι πολύ σημαντική στην περίπτωση του ^{34}Si με τη μεγάλη ασυμμετρία νετρονίων προς πρωτόνια. Όπως συζητήθηκε και στην ενότητα 4.2, τόσο στα σχετικιστικά όσο και στα μη σχετικιστικά μοντέλα αυτός ο όρος μπορεί να γραφτεί προσεγγιστικά με τη μορφή της Εξ. (4.1)

$$V_{S.O.} = \mathbf{W} \cdot (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma}). \quad (4.21)$$

Όπου εδώ το \mathbf{W} δίνεται από την έκφραση

$$\mathbf{W}_\tau = W_1 \nabla \rho_\tau + W_2 \nabla \rho_{\tau' \neq \tau}. \quad (4.22)$$

Στους περισσότερους πυρήνες οι ιδιότητες της πυρηνικής δύναμης οδηγούν σε μία σχεδόν σταθερή πυκνότητα στο εσωτερικό του πυρήνα και μία διάχυση της πυκνότητας κοντά στην πυρηνική επιφάνεια, η οποία οδηγεί σε έναν σταδιακό μηδενισμό για μεγάλες τιμές τις απόστασης από το κέντρο. Η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς καθορίζεται κυρίως από την απόκλιση της πυκνότητας και, συνεπώς, από την διάχυση της επιφάνειας. Αυτό δημιουργεί ένα ελκτικό δυναμικό το οποίο είναι πιο ισχυρό κοντά στην επιφάνεια του πυρήνα. Οι τροχίες με μεγάλα ℓ έχουν επίσης και μεγαλύτερες τιμές του όρου ℓs . Επιπρόσθετα, είναι κυρίως συγκεντρωμένες κοντά στην επιφάνεια, συνεπώς, επηρεάζονται αρκετά από τον όρο σπιν-τροχιάς της πυρηνικής δύναμης. Αυτό δημιουργεί τους μεγάλους f διαχωρισμούς και τους αρκετά μικρότερους p διαχωρισμούς στους ^{40}Ca , ^{38}Ar , και ^{36}S πυρήνες.

Από την άλλη, στους πυρήνες που εμφανίζουν κεντρική ελάττωση στην πυκνότητα όπως ο ^{34}Si , αυτό παρέχει μία επιπλέον συνιστώσα του όρου σπιν-τροχιάς στο εσωτερικό του πυρήνα με αντίθετο όμως πρόσημο, μιας και η παράγωγος της πυκνότητας είναι θετική στην αρχή. Οπότε, μαζί με το ελκτικό πηγάδι κοντά στην επιφάνεια έχουμε παράλληλα μία απωστική κορυφή, κοντά στο κέντρο του πυρήνα, βλ. επίσης [171, 197]. Νετρονιακές καταστάσεις με χαμηλή στρφορμή έχουν μεγαλύτερα πλάτη πιθανότητας κοντά στο κέντρο, όπως μπορεί να δει κανείς και στο Σχ. 4.3. Αυτό σημαίνει ότι αισθάνονται ένα αρκετά πιο ασθενές δυναμικό

συνολικά κάτι που εξηγεί την ξαφνική μείωση των p καθώς πηγαίνουμε από το ^{36}S στο ^{34}Si όπως φαίνεται και στο Σχ.4.8. Αυτό το φαινόμενο δεν παρατηρείται καθόλου για τους f διαχωρισμούς στα σχετικιστικά μοντέλα.

Με βάση αυτήν την ανάλυση για να καταλάβουμε τις προαναφερθείσες διαφορές ανάμεσα στα σχετικιστικά και μη σχετικιστικά μοντέλα, επικεντρωνόμαστε στην εξάρτηση από το ισοσπίν του όρου W σπιν-τροχιάς, η οποία καθορίζεται από τον λόγο ανάμεσα στις δύο παραμέτρους W_1 και W_2 . Στα σχετικιστικά μοντέλα η τιμή αυτού του λόγου εξαρτάται από την πυκνότητα και μπορεί να λάβει διάφορες τιμές για διαφορετικούς πυρήνες, ειδικά για συναρτησοειδή όπου οι σταθερές σύζευξης εξαρτώνται επίσης από την πυκνότητα, όπως εξηγείται στο πρόσφατο άρθρο[198]. Σε αυτήν την έρευνα γίνεται υπολογισμός αυτού του λόγου για διάφορους πυρήνες, συμπεριλαμβανομένου και του ^{34}Si , ως συνάρτηση της ακτίνας του πυρήνα. Για τα συναρτησοειδή DD-ME2 και DD-PC1 στο πυρηνικό κέντρο έχει κανείς $W_1/W_2 \approx 1.07$. Στον Πίνακα 4.2 δίνουμε επίσης μία αδρή εκτίμηση αυτού του λόγου για συναρτησοειδή μη γραμμικής σύζευξης, με τη χρήση της Εξ.(4.16) και αγνοώντας την εξάρτηση από την πυκνότητα. Γενικότερα, για τα σχετικιστικά συναρτησοειδή πυκνότητας, η τιμή αυτού του λόγου είναι κοντά στη μονάδα και η εξάρτηση από το ισοσπίν είναι πολύ αδύναμη.

Στην άλλη περίπτωση για τα καθιερωμένα μοντέλα Skyrme και Gogny έχει κανείς $W_1/W_2 = 2$ και μία ισχυρότερη εξάρτηση από το ισοσπίν. Όπως καταλήγει και η σχετική έρευνα στο άρθρο[184], η επιπρόσθετη εξάρτηση από το ισοσπίν στα μη σχετικιστικά μοντέλα, δημιουργεί ένα βαθύτερο ελκτικό πηγάδι. Συνεπώς η δύναμη σπιν-τροχιάς κοντά στην επιφάνεια εμφανίζεται συγκριτικά ισχυρότερη και παράγει μεγαλύτερους ενεργειακούς διαχωρισμούς, ειδικά για τροχιές με μεγάλες τιμές στροφορμής.

Αυτό το βλέπουμε ξεκάθαρα στη δική μας έρευνα, συγκρίνοντας τα μεγέθη των f διαχωρισμών στους πυρήνες ^{40}Ca , ^{36}S όπου όπως ήδη αναφέραμε είναι μεγαλύτεροι κατά 1-2 (MeV).

Αυτή η εικόνα αντιστρέφεται στην περίπτωση ενός bubble πυρήνα, όπου το ύψος της απωστικής κορυφής είναι μεγαλύτερο από τα σχετικιστικά μοντέλα, όπως δείχνεται ξεκάθαρα στο Ref [197]. Σαν αποτέλεσμα η δύναμη σπιν-τροχιάς θα είναι ακόμα πιο αδύναμη και το μέγεθος των διαχωρισμών των p καταστάσεων ακόμα περισσότερο μειωμένο σε σχέση με τα μη σχετικιστικά μοντέλα. Τα αποτελέσματά που παρουσιάσαμε εδώ επιβεβαιώνουν ακριβώς αυτήν την εικόνα.

4.4.2 Η επίδραση των συσχετίσεων ζεύγους

Όπως αναφέρεται και στο κεφάλαιο 2.4, σε υπέρρευστα συστήματα πυρήνων, με ανοιχτούς φλοιούς εισάγουμε την έννοια των ημισωματιδίων για να περιγράψουμε τις αλληλεπιδράσεις ζεύγους μικρής εμβέλειας ανάμεσα στα νουκλεόνια που ανήκουν στον ίδιο φλοιό. Η πιθανότητα κατάληψης μίας κατάστασης υπολογίζεται

αυτό-συνεπώς από την επίλυση της εξίσωσης 2.54 και καθορίζεται από την ισχύ της αλληλεπίδρασης ζεύγους. Στον μετασχηματισμό στην κανονική βάση όπου η θεωρία RHB ισοδυναμεί με την θεωρία RMF συν την προσέγγιση BCS, οι πιθανότητες κατάληψης υπολογίζονται με βάση την εξίσωση 2.63. Όπως εξηγήσαμε η εισαγωγή των συσχετίσεων ζεύγους διαφοροποιεί την πιθανότητα πλήρωσης μίας συγκεκριμένης τροχιά από το 0 για μία εντελώς άδεια και το 2 (λόγω πολλαπλότητας) για μία κατειλημμένη τροχιά. Ειδικά για τις τροχιές ανοιχτών φλοιών κοντά στην επιφάνεια Fermi, τα νουκλεόνια καταλήγουν να "μοιράζονται" σε όλες τις καταστάσεις που συγκροτούν τον φλοιό. Ενώ τροχιές που βρίσκονται πάνω από την ενέργεια Fermi και στην περίπτωση του καθαρού μέσου-πεδίου ήταν εντελώς άδειες, εμφανίζουν πλέον μία μικρή πιθανότητα κατάληψης.

Στο παρόν κεφάλαιο εισάγουμε τις συσχετίσεις ζεύγους μόνο στο κομμάτι των πρωτονίων και υπολογίζουμε ξανά τις μονοσωματιδικές ενέργειες των ίδιων νετρονιακών καταστάσεων όπως πριν. Αυτό γίνεται για κάθε πυρήνα εκτός από την περίπτωση του ^{40}Ca ο οποίος είναι διπλά μαγικός και έχει πλήρεις φλοιούς. Επίσης υπολογίζουμε και τις πιθανότητες κατάληψης της πρωτονιακής κατάστασης $2s_{1/2}$ για τους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si , μιας και η δομή της "φούσκας" στον τελευταίο δημιουργείται ακριβώς επειδή αυτή η κατάσταση είναι ουσιαστικά άδεια.

Οι συσχετίσεις ζεύγους και τα αντίστοιχα χάσματα ζευγαρώματος, μπορούν να επηρεάσουν το μέγεθος των διαχωρισμών σπιν-τροχιάς. Έχει δειχτεί ήδη στο Ref.[188] ότι στο πλαίσιο των σχετικιστικών Hartree Bogoliubov υπολογισμών, οι συσχετίσεις ζεύγους μειώνουν το μέγεθος της κεντρικής κοιλότητας στη πυκνότητα πρωτονίων στον πυρήνα ^{34}Si . Επίσης είναι πιθανό να αυξήσουν τη διάχυση της επιφανειακής πυκνότητας επηρεάζοντας έτσι και την συνηθισμένη συνιστώσα του δυναμικού σπιν-τροχιάς.

Σύμφωνα με αυτό το αποτέλεσμα και στη βάση της προηγούμενης ανάλυσης για την εξάρτηση του όρου σπιν-τροχιάς από την παράγωγο της πυκνότητας, αναμένεται να παρατηρήσουμε μία αποδυνάμωση της απωστικής συνιστώσας του όρου στο εσωτερικό του πυρήνα. Κάτι που θα οδηγήσει σε μεγαλύτερα απόλυτα μεγέθη και μικρότερες σχετικές μειώσεις των p διαχωρισμών, συγκριτικά με τα αποτελέσματα μόνο του μέσου-πεδίου χωρίς ζευγάρωμα.

Σε αυτό το πλαίσιο χρησιμοποιούμε δύο διαφορετικούς τρόπους εισαγωγής των συσχετίσεων ζεύγους στους υπολογισμούς μας (βλ. ενότητα 2.4.1): (i) Την προσέγγιση του σταθερού χάσματος, το οποίο είναι τέτοιο ώστε να αναπαράγει τη συστηματική διαφορά στην ενέργεια σύνδεσης ανάμεσα σε περιττούς-άρτιους πυρήνες όπως προκύπτει από τα πειραματικά δεδομένα, και (ii) τη διαχωρίσιμη δύναμη ζευγαρώματος TMR[116] πεπερασμένης εμβέλειας, η οποία αναπαράγει το χάσμα ζευγαρώματος στην επιφάνεια Fermi της δύναμης Gogny για την περίπτωση συμμετρικής πυρηνικής ύλης.

Προσέγγιση σταθερού χάσματος

Όπως αναφέραμε και στη ενότητα 2.4.1 στην περίπτωση του σταθερού χάσματος ζευγαρώματος, ο πίνακας $\hat{\Delta}$, που αντιστοιχεί στο πεδίο του ζευγαρώματος, γίνεται διαγώνιος με σταθερή τιμή ίση με το χάσμα ζευγαρώματος. Ο προσδιορισμός αυτής της τιμής γίνεται από μία εμπειρική σχέση, που προκύπτει από το φαινόμενο της συστηματικής αυξομείωσης των ενεργειών σύνδεσης ανάμεσα σε γειτονικούς άρτιους και περιττούς πυρήνες. Η σχέση αυτή μας δίνει εμπειρικά το χάσμα είτε των νετρονίων ή των πρωτονίων, ανάλογα με το αν εξετάζουμε τη μεταβολή της ενέργειας σύνδεσης στους διπλανούς πυρήνες με διαφορετικό N ή διαφορετικό Z . Επίσης με βάση τον αριθμό των πυρήνων που χρησιμοποιούμε έχουμε αντίστοιχα και εμπειρικούς τύπους 3, 4 ή και 5 σημείων. Ο πιο απλός τύπος βεβαίως, είναι ο καθιερωμένος τύπος 3 σημείων που ορίζεται από την εξίσωση, που για την περίπτωση συστημάτων με άρτιο αριθμό νετρονίων είναι:

$$\Delta^{(3)}(N) = \frac{1}{2}[B(N-1, Z) + B(N+1, Z) - 2B(N, Z)], \quad (4.23)$$

και με παρόμοιο τρόπο ορίζεται και για την εύρεση του χάσματος των πρωτονίων, το οποίο μας ενδιαφέρει στην παρούσα έρευνα.

Όπως αναφέρεται και στην εκτεταμένη έρευνα [199] σχετικά με τα εμπειρικά χάσματα ζευγαρώματος, ο παραπάνω τύπος υπολογίζει την επιπλέον σύνδεση που προσφέρει το τελευταίο νετρόνιο σε συστήματα με άρτιο N , σε σχέση με το περιττό σύστημα με ένα νετρόνιο παραπάνω. Το πρόβλημα με αυτό τον τύπο είναι ότι στο φαινόμενο άρτιων-περιττών που είναι η βάση αυτής της εξίσωσης, υπεισέρχονται και άλλα φαινόμενα, εκτός από τις συσχετίσεις ζεύγους, όπως είναι η επίδραση της παραμόρφωσης του μέσου-πεδίου. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα σε ελαφρείς πυρήνες να υπάρχει μία υπερεκτίμηση του μεγέθους του χάσματος.

Για να αποφύγουμε αυτό το πρόβλημα χρησιμοποιούμε τον εναλλακτικό τύπο 3 σημείων που ορίζεται ως

$$\Delta_C^{(3)}(N) = \frac{1}{2}[B(N, Z) + B(N-2, Z) - 2B(N-1, Z)] \quad (4.24)$$

ο οποίος είναι ισοδύναμος με τον καθιερωμένο τύπο των τριών σημείων για περιττούς αριθμό νετρονίων. Ο λόγος γι' αυτήν την επιλογή βασίζεται στο γεγονός ότι σε περιττά συστήματα η επίδραση των μεταβολών των μονοσωματιδιακών καταστάσεων του μέσου-πεδίου στο εμπειρικό χάσμα ελαχιστοποιείται. Έτσι αυτός ο τύπος δίνει πιο λογικές τιμές για τις περιπτώσεις των πυρήνων που μελετάμε. Με βάση λοιπόν αυτήν την εξίσωση και παίρνοντας τις πειραματικές μετρήσεις των ενεργειών σύνδεσης, από τον πίνακα πυρηνικών δεδομένων [200], τα τελικά χάσματα ζευγαρώματος για τα πρωτόνια έχουν τις τιμές που δίνονται στον πίνακα 4.3

	^{38}Ar	^{36}S	^{34}Si
$\Delta_C^{(3)}(\text{MeV})$	0.93	0.45	1.95

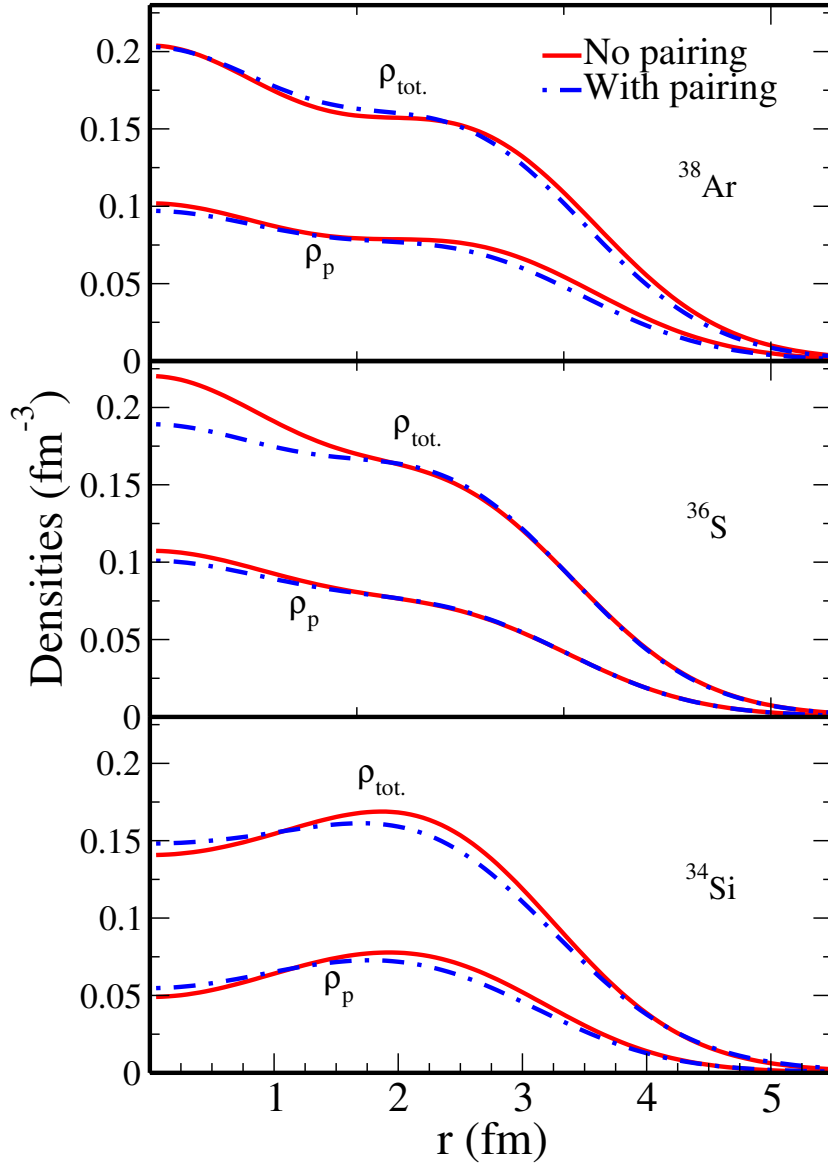
Πίνακας 4.3: Οι τιμές των χασμάτων ζευγαρώματος για τα πρωτόνια με βάση τον εμπειρικό τύπο 3 σημείων Εξ. (4.24)

Χρησιμοποιώντας αυτές τις τιμές προσαρμόζουμε το χάσμα σε κάθε πυρήνα στο κανάλι των πρωτονίων. Με αυτήν την προσθήκη υπολογίζουμε ξανά, όπως και στην περίπτωση του καθαρού μέσου-πεδίου τις ίδιες μονοσωματιδιακές ενέργειες των f και p νετρονιακών καταστάσεων υπό εξέταση. Τα αριθμητικά αποτελέσματα καταγράφονται στον Πίνακα 4.4, όπου και πάλι στο πάνω μέρος είναι οι ενεργειακές διαφορές των διαχωρισμών σπιν τροχιάς, και στο κάτω μέρος οι σχετικές μειώσεις για την μετάβαση από τον ^{40}Ca στον ^{36}S και την τελευταία μετάβαση από τον ^{36}S στον ^{34}Si .

Επίσης στον Πίνακα 4.5 δίνουμε και την πιθανότητα κατάληψης της πρωτονιακής κατάστασης $2s_{1/2}$ στους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si και την αντίστοιχη μεταβολή, η οποία συγκρίνεται με την τιμή που εξήχθη από το πείραμα [187]. Όπως είναι αναμενόμενο για τον πυρήνα ^{36}S η τιμή αυτή είναι μικρότερη τώρα από 2, ενώ για τον πυρήνα ^{34}Si βλέπουμε ότι η συγκεκριμένη κατάσταση αποκτάει μία μικρή πιθανότητα κατάληψης.

Για να δούμε την επίδραση της εισαγωγής των συσχετίσεων ζεύγους, δείχνουμε στο σχήμα 4.9 την ακτινική εξάρτηση της ολικής και πρωτονιακής πυκνότητας των τριών πυρήνων ^{38}Ar , ^{36}S , ^{34}Si , όπως προκύπτουν με τη δύναμη NL3. Ταυτόχρονα περιλαμβάνουμε και τις αντίστοιχες πυκνότητες για την προηγούμενη περίπτωση του καθαρού μέσου-πεδίου με την ίδια δύναμη, για να διακρίνουμε τις διαφορές. Στον πυρήνα ^{38}Ar έχουμε πολύ μικρές αλλαγές και στις δύο πυκνότητες, κυρίως στη διάχυση της επιφάνειας, όπου εμφανίζεται πιο εκτεταμένη. Ο πυρήνας ^{36}S εμφανίζει μια πιο σταθερή ολική πυκνότητα στο εσωτερικό. Αυτό εξηγείται από την σχετικά μικρότερη πλήρωση της τροχιάς πρωτονίων $2s_{1/2}$. Τέλος, στον πυρήνα ^{34}Si , η αντίστοιχη αύξηση της πιθανότητας κατάληψης της ίδιας τροχιάς, έχει σαν αποτέλεσμα την εξομάλυνση της δομής της "φούσκας" στο κέντρο του πυρήνα, ενώ αυξάνει και τη διάχυση την πυκνότητας κοντά στην επιφάνεια.

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των υπολογισμών που περιλαμβάνουν τις συσχετίσεις ζεύγους με τα προηγούμενα αποτελέσματα του καθαρού μέσου-πεδίου, έχουμε αρχικά την ίδια γενική ποιοτική εικόνα. Οι f -διαχωρισμοί εμφανίζουν πάλι μία σταδιακή μείωση όπως διατρέχουμε την αλυσίδα των ισότονων πυρήνων υπό εξέταση. Οι p -διαχωρισμοί παραμένουν περίπου σταθεροί σε μέγεθος για τους τρεις πρώτους πυρήνες και ελαττώνονται δραματικά στον τελευταίο πυρήνα όπου υπάρχει η δομή του κοιλώματος στην πρωτονιακή πυκνότητα.



Σχήμα 4.9: Ακτινική εξάρτηση της ολικής πυκνότητας ρ_{tot} και της πρωτονιακής πυκνότητας ρ_p για την NL3 δύναμη, χωρίς και με συσχετίσεις ζεύγους για τους πυρήνες ^{38}Ar , ^{36}S , και ^{34}Si

	40Ca		38Ar		36S		34Si	
	f	p	f	p	f	p	f	p
NL3	7.21	1.69	6.87	1.64	6.44	1.68	5.56	0.74
NL3*	7.07	1.76	6.73	1.75	6.30	1.80	5.33	0.61
FSUGold	7.14	1.38	6.83	1.10	6.33	1.04	5.33	0.61
DD-ME2	7.40	1.71	7.01	1.63	6.50	1.57	5.60	0.87
DD-Med	6.97	1.51	6.78	1.28	6.45	1.15	5.56	0.77
DD-PC1	7.83	1.77	7.53	1.66	7.12	1.56	6.17	0.86
PC-PF1	6.88	1.76	7.53	1.66	6.25	1.82	5.40	0.88
SO reduction from 40Ca → 36S								
	NL3	NL3*	FSUGold	DD-ME2	DD-Med	DD-PC1	PC-PF1	Exp.
f	11%	11%	11%	12%	8%	9%	9%	0.5%
p	1%	-2%	24%	8%	24%	12%	-4%	0.4%
SO reduction from 36S → 34Si								
	NL3	NL3*	FSUGold	DD-ME2	DD-Med	DD-PC1	PC-PF1	Exp.
f	14%	16%	16%	14%	14%	13%	14%	2%
p	56%	66%	41%	45%	33%	45%	52%	43%

Πίνακας 4.4: Το ίδιο με τον Πίνακα 4.2 αλλά για την προσέγγιση σταθερού χάσματος

Πιο ειδικά για την προσέγγιση σταθερού χάσματος ισχύουν τα εξής:

- Στον πυρήνα ^{38}Ar , έχουμε μία μικρή μείωση τόσο στους f όσο και στους p ενεργειακούς διαχωρισμούς.
- Στον πυρήνα ^{36}S οι διαχωρισμοί f είναι σχεδόν ίδιοι, όπως θα περίμενε κανείς και από την εικόνα της πυκνότητας στο Σχ. 4.9, όπου κοντά στην επιφάνεια οι καμπύλες των πυκνοτήτων ταυτίζονται. Αντιθέτως οι p διαχωρισμοί μειώνονται ακόμη περισσότερο σε σχέση με τη μείωση στον ^{38}Ar . Αυτό οφείλεται στην παρατηρούμενη εξομάλυνση της κεντρικής πυκνότητας, που όπως είπαμε προκαλείται από τη μείωση της πληρότητας της $2s_{1/2}$ τροχιάς

	^{36}S	^{34}Si	$\Delta(2s_{1/2})$
NL3	1.83	0.10	1.73
NL3*	1.87	0.11	1.76
FSUGold	1.26	0.09	1.18
DD-ME2	1.80	0.11	1.70
DD-ME δ	1.22	0.11	1.11
DD-PC1	1.78	0.14	1.64
PC-PF1	1.86	0.19	1.49
Expt.[187]	1.64	0.17	1.56

Πίνακας 4.5: Πιθανότητες κατάληψης για την πρωτονιακή $2s_{1/2}$ τροχιά στους ^{36}S και ^{34}Si , με την προσέγγιση σταθερού χάσματος.

των πρωτονίων. Συνεπώς οι $2p_{3/2}$ και $2p_{1/2}$ τροχιές που βρίσκονται περισσότερο συγκεντρωμένες κοντά στο κέντρο, αισθάνονται ένα πιο αδύναμο δυναμικό σπιν-τροχιάς και έτσι έρχονται πιο κοντά η μία στην άλλη.

- Τέλος, στον πυρήνα ^{34}Si , παρατηρούνται επίσης ελαφρώς μικρότεροι f διαχωρισμοί. Όσον αφορά τους p διαχωρισμούς οι διαφορές είναι πολύ μικρές, ενώ κανονικά περιμέναμε να είναι σχετικά μεγαλύτεροι επειδή η δομή της κοιλότητας και το αντίστοιχο απωστικό δυναμικό σπιν-τροχιάς δεν είναι τόσο έντονα. Αυτό συμβαίνει μόνο για ορισμένες δυνάμεις όπως η PC-PF1, που έχουν σχετικά μεγαλύτερη πιθανότητα κατάληψης της $2s_{1/2}$ τροχιάς, ενώ οι περισσότερες έχουν ουσιαστικά πολύ μικρές τιμές για τη συγκεκριμένη δύναμη ζευγαρώματος.

Η διαχωρίσιμη δύναμη ζεύγους TMR

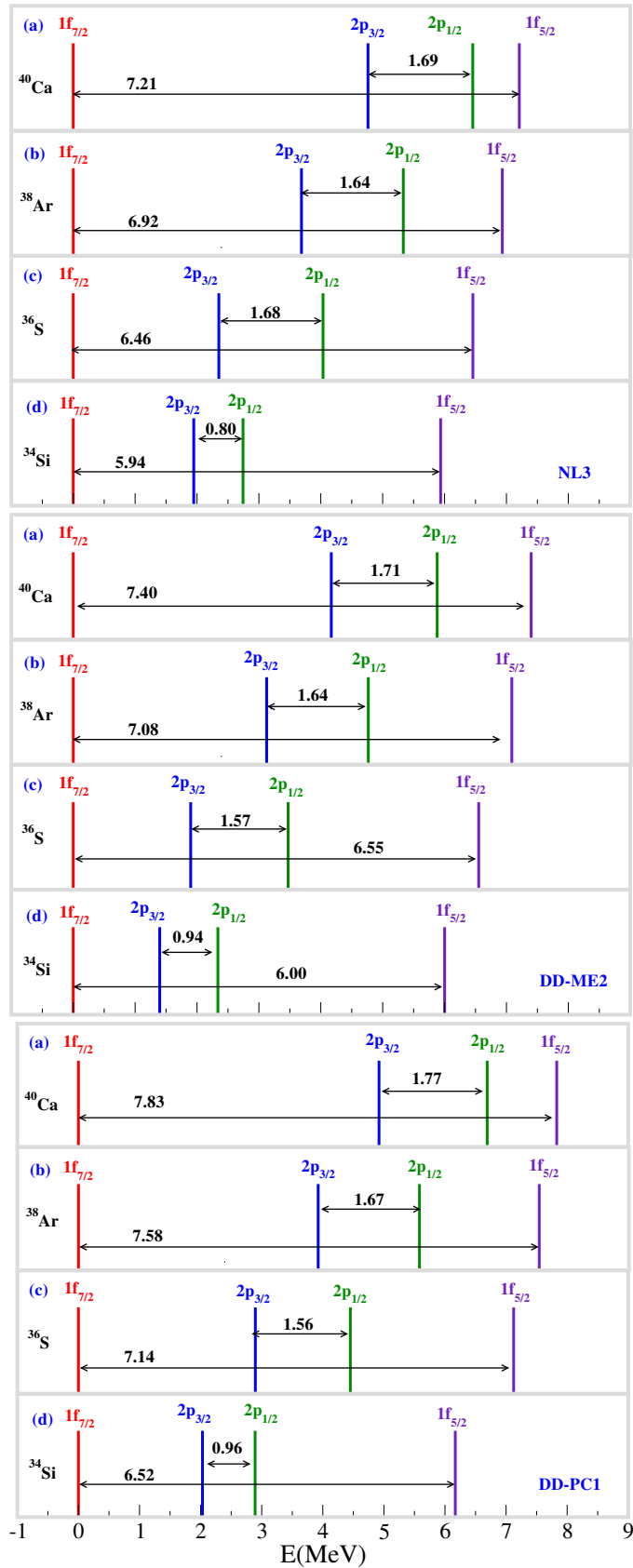
Στο σημείο αυτό θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα των υπολογισμών με τη χρήση της διαχωρίσιμης δύναμης TMR για τις συσχετίσεις μικρής εμβέλειας. Όπως αναφέραμε στην ενότητα 2.4.1 η δύναμη αυτή έχει προσαρμοστεί για να αναπαράγει το ίδιο χάσμα ζευγαρώματος με την δύναμη Gogny D1S στη συμμετρική πυρηνική ύλη[116]. Και οι δύο δυνάμεις είναι πεπερασμένης εμβέλειας και έτσι δεν εμφανίζουν υπερϊώδη απόκλιση και δεν εξαρτώνται από κάποιο κατώφλι ζευγαρώματος. Παρέχουν μία λογική περιγραφή των συσχετίσεων ζεύγους σε όλο το εύρος του περιοδικού πίνακα με ένα σταθερό σύνολο παραμέτρων. Ωστόσο,

προσεκτικοί υπολογισμοί του μεγέθους αυτών των συσχετίσεων ζεύγους συγκρίνοντας θεωρητικά αποτελέσματα με πειραματικές διαφορές άρτιων-περιττών μαζών και με πειραματικές ροπές αδράνειας[201] έχουν δείξει ότι οι συσχετίσεις ζεύγους που δημιουργούνται από αυτές τις δυνάμεις είναι κάπως πιο δυνατές για βαρείς πυρήνες και κάπως πιο ασθενείς για ελαφρείς πυρήνες. Για να αποφύγουμε τέτοια προβλήματα στις λεπτομέρειες της περιγραφής των συσχετίσεων ζεύγους στην παρούσα περίπτωση που μελετούμε σχετικά ελαφρείς πυρήνες και ακολουθώντας το παράδειγμα του Ref.[201] έχουμε εισάγει έναν παράγοντα διαβάθμισης v_{fac} της ισχύος της δύναμης TMR. Όταν ο συγκεκριμένος παράγοντας ισούται με τη μονάδα τότε η ισχύς της δύναμης TMR είναι ίδια με την τιμή που έχει η αντίστοιχη δύναμη ζευγαρώματος στην περίπτωση του Gogny συναρτησοειδούς. Με σκοπό την προσαρμογή αυτού του παράγοντα στο κανάλι των πρωτονίων, χρησιμοποιήσαμε την ίδια εκδοχή του τύπου 3 σημείων 4.24 όπως και στην προσέγγιση σταθερού χάσματος. Έτσι οι τιμές των χασμάτων ζευγαρώματος που προκύπτουν για κάθε πυρήνα από την αυτοσυνεπή επίλυση των εξισώσεων RHB, να είναι ίδιες με αυτές του Πίνακα 4.3.

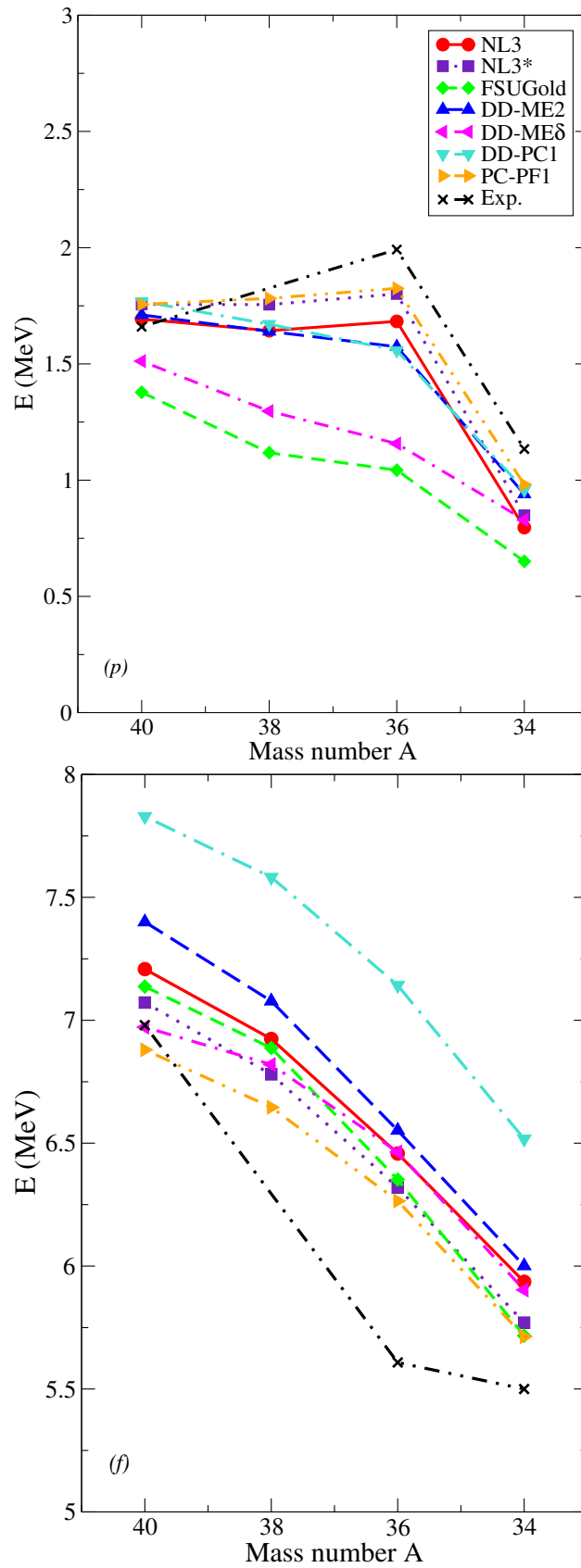
Οι διαχωρισμοί σπιν-τροχιάς και οι αντίστοιχες μειώσεις για αυτήν την περίπτωση υπολογισμών παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.6. Στο Σχ.4.10 έχουμε μία γραφική απεικόνιση των αποτελεσμάτων παρόμοια με αυτή του Σχ. 4.7 για τις ίδιες τρεις δυνάμεις NL3, DD-ME2, DD-PC1. Συνολικά, για όλα συναρτησοειδή που χρησιμοποιήθηκαν, τα μεγέθη και η εξέλιξη των p και f διαχωρισμών σε σχέση με τον μαζικό αριθμό, δείχνονται στο Σχ.4.11. Ακόμη στον Πίνακα 4.7 δίνουμε τις πιθανότητες κατάληψης της πρωτονιακής κατάστασης $2s_{1/2}$ για τους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si .

Τα αριθμητικά αποτελέσματα των υπολογισμών και με αυτήν τη δύναμη ζευγαρώματος επαναλαμβάνουν την ίδια ποιοτική εικόνα όπως και στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις. Σε σχέση με το καθαρό μέσο-πεδίο, η εισαγωγή των συσχετίσεων ζεύγους μέσα από την δύναμη TMR, γενικά αυξάνει τους f - διαχωρισμούς και μειώνει τους p -διαχωρισμούς στους ^{38}Ar και ^{36}S . Η αλλαγή αυτή είναι πολύ μικρή για τον πυρήνα ^{38}Ar και ελαφρώς μεγαλύτερη για τον πυρήνα ^{36}S για τις p καταστάσεις ενώ ισχύει το αντίστροφο για τους f διαχωρισμούς όπου στην περίπτωση του ^{36}S παραμένουν πρακτικά ίδιοι. Για τον τελευταίο πυρήνα ^{34}Si η εικόνα αυτή αντιστρέφεται και παρατηρούνται μικρότεροι f διαχωρισμοί και μεγαλύτεροι p διαχωρισμοί και πάλι της τάξης του 0.1MeV. Το τελευταίο αυτό γεγονός διορθώνει την σχετικά ενισχυμένη επίδραση της κεντρικής κοιλότητας και την ξαφνική μείωση του p διαχωρισμού σπιν τροχιάς όταν έχουμε τη μετάβαση από ^{36}S στον ^{34}Si .

Στον συγκεκριμένο πυρήνα υπάρχει και μία διαφορά σε σχέση με την προσέγγιση σταθερού χάσματος, καθώς οι p διαχωρισμοί είναι τώρα εμφανώς μεγαλύτεροι, όπως αναμέναμε από την εισαγωγή σε αυτήν την ενότητα και την επίδραση των συσχετίσεων ζεύγους στην δομή της "φούσκας". Αυτή η διαφορά φαίνεται



Σχήμα 4.10: Το ίδιο με το Σχ. 4.7 αλλά με την δύναμη ζευγαρώματος TMR.



Σχήμα 4.11: Το ίδιο με το Σχ. 4.8 αλλά με την δύναμη ζευγαρώματος TMR.

	^{40}Ca		^{38}Ar		^{36}S		^{34}Si	
	f	p	f	p	f	p	f	p
NL3	7.21	1.69	6.92	1.64	6.46	1.68	5.94	0.80
NL3*	7.07	1.76	6.78	1.76	6.32	1.80	5.77	0.85
FSUGold	7.14	1.38	6.89	1.12	6.35	1.04	5.72	0.65
DD-ME2	7.40	1.71	7.08	1.64	6.55	1.57	6.00	0.94
DD-ME δ	6.97	1.51	6.82	1.30	6.46	1.16	5.90	0.83
DD-PC1	7.83	1.77	7.58	1.67	7.14	1.56	6.52	0.96
PC-PF1	6.88	1.76	6.65	1.78	6.27	1.83	5.71	0.98
Exp.	6.98	1.66			5.61	1.99	5.5	1.13

	$^{40}\text{Ca} \rightarrow ^{36}\text{S}$		$^{36}\text{S} \rightarrow ^{34}\text{Si}$	
	f	p	f	p
NL3	10%	1%	8%	53%
NL3*	11%	-3%	9%	53%
FSUGold	11%	24%	10%	38%
DD-ME2	11%	8%	8%	40%
DD-ME δ	7%	23%	9%	28%
DD-PC1	9%	12%	9%	39%
PC-PF1	9%	-4%	9%	46%
Exp.	20%	-20%	2%	43%

Πίνακας 4.6: Το ίδιο με τον Πίνακα 4.2 αλλά για την δύναμη ζευγαρώματος TMR.

ξεκάθαρα και στις πιθανότητες κατάληψης της $2s_{1/2}$ πρωτονιακής τροχιάς. Αν συγκρίνουμε τις τιμές στους δύο πίνακες 4.5 και 4.7, ενώ για τον πυρήνα ^{36}S βλέπουμε ότι η πλήρωση της συγκεκριμένης κατάστασης είναι σχεδόν ίδια, στον πυρήνα ^{34}Si είναι σχεδόν διπλάσια ή και μεγαλύτερη για όλα τα συναρτησοειδή. Αυτό σημαίνει ότι η κεντρική κοιλότητα στην πυρηνική πυκνότητα είναι ακόμα μικρότερη

	^{36}S	^{34}Si	$\Delta(2S_{1/2})$
NL3	1.83	0.20	1.62
NL3*	1.87	0.23	1.64
FSUGold	1.25	0.16	1.09
DD-ME2	1.79	0.23	1.57
DD-ME δ	1.22	0.60	1.02
DD-PC1	1.77	0.30	1.47
PC-PF1	1.86	0.36	1.49
Exp.[187]	1.64	0.17	1.56

Πίνακας 4.7: Πιθανότητες κατάληψης για την πρωτονιακή $2s_{1/2}$ τροχιά στους ^{36}S και ^{34}Si , για την δύναμη ζευγαρώματος TMR.

σε σχέση με την αρχική προσέγγιση του καθαρού μέσου-πεδίου. Έτσι το απόλυτο μέγεθος του p διαχωρισμού σπιν-τροχιάς είναι διορθωμένος και προσεγγίζει στην τιμή του 1.13 MeV που προκύπτει από το πείραμα [186]. Επίσης και η συνολική μεταβολή στην πλήρωση αυτής της κατάστασης, όταν μεταβαίνουμε από τον ^{36}S στον ^{34}Si είναι πιο κοντά σε σχέση με την πειραματική τιμή 1.56. Ο συνδυασμός αυτών των δύο οδηγεί σε μία σχετική μείωση του μεγέθους του p διαχωρισμού που και αυτή πλησιάζει το πειραματικό αποτέλεσμα του 43%.

Εξάρτηση της σχετικής μείωσης από την ισχύ του ζευγαρώματος

Η προηγούμενη ανάλυση, με την εισαγωγή συσχετίσεων ζεύγους στο πλαίσιο του μέσου-πεδίου, δείχνει ότι υπάρχει μία ξεκάθαρη σχέση ανάμεσα στο μέγεθος των p διαχωρισμών σπιν-τροχιάς και της πληρότητας της πρωτονιακής κατάστασης $2s_{1/2}$. Γενικά είδαμε ότι καταλήγουμε σε μία λιγότερο δραματική σχετική ελάττωση του μεγέθους του ενεργειακού διαχωρισμού σπιν-τροχιάς για τις p νετρονιακές καταστάσεις, σε σχέση με το καθαρό μέσο-πεδίο. Με στόχο να διερευνήσουμε αυτό το φαινόμενο σε μεγαλύτερη λεπτομέρεια επαναλαμβάνουμε τους RHB υπολογισμούς με μεταβαλλόμενη ισχύ της αλληλεπίδρασης ζευγαρώματος, αυξάνοντας βαθμιαία την τιμή του παράγοντα διαβάθμισης v_{fac} για τη δύναμη TMR.

Ξεκινάμε έτσι από μηδενική τιμή, $v_{fac} = 0$, η οποία ουσιαστικά σημαίνει ότι δεν έχουμε καθόλου συσχετίσεις ζεύγους και τα αποτελέσματα ισοδυναμούν με την περίπτωση του καθαρού μέσου-πεδίου. Στη συνέχεια αυξάνουμε κατά 0.1 μέ-

χρι να φτάσουμε την τιμή $v_{fac} = 2$, η οποία σημαίνει ότι η δύναμη ζευγαρώματος έχει διπλάσια ισχύ από την αντίστοιχη δύναμη Gogny. Πρακτικά κάτι τέτοιο οδηγεί σε πολύ ισχυρό πεδίο ζευγαρώματος, κάτι που δεν είναι απολύτως ρεαλιστικό. Το χρησιμοποιούμε όμως σαν το άνω όριο για να εξετάσουμε την συμπεριφορά των ενεργειακών μονοσωματιδιακών καταστάσεων. Στον Πίνακα 4.8 δείχνουμε ενδεικτικά για τα τρία συναρτησοειδή NL3, DD-ME2, DD-PC1, τον τρόπο με τον οποία μεταβάλλονται, η ενεργειακή διαφορά του $2p$ νετρονιακού διαχωρισμού και η πληρότητα της $\pi(2s_{1/2})$ πρωτονιακής τροχιάς στους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si . Δείχνουμε μόνο κάποιες χαρακτηριστικές τιμές τους παράγοντα διαβάθμισης.

Όπως αναλύσαμε η αλληλεπίδραση ζεύγους, στο κομμάτι των πρωτονίων, οδηγεί από τη μία σε μία μείωση της πληρότητας της τροχιάς $\pi(2s_{1/2})$ στον πυρήνα ^{36}S και από την άλλη σε μία αύξηση της ίδια πληρότητας στον πυρήνα ^{34}Si . Όπως δείξαμε και στο Σχ. 4.9 αυτό έχει πολύ συγκεκριμένες συνέπειες στην κατανομή της πρωτονιακής και ολικής πυκνότητας των δύο πυρήνων και οδηγεί στον πυρήνα ^{36}S σε μείωση και στον ^{34}Si σε αύξηση, του μεγέθους του p διαχωρισμού. Αυτό, το βλέπουμε και εδώ πιο ξεκάθαρα. Όταν ο παράγοντας διαβάθμισης έχει μικρή τιμή, για παράδειγμα $v_{fac} = 0.5$, τότε και για τις τρεις δυνάμεις τα αποτελέσματα είναι ίδια με αυτά του πίνακα 4.2. Όσο αυξάνουμε την ισχύ της δύναμης TMR αρχίζουν να εμφανίζονται και τα φαινόμενα που μόλις εξηγήσαμε. Αυτό, παρουσιάζεται σχηματικά για τη δύναμη NL3, στα διαγράμματα του Σχ. 4.12, όπου στο πάνω διάγραμμα έχουμε σχεδιάσει την εξέλιξη της ενεργειακής διαφοράς ανάμεσα στις τροχιές νετρονίων $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ και στο κάτω διάγραμμα την εξέλιξη της πληρότητας της τροχιάς $\pi(2s_{1/2})$, σε σχέση με τον παράγοντα διαβάθμισης v_{fac} . Σε κάθε ένα διάγραμμα τα μπλε σημεία αντιστοιχούν στον πυρήνα ^{36}S και τα κόκκινα στον ^{34}Si .

Να παρατηρήσουμε ότι στον πυρήνα ^{36}S , οι συσχετίσεις ζεύγους αρχίζουν να ενεργούν για πιο μικρές τιμές του παράγοντα διαβάθμισης. Για παράδειγμα για τις δυνάμεις NL3 και DD-ME2 αυτή η τιμή είναι $v_{fac} \approx 0.60$, ενώ για την DD-PC1 είναι $v_{fac} \approx 0.5$ και έτσι βλέπουμε και στα δύο διαγράμματα, η μείωση του διαχωρισμού και της πληρότητας για τη μπλε καμπύλη να ξεκινά αρκετά πιο μπροστά. Μόνο όταν φτάσουμε κοντά στην τιμή $v_{fac} \approx 1.10 - 1.20$ αρχίζουν οι συσχετίσεις ζεύγους να έχουν κάποια επίδραση και για τον πυρήνα ^{34}Si . Από εκείνο το σημείο και μετά βλέπουμε και την αύξηση τώρα των αντίστοιχων μεγεθών, στην κόκκινη καμπύλη.

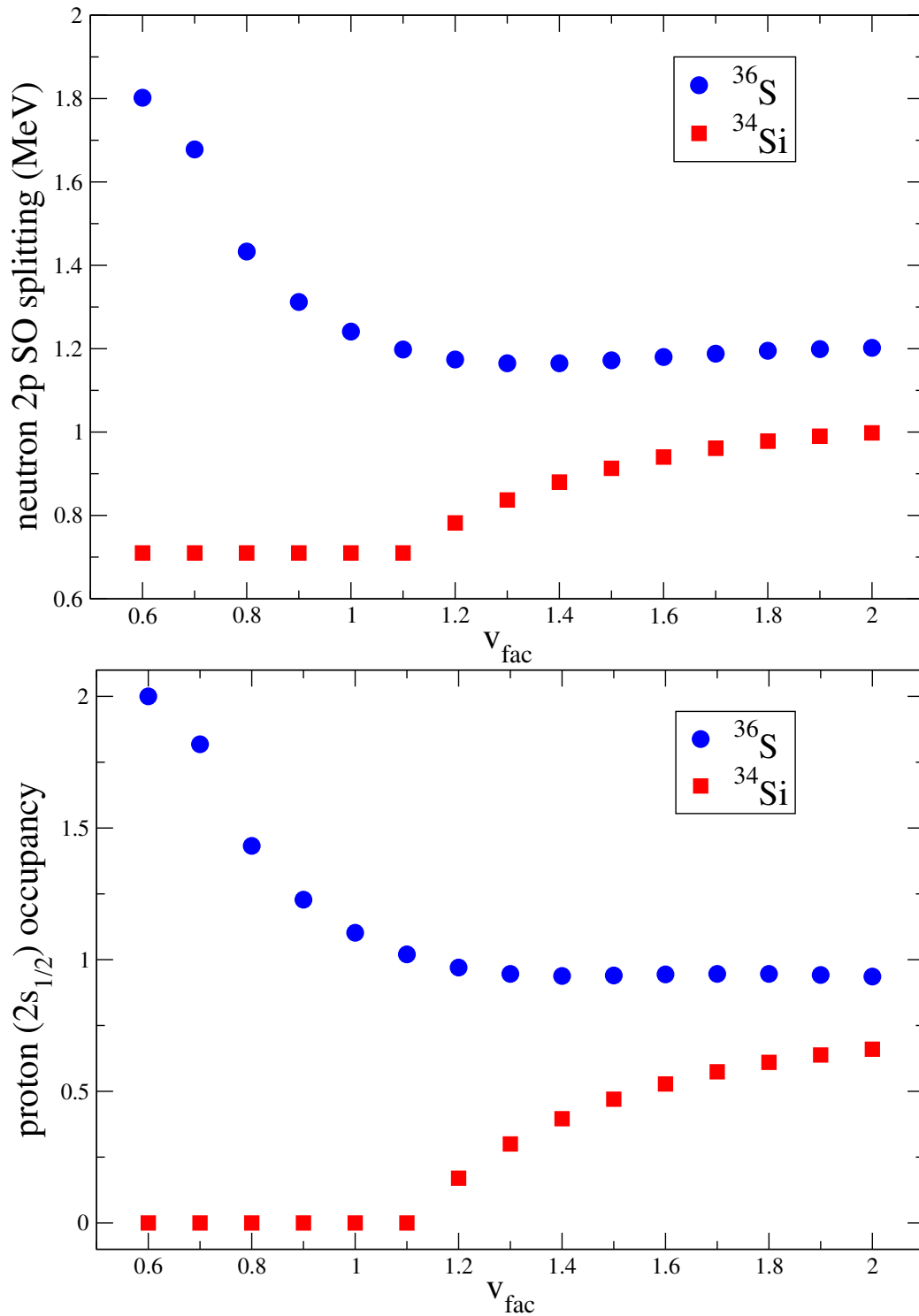
Μία ακόμα σημαντική παρατήρηση που μπορούμε να κάνουμε από τα διαγράμματα στα Σχ. 4.12, 4.13, 4.14, είναι ότι για αρκετά μεγάλες τιμές του παράγοντα διαβάθμισης, τόσο ο διαχωρισμός όσο και η πληρότητα παραμένουν πρακτικά αμετάβλητες και τείνουν σε ένα συγκεκριμένο όριο. Και πάλι ισχύει η διαφορά ανάμεσα στους δύο πυρήνες. Έτσι αυτό παρατηρείται για αρκετά μικρότερες τιμές του v_{fac} για το ^{36}S , κοντά στο $v_{fac} \approx 1.2$, ενώ για τον πυρήνα ^{34}Si η τιμή αυτή είναι κοντά στο $v_{fac} \approx 2$. Ουσιαστικά αυτό σημαίνει ότι από ένα σημείο και πέρα όσο

NL3						
Spin-Orbit splitting				Occupation		
vfac	³⁶ S	³⁴ Si	difference	³⁶ S	³⁴ Si	difference
0.60	1.80	0.71	1.09	2.00	0.00	2.00
0.90	1.31	0.71	0.60	1.23	0.00	1.23
1.20	1.17	0.78	0.39	0.97	0.17	0.80
1.60	1.18	0.94	0.24	0.94	0.53	0.42
2.00	1.20	1.00	0.20	0.94	0.66	0.28

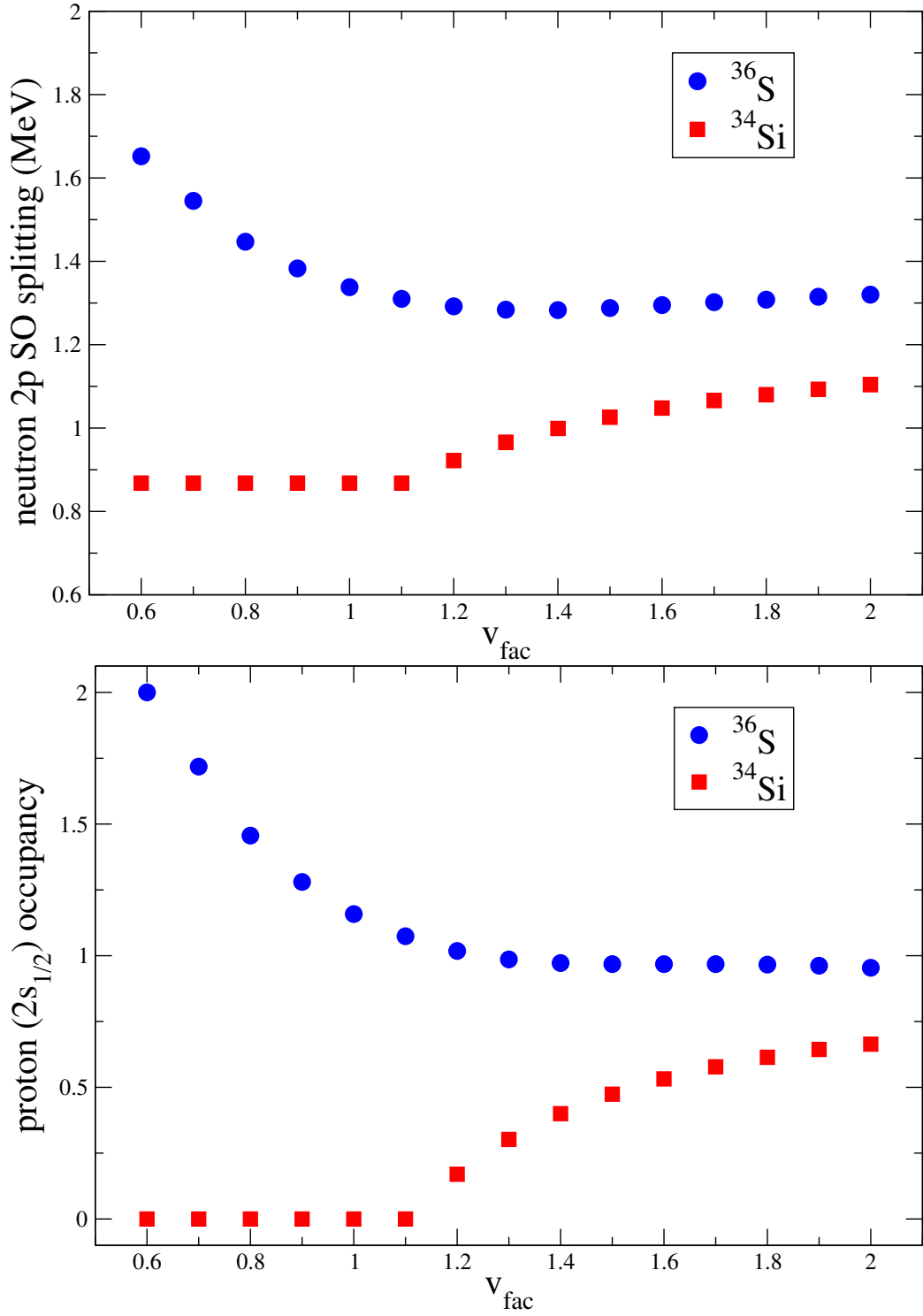
DD-ME2						
Spin-Orbit splitting				Occupation		
vfac	³⁶ S	³⁴ Si	difference	³⁶ S	³⁴ Si	difference
0.60	1.65	0.87	0.78	2.00	0.00	2.00
0.90	1.39	0.87	0.52	1.28	0.00	1.28
1.20	1.29	0.92	0.37	1.02	0.17	0.85
1.60	1.30	1.05	0.25	0.97	0.53	0.44
2.00	1.32	1.10	0.22	0.95	0.66	0.29

DD-PC1						
Spin-Orbit splitting				Occupation		
vfac	³⁶ S	³⁴ Si	difference	³⁶ S	³⁴ Si	difference
0.50	1.64	0.88	0.75	2.00	0.00	2.00
0.80	1.45	0.88	0.57	1.43	0.00	1.43
1.10	1.34	0.93	0.42	1.11	0.18	0.93
1.70	1.30	1.03	0.27	0.98	0.60	0.38
2.00	1.29	1.04	0.25	0.95	0.67	0.29

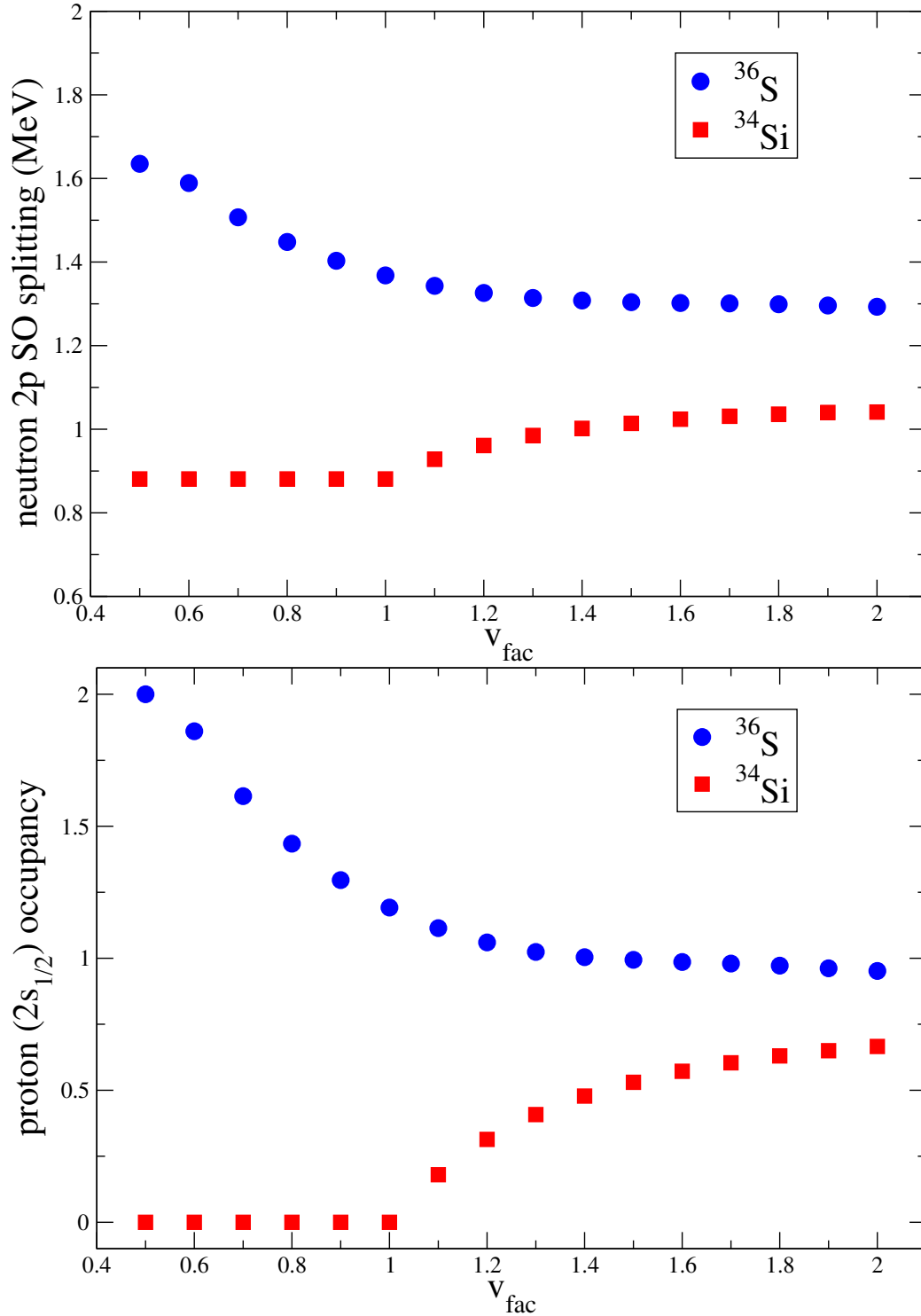
Πίνακας 4.8: Η μεταβολή του διαχωρισμού σπιν-τροχιάς των $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ νετρονιακών τροχιών και της πληρότητας της ($2s_{1/2}$) πρωτονιακής τροχιάς για διάφορες τιμές του παράγοντα v_{fac} , για τους πυρήνες ³⁶S και ³⁴Si. Για τις τρεις δυνάμεις NL3, DD-ME2, DD-PC1.



Σχήμα 4.12: Η εξέλιξη του διαχωρισμού των $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ νετρονιακών τροχιών και της πληρότητας της $(2s_{1/2})$ πρωτονιακής τροχιάς σε σχέση με τον παράγοντα v_{fac} , για τους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si . Για τη δύναμη NL3.



Σχήμα 4.13: Το ίδιο με το Σχ. 4.12, για τη δύναμη DD-ME2.



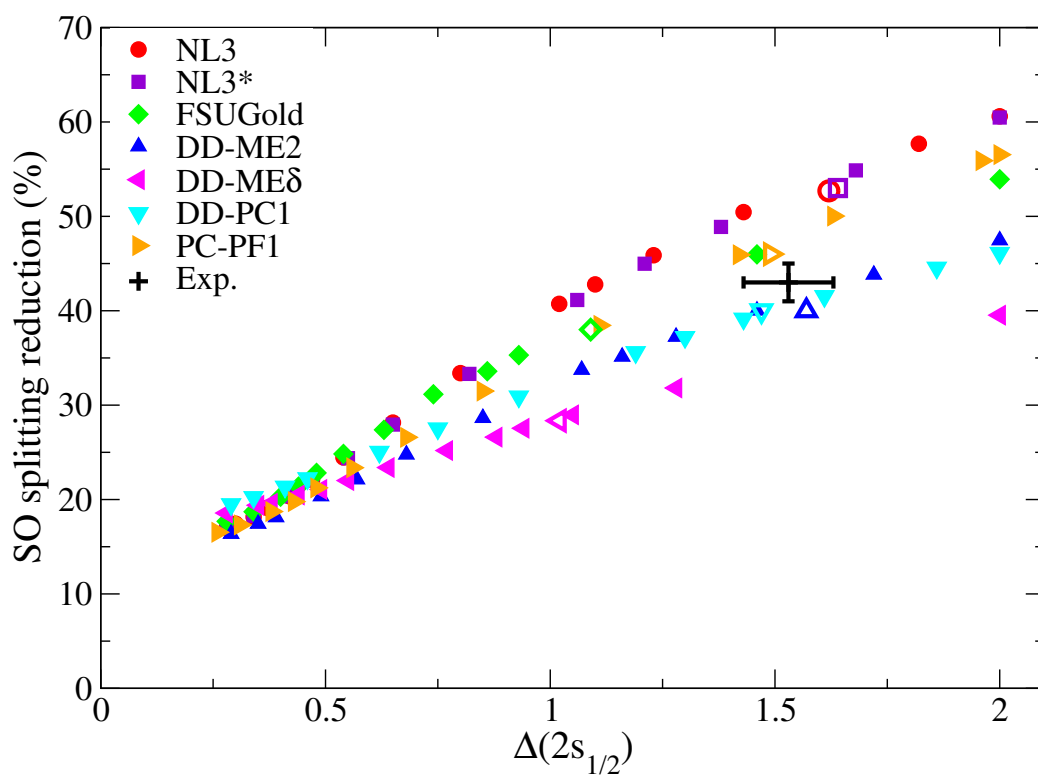
Σχήμα 4.14: Το ίδιο με το Σχ. 4.12, για τη δύναμη DD-PC1.

και να αυξήσουμε την ισχύ της δύναμης ζεύγους, η διαφορά ανάμεσα στον νετρονιακό $2p$ διαχωρισμό και στην πληρότητα της $\pi(2s_{1/2})$ τροχιάς ανάμεσα στους δύο πυρήνες τείνουν σε ένα ελάχιστο όριο. Βλέπουμε έτσι για τη δύναμη NL3 ότι η ελάχιστη διαφορά ανάμεσα στους p διαχωρισμούς είναι $\Delta(SO(p)) = 0.20$ (MeV) και για την πληρότητα $\Delta(2s_{1/2}) = 0.28$, παρομοίως για τη δύναμη DD-ME2 είναι $\Delta(SO(p)) = 0.22$ (MeV) και $\Delta(2s_{1/2}) = 0.29$ και για τη δύναμη DD-PC1 έχουμε $\Delta(SO(p)) = 0.22$ (MeV) και $\Delta(2s_{1/2}) = 0.29$. Ανάλογα αποτελέσματα έχουμε και για τις υπόλοιπες δυνάμεις.

Το τελευταίο και πολύ σημαντικό συμπέρασμα που προκύπτει από τη συγκεκριμένη ανάλυση, είναι η αξιοσημείωτη ταύτιση στην μορφή των καμπύλων των δύο ξεχωριστών διαγραμμάτων σε κάθε ένα από τα τρία συναρτησοειδή. Γεγονός που αποτελεί επιβεβαίωση της άμεσης και γραμμικής εξάρτησης ανάμεσα στην πληρότητα της $\pi(2s_{1/2})$ τροχιάς, δηλαδή της κατανομής της πυκνότητας των πρωτονίων, και στο μέγεθος των p διαχωρισμών των νετρονίων. Οπότε με αυτή τη διαδικασία, αποκτούμε μία επιπλέον μέθοδο για την διερεύνηση της εξάρτησης της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς από το ισοσπίν, για τα διάφορα συναλλοίωτα συναρτησοειδή πυκνότητας.

Με σκοπό να συνοψίσουμε αλλά και να συνδυάσουμε τα παραπάνω συμπεράσματα, παρουσιάζουμε τα συνολικά αποτελέσματα ολόκληρης της διαδικασίας για όλα τα συναρτησοειδή, στο διάγραμμα του Σχ.4.15. Σε αυτό φαίνεται η σχετική μείωση, σε ποσοστό επί τοις εκατό, του μεγέθους του p διαχωρισμού στην μετάβαση $^{36}\text{S} \rightarrow ^{34}\text{Si}$, σε σχέση με την διαφορά στην πληρότητα της πρωτονιακής κατάστασης $2s_{1/2}$. Σε κάθε σημείο ενός συναρτησοειδούς, αντιστοιχεί μία από τις διαφορετικές κατά 0.1 τιμές του παράγοντα διαβάθμισης της δύναμης TMR, που συνεπάγεται μία αντίστοιχη μεταβολή στην πρωτονιακή πληρότητα και μία αντίστοιχη σχετική μείωση του μεγέθους του p διαχωρισμού. Τα κενά σύμβολα είναι τα σημεία που αντιστοιχούν στην προηγούμενη υποενότητα, όπου είχαμε προσαρμόσει τον παράγοντα διαβάθμισης έτσι ώστε τα χάσματα ζευγαρώματος που προκύπτουν, να είναι ίσα με την εμπειρική τιμή της Εξ. 4.24. Συνεπώς το συγκεκριμένο διάγραμμα συμπυκνώνει ένα μεγάλο αριθμό παρόμοιων υπολογισμών και δείχνει με πιο ξεκάθαρο τρόπο την επίδραση των συσχετίσεων ζεύγους στο φαινόμενο που μελετάμε στον παρόν κεφάλαιο. Για λόγους σύγκρισης περιλαμβάνουμε επίσης και το σημείο που προκύπτει από τον συνδυασμό των πειραματικών τιμών [186, 187], για τα δύο αυτά μεγέθη.

Συμπερασματικά, με βάση αυτό το συνολικό διάγραμμα, έχουμε το ακόλουθο αποτέλεσμα. Για όλα τα συναρτησοειδή πυκνότητας, όσο αυξάνεται η ισχύς της αλληλεπίδρασης ζεύγους και μικραίνει η διαφορά στην πιθανότητα κατάληψης της τροχιάς $2s_{1/2}$, να μειώνεται και το ποσοστό της ξαφνικής μείωσης του μεγέθους του p διαχωρισμού. Φυσικά, όπως είπαμε και προηγουμένως από ένα σημείο και έπειτα όσο αυξάνεται η δύναμη ζευγαρώματος αυτή η διαδικασία τείνει σε ένα όριο. Στη συγκεκριμένη περίπτωση αυτό φαίνεται καθώς κινούμαστε



Σχήμα 4.15: Σχετική μείωση του διαχωρισμού λόγω σπιν-τροχιάς $2p_{1/2} - 2p_{3/2}$ σε σχέση με την μεταβολή στην πληρότητα της πρωτονιακής κατάστασης $2s_{1/2}$ μεταβαίνοντας από το ^{36}S στο ^{34}Si .

από τα δεξιά προς τ' αριστερά και όλα τα σημεία βρίσκονται όλο και πιο κοντά και συγκεντρώνονται σε μία μικρή περιοχή. Τέλος συνυπολογίζοντας τη θέση που έχει το σημείο που προκύπτει από τα πειραματικά δεδομένα μπορούμε να διακρίνουμε ανάμεσα στις διάφορες δυνάμεις, ποιες έχουν την εξάρτηση από το ισοσπίν ώστε να είναι πιο κοντά στο πείραμα. Με αυτόν τον τρόπο βρίσκουμε ότι τα πιο επιτυχή συναρτησοειδή σε αυτήν την περίπτωση είναι τα DD-ME2, DD-PC1 και PC-PF1.

4.4.3 Οι τανυστικές δυνάμεις και η σύζευξη σωματίδιου-δόνησης

Σε αυτό το τελευταίο κομμάτι επεκτείνουμε την καθιερωμένη διατύπωση των συναλλοιώτων συναρτησοειδών πυκνότητας με δύο τρόπους. Πρώτα εισάγουμε με άμεσο τρόπο έναν όρο που ισοδυναμεί με τανυστική συνιστώσα της πυρηνικής δύναμης, όπως εξηγείται στην ενότητα 3.1.2. Η συγκεκριμένη επέκταση παραμένει στην προσέγγιση του μέσου-πεδίου. Στη δεύτερη περίπτωση πηγαίνουμε πέρα από αυτό το επίπεδο συνυπολογίζοντας την σύζευξη των ημισωματιδιακών καταστάσεων με τα φωνόνια χαμηλής-ενέργειας που αντιστοιχούν σε συλλογικές διεγέρσεις της επιφάνειας, όπως αναλύθηκε στην ενότητα 3.2.

Η επίδραση της τανυστικής δύναμης

Όπως έχουμε ήδη διατυπώσει το τανυστικό μέρος της πυρηνικής δύναμης παίζει έναν ουσιαστικό ρόλο στην περιγραφή διάφορων πυρηνικών ιδιοτήτων. Στην δική μας περίπτωση επηρεάζει την μονοσωματιδιακή δομή [52, 56, 122]. Στην ενότητα 3.1.2 είδαμε ότι στη συναλλοιώτη θεωρία συναρτησοειδών πυκνότητας οι όροι ανταλλαγής συνήθως δεν λαμβάνονται υπόψιν, επειδή το θεώρημα Fierz δείχνει ότι, για δυνάμεις μηδενικής εμβέλειας, οι όροι αυτοί μπορούν να αναλυθούν σε ευθείς όρους με την αναπροσαρμογή των σταθερών σύζευξης στα διάφορα τμήματα σπιν-ισοσπίν της γενικότερης αλληλεπίδρασης. Από τη στιγμή που οι σταθερές σύζευξης προσαρμόζονται σε πειραματικά δεδομένα, αυτό αποτελεί μία λογική προσέγγιση για τα βαριά μεσόνια σ , ω , και ρ , τα οποία δημιουργούν δυνάμεις σχετικά μικρής εμβέλειας. Ο ευθύς όρος της ανταλλαγής ενός πιονίου δεν συνεισφέρει σε αυτό το επίπεδο εξαιτίας την διατήρησης της ομοτιμίας, όμως η μάζα του είναι μικρή και, συνεπώς, ο όρος ανταλλαγής πρέπει να εισαχθεί ξεχωριστά. Αυτός ο όρος στο συναρτησοειδές δημιουργεί στο επίπεδο του μέσου-πεδίου μία τανυστική δύναμη. Έχουμε λοιπόν μία σχετικιστική Hartree-Fock, πλέον, προσέγγιση, τα αποτελέσματα της οποίας παρουσιάζουμε στη συνέχεια.

Πιο συγκεκριμένα, εξετάζουμε στην ειδική περίπτωση του "bubble" πυρήνα ^{34}Si και της αντίστοιχης δραματικής μείωσης του p διαχωρισμού σπιν-τροχιάς συγκριτικά με τον πυρήνα ^{36}S , κατά πόσον η ξεχωριστή εισαγωγή της συγκεκριμένης τανυστικής δύναμης αλλάζει το μέγεθος του διαχωρισμού και το ποσοστό της

σχετικής μείωσης.

Η επίδραση της τανυστικής δύναμης ανάμεσα στα νετρόνια και στα πρωτόνια έχει αναλυθεί σε μεγάλη λεπτομέρεια με υπολογισμούς μέσου-πεδίου [122]. Ο σχετικός προσανατολισμός του σπιν και της στροφορμής είναι πολύ σημαντικός, αφού καθορίζει τον ελκτικό ή απωστικό χαρακτήρα αυτής της αλληλεπίδρασης. Για παράδειγμα, νουκλεόνια που καταλαμβάνουν μία πρωτονιακή τροχιά $j_>$ (όπου $j_{>,<} = \ell \pm 1/2$) μπορούν να αλλάξουν τις έμμεσες μονοσωματιδιακές ενέργειες νετρονίων που καταλαμβάνουν μία τροχιά $j'_>$ ή μία τροχιά $j'_<$ μέσα από την μονοπολική συνιστώσα της τανυστικής δύναμης. Εάν στις δύο καταστάσεις τα σπιν είναι αντιπαράλληλα, τότε η δύναμη είναι ελκτική, ενώ αν είναι παράλληλα η δύναμη είναι απωστική. Στην συγκεκριμένη περίπτωση της ανταλλαγής ενός πιονίου αυτό το φαινόμενο αναδείχθηκε και στην σχετικιστική προσέγγιση RHF, στην εργασία [56]. Η επιρροή της τανυστικής δύναμης είναι περισσότερο σημαντική ανάμεσα σε νετρόνια και πρωτόνια, και αυξάνει με την τροχιακή στροφορμή ℓ καθώς και με την ακτινική επικάλυψη ανάμεσα στις δύο τροχιές.

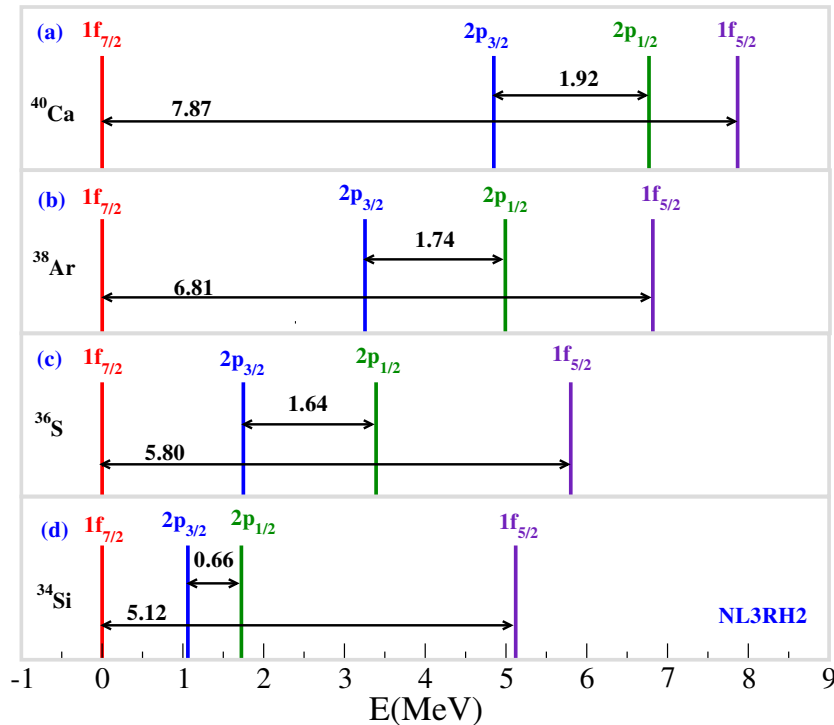
Στο Σχ. 4.16 παρουσιάζουμε με σχηματικό τρόπο τις θέσεις των νετρονιακών καταστάσεων $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ και $1f_{5/2}$ χρησιμοποιώντας την $1f_{7/2}$ ως κατάσταση αναφοράς. Οι ενέργειες προκύπτουν τώρα από τη σχετικιστική αλληλεπίδραση NL3RHF0.5, η οποία περιλαμβάνει τον τανυστικό όρο της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής ενός πιονίου ανάμεσα σε δύο νουκλεόνια, με τη μισή δύναμη που έχει η συγκεκριμένη αλληλεπίδραση στον ελεύθερο χώρο, βλ. 3.1.2. Οι υπολογισμοί αυτοί πραγματοποιήθηκαν με την προσέγγιση σταθερού χάσματος για το κομμάτι της σύζευξης ζεύγους, με τις τιμές του χάσματος να λαμβάνονται και εδώ από τον Πίνακα 4.3.

Στον Πίνακα 4.9 συγκρίνουμε αυτά τα αποτελέσματα με αυτό από που πήραμε με τη δύναμη NL3 στο επίπεδο Hartree με την ίδια δύναμη για το ζευγάρι όπως δίνονται στον Πίνακα 4.4 όπως και με αυτά των μη-σχετικιστικών Skyrme και Gogny αλληλεπιδράσεων SLy5_{T-2013} και DIST_{2c-2013}. Τα τελευταία αποτελούν τροποποιήσεις των συναρτησοειδών SLy5 και DIS, όπου οι τανυστικοί όροι έχουν συμπεριληφθεί και έχουν προσαρμοστεί μαζί με τις παραμέτρους του όρου σπιν-τροχιάς. Οι λεπτομέρειες δίνονται στο άρθρο [190]. Πρέπει να επισημάνουμε, όμως, ότι η τανυστική δύναμη που χρησιμοποιείται στους συγκεκριμένους μη-σχετικιστικούς υπολογισμούς είναι μηδενικής εμβέλειας, ενώ στους σχετικιστικούς υπολογισμούς που εκτελέσαμε εδώ, η τανυστική δύναμη είναι πεπερασμένης εμβέλειας εξαιτίας της μικρής μάζας του πιονίου. Στο Σχ. 4.17, έχουμε σχεδιάσει τις αντίστοιχες μονοσωματιδιακές ενέργειες σαν συνάρτηση του μαζικού αριθμού για το κανονικό συναρτησοειδές NL3 (μπλε καμπύλη) και για το συναρτησοειδές NL3RHF0.5 (κόκκινη καμπύλη). Επίσης, στο Σχ. 4.18 έχουμε σχεδιάσει την εξέλιξη των διαχωρισμών σπιν-τροχιάς όπως κάναμε και στα Σχ. 4.8 και 4.11, όμως τώρα δείχνουμε μόνο τη δύναμη NL3 έτσι ώστε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα ανάμεσα στο καθαρό μέσο-πεδίο, στην εισαγωγή συσχετίσεων ζεύγους και στην

	^{40}Ca		^{38}Ar		^{36}S		^{34}Si	
	f	p	f	p	f	p	f	p
NL3	7.21	1.69	6.87	1.64	6.44	1.68	5.56	0.74
NL3RHF0.5	7.87	1.92	6.82	1.74	5.80	1.64	5.12	0.66
SLy5 $_T$ -2013	6.77	1.76			5.53	1.07	4.41	0.61
D1ST $_{2c}$ -2013	6.90	1.73			5.65	1.26	4.75	0.73
Exp.	6.98	1.66			5.61	1.99	5.5	1.13

Splitting	$^{40}\text{Ca} \rightarrow ^{36}\text{S}$		$^{36}\text{S} \rightarrow ^{34}\text{Si}$	
	f	p	f	p
NL3	10%	1%	14%	56%
NL3RHF0.5	26%	14%	12%	60%
SLy5 $_T$ -2013	18%	39%	20%	43%
D1ST $_{2c}$ -2013	18%	27%	16%	42%
Exp.	20%	-20%	2%	43%

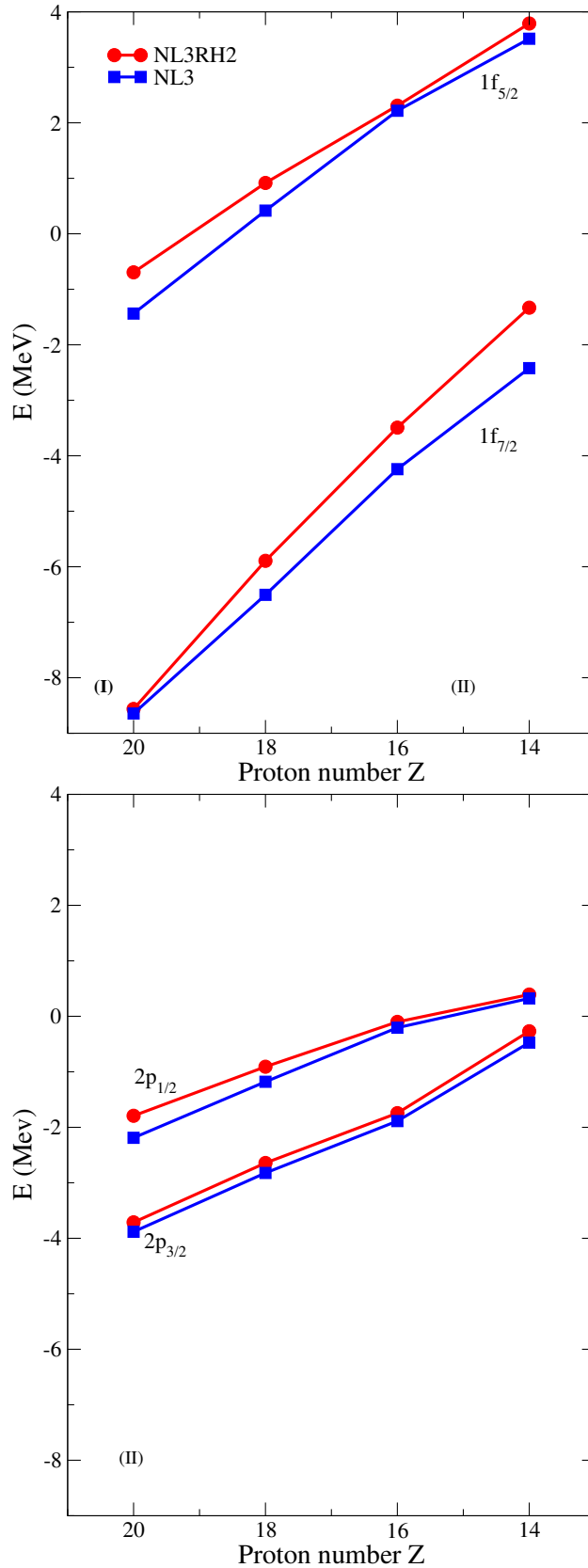
Πίνακας 4.9: Ενεργειακοί διαχωρισμοί σπιν-τροχιάς των f και p νετρονιακών καταστάσεων (πάνω μέρος) και σχετικές μειώσεις (κάτω μέρος), για την περίπτωση των τανυστικών δυνάμεων. Για σύγκριση παρουσιάζονται και τα αποτελέσματα από [190].



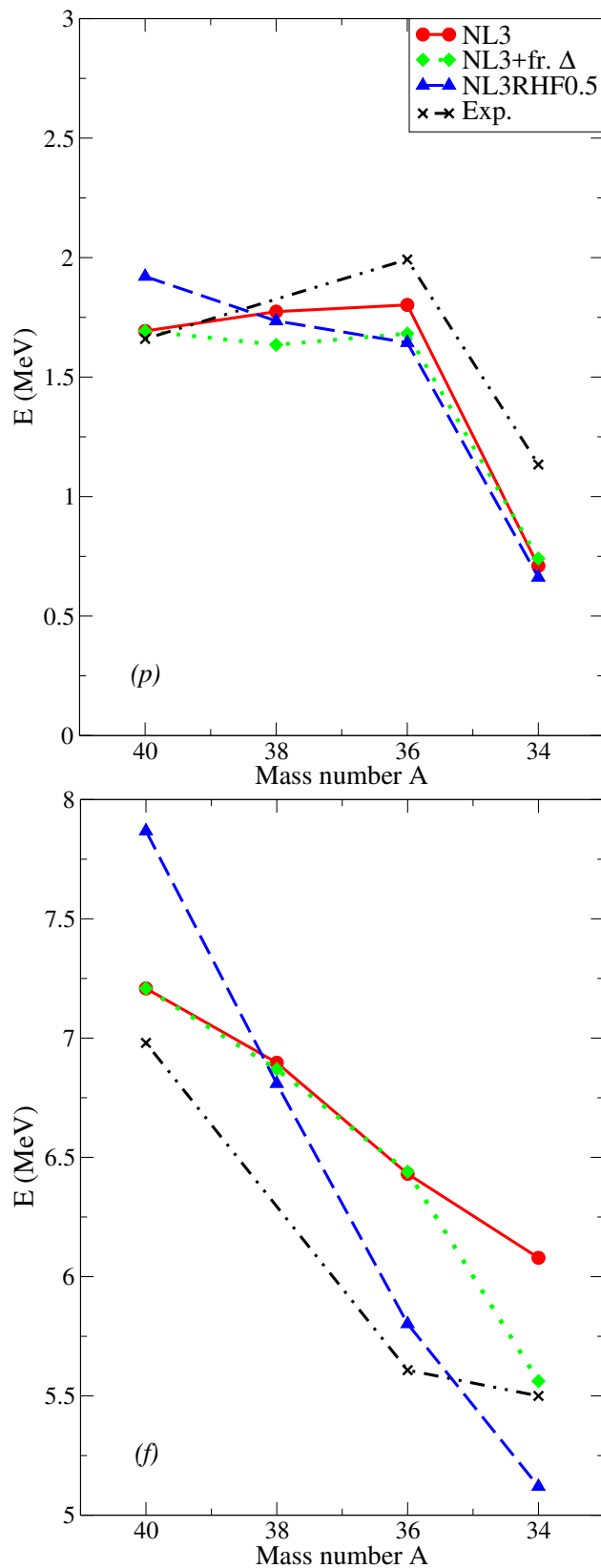
Σχήμα 4.16: Το ίδιο με το Σχ. 4.7 με την εισαγωγή του τανυστικού όρου της ανταλλαγής ενός πιονίου.

επίδραση του τανυστικού όρου.

Παρατηρούμε ότι η εισαγωγή της τανυστικής δύναμης έχει πιο έντονη επίδραση στην μετάβαση από τον πυρήνα ^{40}Ca στον ^{36}S απ' ό τι στην μετάβαση από τον ^{36}S στον ^{34}Si . Επιβεβαιώνοντας τον κανόνα που περιγράψαμε στην αρχή αυτής της ενότητας, βλέπουμε στο Σχ. 4.17, ότι όπως πηγαίνουμε από τον ^{40}Ca στον ^{36}S και αφαιρούμε τα τέσσερα πρωτόνια από την $j_{<}$ τύπου πρωτονιακή τροχιά $\pi 1d_{3/2}$, η ελκτική επίδραση της τανυστικής αλληλεπίδρασης στην $j_{>}$ τύπου νετρονιακή τροχιά $\nu 1f_{7/2}$ γίνεται μικρότερη και, συνεπώς, αυτή η κατάσταση μετατοπίζεται προς τα πάνω, από το αρχικό της σημείο στον πυρήνα ^{40}Ca . Από την άλλη η $j_{<}^{\prime}; \nu 1f_{5/2}$ κατάσταση, η οποία στον ^{40}Ca απωθείται από τα τέσσερα πρωτόνια της $\pi 1d_{3/2}$ κατάστασης, μετατοπίζεται προς τα κάτω καθώς πηγαίνουμε στον ^{36}S . Ο συνδυασμός όλων αυτών των φαινομένων δημιουργεί μία ενίσχυση της μείωσης του μεγέθους των f διαχωρισμών στην μετάβαση από ^{40}Ca στον ^{36}S . Αυτό φαίνεται και από την αρκετά πιο απότομη σε σχέση με τις υπόλοιπες, μπλε καμπύλη στο κάτω διάγραμμα των f διαχωρισμών του Σχ. 4.18 που αντιστοιχεί στην περίπτωση του NL3RHF0.5 συναρτησοειδούς. Η ίδια συμπεριφορά παρατηρείται επίσης για τις $j_{>}^{\prime}; \nu 2p_{3/2}$ και $j_{<}^{\prime}; \nu 2p_{1/2}$ νετρονιακές καταστάσεις, παρόλο



Σχήμα 4.17: Μονοσωματιδιακές ενέργειες των νετρονιακών καταστάσεων $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ σε σχέση με τον μαζικό αριθμό για τα συναρτησοειδή NL3 και NL3RHF0.5



Σχήμα 4.18: Εξέλιξη των p και f διαχωρισμών σπιν-τροχιάς για το καθαρό μέσο πεδίο, την προσέγγιση σταθερού χάσματος ζευγαρώματος και την εισαγωγή τανυστικής δύναμης με το συναρτησοειδές NL3.

που η επίδραση στο απόλυτο μέγεθος του διαχωρισμού σπιν-τροχιάς, είναι αρκετά μικρότερη σε αυτήν την περίπτωση.

Στην περίπτωση της μετάβασης από τον πυρήνα ^{36}S στον πυρήνα ^{34}Si με την δομή της κεντρικής "φούσκας" στην πυκνότητα, βλέπουμε στο Σχ. 4.17 ότι τόσο οι f όσο και οι p καταστάσεις παραμένουν στην ίδια απόσταση σε σχέση με τους υπολογισμούς με την αρχική δύναμη NL3. Αυτό δείχνει ότι η μεγάλη ελάττωση του p διαχωρισμού είναι καθαρά ένα φαινόμενο που οφείλεται στην αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς, και αυτό το συμπέρασμα συμφωνεί και με τα αποτελέσματα των μη-σχετικιστικών υπολογισμών.

Τέλος, υπολογίσαμε την πληρότητα μέσα από τις πιθανότητες κατάληψης της $2s_{1/2}$ πρωτονιακής κατάστασης. Για το συναρτησοειδές με την τανυστική δύναμη έχει τιμή 0.18, η οποία είναι μεγαλύτερη από την τιμή 0.10 που υπολογίσαμε για το συναρτησοειδές NL3 με την ίδια προσέγγιση για τις συσχετίσεις ζεύγους. Αυτό υποδεικνύει ότι η τανυστική αλληλεπίδραση αναιρεί την σε κάποιο βαθμό την επίδραση των συσχετίσεων ζεύγους όπως την περιγράψαμε στην προηγούμενη ενότητα, και έτσι οδηγεί σε μικρότερο μέγεθος, από 0.74 MeV στα 0.66 MeV και σε ελαφρώς μεγαλύτερη σχετική ελάττωση, από 56% σε 60%, για τον συγκεκριμένο p διαχωρισμό σπιν-τροχιάς.

Η επίδραση της σύζευξης ημι-σωματιδίου δόνησης

Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 3.2, η επέκταση της σύζευξης σωματιδίου-δονήσεων περιγράφει την μονοσωματιδιακή κίνηση στην παρουσία των συλλογικών δονήσεων. Ξεκινώντας από το στατικό μέσο-πεδίο, προστίθενται όροι οι οποίοι περιγράφουν τη συγκεκριμένη σύζευξη. Οι όροι αυτοί εξαρτώνται από την ενέργεια. Η σύζευξη προκαλείται από τους δεσμούς της μορφής

$$\gamma_{12}^{\mu} = \sum_{34} \langle 14|V|23 \rangle \delta\rho_{34}^{\mu}, \quad (4.25)$$

όπου $\langle 14|V|23 \rangle$ είναι τα στοιχεία πίνακα της αλληλεπίδρασης και $\delta\rho_{34}^{\mu}$ είναι οι μεταβατικές πυκνότητες των αντίστοιχων φωνονίων.

Τελικά, το ενεργειακά εξαρτώμενο κομμάτι της αυτό-ενέργειας $\Sigma(\omega)$ βρίσκεται από την δεύτερης τάξης σύζευξη σωματιδίου-δόνησης:

$$\Sigma_{12}^{(e)}(\omega) = \sum_{k\mu} \left(\frac{\gamma_{1k}^{\mu} \gamma_{2k}^{\mu*}}{\omega - \varepsilon_3 - \Omega^{\mu} + i\eta} + \frac{\gamma_{k1}^{\mu} \gamma_{k2}^{\mu*}}{\omega - \varepsilon_3 + \Omega^{\mu} - i\eta} \right), \quad (4.26)$$

όπου ένα υποθετικό φωνόνιο με συχνότητα Ω_{μ} εκπέμπεται μετακινώντας το σωματίδιο από το επίπεδο 1 στον επίπεδο k .

Συνδυάζοντας το ενεργειακά εξαρτώμενο κομμάτι της αυτό-ενέργειας με το στατικό κομμάτι έχουμε την πλήρη αυτό-ενέργεια Σ . Αυτή περιέχει όλες τις δυνάμεις οι οποίες δρουν πάνω σε ένα μεμονωμένο νουκλεόνιο. Είναι μη-τοπική στις

χωρικές και χρονικές συντεταγμένες, κάτι που δημιουργεί την εξάρτηση από την ενέργεια στον μετασχηματισμό Fourier:

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \tilde{\Sigma}(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Sigma^{(e)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \quad (4.27)$$

με το στατικό κομμάτι $\tilde{\Sigma}$ της αυτό-ενέργειας, δηλαδή την χαμιλτονιανή Dirac της βασικής κατάστασης να είναι:

$$\hat{h} = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta(m + S) + V = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta m + \tilde{\Sigma}. \quad (4.28)$$

Αυτό οδηγεί στην εξίσωση Dyson που περιγράφει την κίνηση των ημι-σωματιδίων στην παρουσία του δονούμενου μέσου-πεδίου. Μπορεί να γραφτεί με όρους συναρτήσεων Green ως

$$(\varepsilon - \hat{h} - \Sigma^e(\varepsilon))G(\varepsilon) = \beta, \quad (4.29)$$

και στην βάση Dirac, η οποία διαγωνοποιεί το εξαρτώμενο από την ενέργεια κομμάτι της εξίσωσης Dirac, παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$(\varepsilon - \varepsilon_k - \Sigma_k^e(\varepsilon))G_k(\varepsilon) = 1. \quad (4.30)$$

Για κάθε κβαντικό αριθμό k , υπάρχουν αρκετές λύσεις $\varepsilon_k^{(\lambda)}$, που χαρακτηρίζονται από τον δείκτη λ . Έτσι, η εισαγωγή της σύζευξης ανάμεσα στις μονοσωματιδιακές καταστάσεις και τις δονήσεις οδηγεί στη διάσπαση κάθε μίας μονοσωματιδιακής κατάστασης k . Λαμβάνοντας υπόψιν τη δομή των πόλων της αυτό-ενέργειας (4.26), έχουμε σαν αποτέλεσμα έναν έμμεσο φασματοσκοπικό παράγοντα $S_k^{(\lambda)}$, ο οποίος καθορίζει την πιθανότητα κατάληψης κάθε φράγματος λ της κατάστασης k .

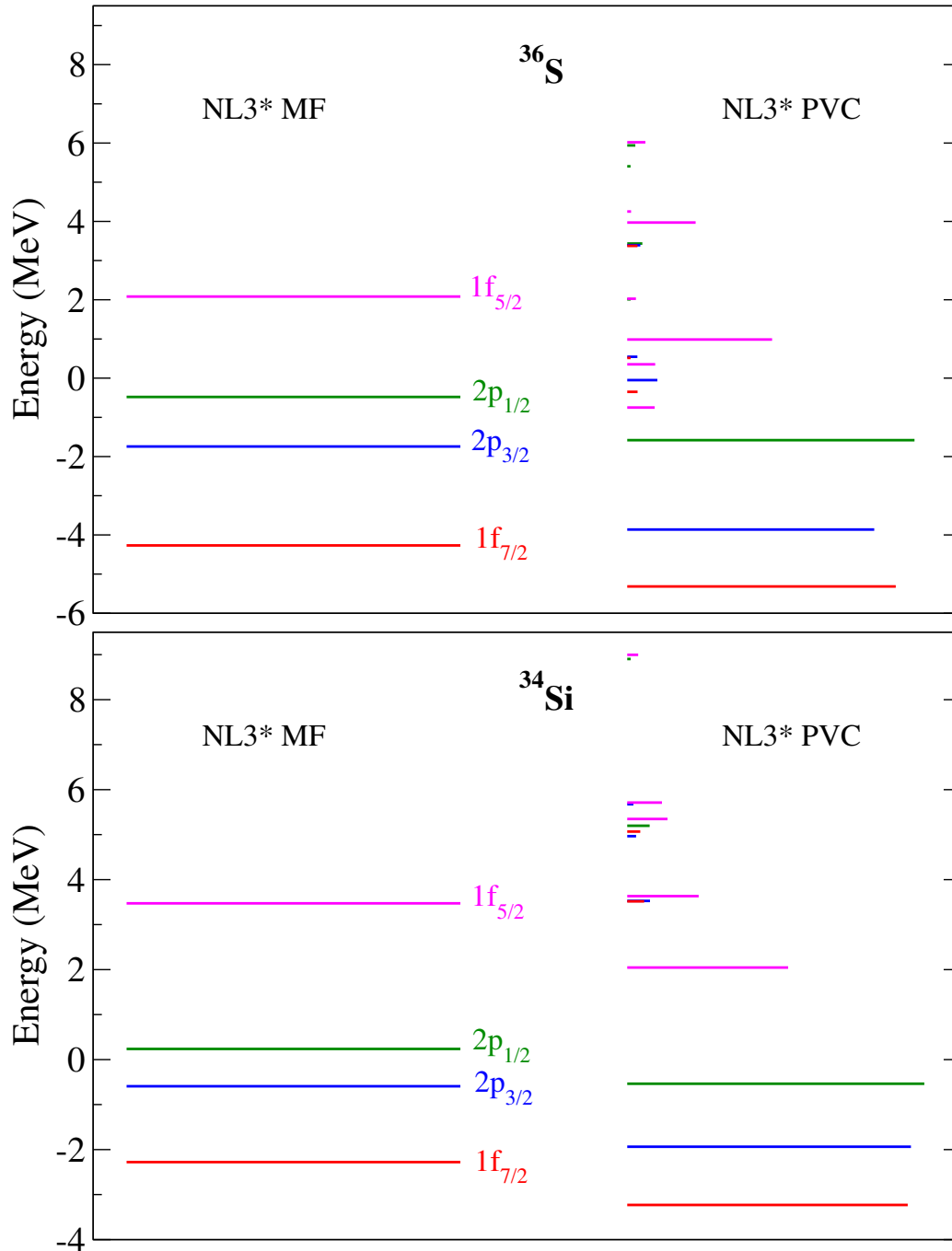
Για τους υπολογισμούς της παρούσας ενότητας, χρησιμοποιήσαμε το συναρτησοειδές πυκνότητας NL3*, καθώς και την προσέγγιση σταθερού χάσματος στα $\Delta = 2$ MeV, το οποίο είναι συνεπές με την εμπειρική τιμή του $12.0/\sqrt{A}$ για την περιοχή των πυρήνων που μελετάμε. Οι υπολογισμοί περιορίστηκαν στους δύο πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si . Τα αποτελέσματα της εφαρμογής της PVC προσέγγισης όπως την περιγράψαμε, δίνονται στον Πίνακα 4.10 όπου για κάθε μία από τις $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ νετρονιακές καταστάσεις στους δύο πυρήνες, δίνουμε τις ενέργειες των σημαντικότερων φραγμάτων στα οποία διασπώνται, δηλαδή της τιμές $\varepsilon_k^{(\lambda)}$ μετά την επίλυση της εξίσωσης 4.30. Παράλληλα δίνουμε και τους αντίστοιχους φασματοσκοπικούς παράγοντες για κάθε φράγμα, οι οποίοι όπως είπαμε προκύπτουν ως τα υπόλοιπα (residue) των πόλων της αυτό-ενέργειας (4.26). Επίσης στο Σχ. 4.19 έχουμε τη διαγραμματική απεικόνιση αυτών των αποτελεσμάτων σε αντιπαράθεση με το αντίστοιχο φάσμα των μονοσωματιδιακών καταστάσεων για την περίπτωση στατικού μέσου-πεδίου.

Πρακτικά αυτό που βλέπουμε είναι ότι κάθε μία κατάσταση διασπάται σε αρκετές επιμέρους καταστάσεις, με αυτήν που βρίσκεται ενεργειακά χαμηλότερα

^{36}S							
1f7/2		2p3/2		2p1/2		1f5/2	
energy	residue	energy	residue	energy	residue	energy	residue
-5.32	0.804	-3.86	0.740	-1.58	0.861	0.99	0.434
-0.35	0.031	-0.05	0.090	3.43	0.045	3.97	0.205
3.38	0.031	3.39	0.039	5.94	0.024	0.35	0.084
-18.51	0.017	0.55	0.030	2.01	0.010	-0.75	0.082
0.52	0.010			5.41	0.010	6.02	0.054
						2.03	0.026

^{34}Si							
1f7/2		2p3/2		2p1/2		1f5/2	
energy	residue	energy	residue	energy	residue	energy	residue
-3.23	0.840	-1.94	0.850	-0.54	0.899	-0.54	0.899
3.52	0.051	3.53	0.068	5.20	0.068	5.20	0.068
5.07	0.039	4.97	0.027	8.91	0.010	8.91	0.010
		5.68	0.019				

Πίνακας 4.10: Οι ενέργειες σε (MeV) των κυριότερων φραγμάτων των νετρονιακών καταστάσεων $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ μετά την εφαρμογή της PVC επέκτασης στους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si , και οι αντίστοιχοι φασματοσκοπικοί παράγοντες.



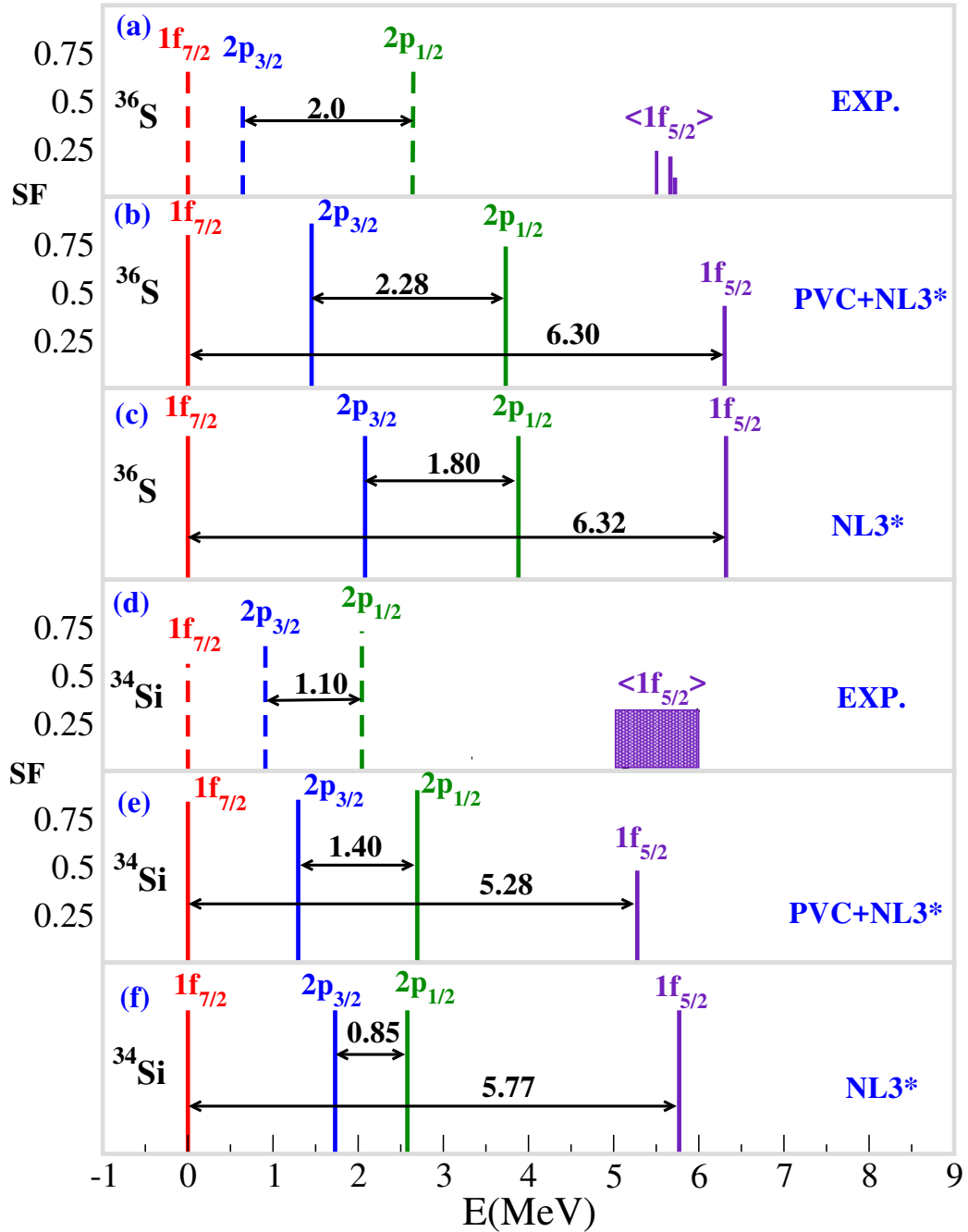
Σχήμα 4.19: Το φάσμα των νετρονιακών καταστάσεων $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ και $1f_{5/2}$ για το στατικό πεδίο και η κατανομή των αντίστοιχων φραγμάτων με την εισαγωγή της σύζευξης σωματιδίου-δόνησης, για τους πυρήνες ^{36}S (πάνω μέρος) και ^{34}Si (κάτω μέρος)

από την αρχική, να παίρνει συνήθως και την αρκετά μεγαλύτερη συνεισφορά. Για παράδειγμα η κατάσταση $2p_{3/2}$ στο ^{36}S χωρίζεται σε τέσσερα φράγματα, όπου αυτό που έχει την χαμηλότερη ενέργεια -3.86 (MeV) να έχει και τον μεγαλύτερο φασματοσκοπικό παράγοντα ίσο με 0.74 . Υπάρχουν ελάχιστες εξαιρέσεις σε αυτόν τον γενικό κανόνα όπως στην παρούσα περίπτωση είναι η κατάσταση $1f_{5/2}$ στην οποία τρία φράγματα έχουν σχετικά μεγάλη πιθανότητα κατάληψης, με το πιο χαμηλό ενεργειακά να έχει πολύ μικρότερη τιμή. Κάτι αντίστοιχο ισχύει και για την κατάσταση $1f_{7/2}$.

Το σημαντικό πλεονέκτημα αυτής της διαδικασίας, ύστερα από την επίλυση της εξίσωσης Dyson (4.30), είναι ότι έχουμε τη δυνατότητα να απομονώσουμε τις κυριότερες συνεισφορές σε κάθε μία μονοσωματιδιακή κατάσταση και να συγκρίνουμε τις ενέργειες απευθείας με τα πειραματικά αποτελέσματα από το γνωστό πλέον πείραμα [186], όπως φαίνεται και στον Πίνακα 4.11.

Αυτό γίνεται επίσης σχηματικά και στο Σχ. 4.20 όπου συγκρίνουμε τα αποτελέσματα των PVC υπολογισμών για τους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si με τις πειραματικές τιμές. Πιο συγκεκριμένα, δείχνουμε τη θέση των κύριων φραγμάτων και τους διαχωρισμούς ανάμεσα στις f και p καταστάσεις καθώς και τους αντίστοιχους φασματοσκοπικούς παράγοντες. Η πειραματικά παρατηρούμενη σχετική μείωση του διαχωρισμού σπιν-τροχιάς είναι για τις p είναι στο 43%. Είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα αποτελέσματα από τους θεωρητικούς υπολογισμούς με την σύζευξη σωματιδίων-δόνησης, που εμφανίζουν μία σχετική μείωση στο 39%. Και στις δύο περιπτώσεις αυτοί είναι οι ενεργειακοί διαχωρισμοί των κύριων φραγμάτων. Να σημειωθεί, ότι στους PVC υπολογισμούς δεν έχουμε συμπεριλάβει φωνόνια που μεταβάλλουν το ισοσπίν, όπως γίνεται για παράδειγμα στο άρθρο [202]. Έχει παρατηρηθεί ότι η εισαγωγή αυτών των φωνονίων προκαλεί μια επιπρόσθετη διάσπαση και μετατόπιση των κυρίαρχων φραγμάτων, φέρνοντας τα αποτελέσματα σε καλύτερη συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα. Όμως η τελευταία προσέγγιση είναι, μέχρι στιγμής, εφαρμόσιμη μόνο σε μαγικούς πυρήνες και όχι σε πυρήνες με ανοιχτούς φλοιούς, όπως οι ^{36}S και ^{34}Si .

Στο Σχ. 4.20 παρουσιάζουμε σε αναλογία τις θέσεις των νετρονιακών καταστάσεων $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ και $1f_{5/2}$ πάλι έχοντας την $1f_{7/2}$ ως κατάσταση αναφοράς, για τους πυρήνες ^{37}S (διαγράμματα (a,b,c)) και ^{35}Si (διαγράμματα (d,e,f)). Τα πειραματικά δεδομένα του Ref. [186] στα διαγράμματα (a) και (d) συγκρίνονται με τα αποτελέσματα των PVC υπολογισμών με το συναρτησοειδές πυκνότητας NL3*, στα διαγράμματα (b) και (e). Σε αυτό το σχήμα οι πειραματικές ενέργειες καθώς και οι ενέργειες των PVC υπολογισμών αντιστοιχούν στα κυρίαρχα φράγματα των αντίστοιχων διασπασμένων επιπέδων. Μόνο για την τροχιά $1f_{5/2}$ δείχνουμε στο διάγραμμα (a) την πειραματική διάσπαση και στο διάγραμμα (d) την περιοχή που προκύπτει από πολλαπλά φράγματα. Με σκοπό την μελέτη της επίδρασης της σύζευξης σωματιδίου δόνησης δείχνουμε στα διαγράμματα (c) και (f) υπολογισμούς με το ίδιο συναρτησοειδές πυκνότητας χωρίς τη συγκεκριμένη σύζευξη.



Σχήμα 4.20: Κατανομή των κύριων φραγμάτων των νετρονιακών καταστάσεων για το ^{36}S (διαγ. (a)) και ^{34}Si (διαγ. (d)) όπως δίνονται στο πείραμα [186] και η ίδια κατανομή με την επέκταση PVC για τη δύναμη NL3* (διαγ. (b) και (e)). Τα διαγράμματα (c) και (f) δείχνουν τα αποτελέσματα για την περίπτωση της ίδιας δύναμης χωρίς τη σύζευξη σωματιδίου-δόνησης.

		^{36}S		^{34}Si	
Splitting	f	p	f	p	
NL3* with PVC	6.30	2.28	5.28	1.40	
Exp.	5.61	1.99	5.5	1.13	

$^{36}\text{S} \rightarrow ^{34}\text{Si}$		
Splitting	f	p
NL3* with PVC	16%	39%
Exp.	2%	43%

Πίνακας 4.11: Σύγκριση των διαχωρισμών σπιν-τροχιάς (πάνω μέρος) και των σχετικών μειώσεων (κάτω μέρος) των κύριων φραγμάτων ανάμεσα στη σχετικιστική προσέγγιση PVC και τα αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα.

Βρίσκουμε ότι και στους δύο πυρήνες οι διαχωρισμοί σπιν-τροχιάς των $1f$ τροχιακών αναπαράγεται σχετικά καλά. Η σύζευξη σωματιδίου δονήσεων έχει μικρή επιρροή σε αυτόν τον διαχωρισμό. Από την άλλη, όλες οι $2p$ τροχίες μετατοπίζονται πιο χαμηλά ενεργειακά πλησιάζοντας την $1f_{7/2}$ τροχιά όπως ακριβώς παρατηρείται και στο πείραμα. Είναι γνωστό, ότι αυτό το φαινόμενο είναι σημαντικό για τροχίες κοντά στην επιφάνεια Fermi, δηλαδή στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι μεγαλύτερο για την $2p_{3/2}$ τροχιά απ' ότι για την $2p_{1/2}$ τροχιά. Σαν αποτέλεσμα, ο διαχωρισμός των $2p$ καταστάσεων αυξάνεται σημαντικά σε μέγεθος από τη σύζευξη σωματιδίου δόνησης. Σε σύγκριση με το κατά πολύ μικρότερο αντίστοιχο μέγεθος του ίδιου διαχωρισμού χωρίς την επέκταση PVC πέρα από το μέσο-πεδίο, τώρα είναι αρκετά πιο κοντά στην πειραματική τιμή.

4.5 Συμπεράσματα

Σε αυτήν τη μελέτη υπολογίσαμε τις μονοσωματιδιακές ενέργειες $1f_{7/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ και $1f_{5/2}$ τροχίων με σκοπό να διερευνήσουμε τους διαχωρισμούς λόγω σπιν-τροχιάς και την εξέλιξή τους καθώς διατρέχουμε τους ισότονους πυρήνες με $N=20$: ^{40}Ca , ^{38}Ar , ^{36}S , και ^{34}Si . Κάναμε χρήση αρκετών σχετικιστικών συναρτησοειδών πυκνότητας τριών διαφορετικών τύπων:

- Συναρτησοειδή μη γραμμικής αλληλεπίδρασης μεταξύ των μεσονίων: NL3,

NL3* και FSUGold.

- Συναρτησοειδή ανταλλαγής μεσονίων με σταθερές σύζευξης εξαρτώμενες από την πυκνότητα: DD-ME2 και DD-MEδ.
- Συναρτησοειδή σημειακής σύζευξης με σταθερές εξαρτώμενες από την πυκνότητα: DD-PC1 και PC-PF1.

Επιπλέον, εφαρμόσαμε δύο διαφορετικές μεθόδους εισαγωγής των συσχετίσεων ζεύγους, την προσέγγιση σταθερού χάσματος και την διαχωρίσιμη δύναμη ζευγαρώματος TMR. Ο σκοπός μας ήταν να μελετήσουμε την επίδραση των συσχετίσεων ζεύγους, μικρής εμβέλειας, στο μέγεθος και την μείωση των χασμάτων σπιν-τροχιάς. Τέλος, εξετάσαμε συγκεκριμένες επεκτάσεις που είναι πέρα από το απλό Hartree πλαίσιο, δηλαδή την εισαγωγή της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής ενός πιονίου ανάμεσα στα νουλεόνια, η οποία ισοδυναμεί με μία τανυστική συνιστώσα επαγόμενης πυρηνικής δύναμης και τη σύζευξη σωματιδίου δόνησης που περιλαμβάνει συσχετίσεις μεταξύ των μονοσωματιδιακών καταστάσεων με συλλογικές διεγέρσεις, και είναι πέρα από την προσέγγιση μέσου πεδίου.

Γενικά, παρατηρούμε την ποιοτική εικόνα που προκύπτει και από τις πειραματικές έρευνες. Πρώτον, καμία αξιοσημείωτη μεταβολή στα μεγέθη τόσο των f όσο και των p διαχωρισμών για τους τρεις πρώτους πυρήνες της ισοτονικής αλυσίδας. Δεύτερον, μία σημαντική μείωση και ξαφνική ελάττωση του διαχωρισμού των $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ νετρονιακών καταστάσεων όταν πηγαίνουμε από τον ^{36}S στον ^{34}Si , που οφείλεται στην ύπαρξη της κεντρικής κοιλότητας στην κατανομή της πυκνότητας του ^{34}Si .

Στο επίπεδο του καθαρού μέσου-πεδίου συγκριτικά με τα αντίστοιχα μη-σχετικιστικά αποτελέσματα, τα περισσότερα σχετικιστικά συναρτησοειδή πυκνότητας εμφανίζουν μεγαλύτερα απόλυτα μεγέθη των διαχωρισμών σπιν-τροχιάς. Στην ιδιαίτερη περίπτωση της ξαφνικής μείωσης του p διαχωρισμού στον πυρήνα ^{34}Si η σχετική μείωση είναι πιο έντονη και φαίνεται να υπερεκτιμούν την επίδραση της κοιλότητας στον όρο σπιν-τροχιάς.

Η ενσωμάτωση των συσχετίσεων ζεύγους στους τρεις πυρήνες με ανοιχτούς φλοιούς, επιφέρει συγκεκριμένες αλλαγές. Για τον πυρήνα ^{38}Ar , το ζευγάρι, επηρεάζει κυρίως την πρωτονιακή τροχιά $1d$ με τα τελευταία δύο πρωτόνια να καταλαμβάνουν την $1d_{3/2}$ κατάσταση. Εδώ η επιφανειακή πυκνότητα γίνεται πιο διάχυτη και το δυναμικό σπιν-τροχιάς έχει μεγαλύτερη επικάλυψη με τις f νετρονιακές καταστάσεις, κάνοντας τους αντίστοιχους διαχωρισμούς ελαφρώς μεγαλύτερους. Στον πυρήνα ^{36}S έχουμε μεταβολή στην κεντρική κατανομή της πυκνότητας με μικρότερο μέγεθος της κεντρικής κορυφής με μία τάση να γίνει επίπεδη. Αυτό συνάγεται και από την μειωμένη πληρότητα της $2s_{1/2}$ πρωτονιακής κατάστασης η οποία είναι τώρα μικρότερη από 2. Συνεπώς, η κεντρική ελκτική δύναμη

σπιν-τροχιάς που εμφανίζεται σε αυτόν τον πυρήνα εμφανίζεται ασθενέστερη, επηρεάζοντας περισσότερο τους νετρονιακούς p διαχωρισμούς που είναι σχετικά μικρότεροι.

Για την περίπτωση του πυρήνα ^{34}Si οι συσχετίσεις ζεύγους μειώνουν το κοίλωμα στο κέντρο της πυρηνικής πυκνότητας. Αυτό οφείλεται στην αύξηση της πληρότητας της $2s_{1/2}$ πρωτονιακής κατάστασης, η οποία στην περίπτωση του καθαρού μέσου-πεδίου είναι εντελώς άδεια. Σε αυτό το φαινόμενο υπάρχει μία ποσοτική διαφορά ανάμεσα στις δύο μεθόδους εισαγωγής των συσχετίσεων ζεύγους. Η πιθανότητα κατάληξης που υπολογίζεται με την προσέγγιση σταθερού χάσματος μας δίνει μιας πληρότητα της τάξης του 0.10 για τα περισσότερα συναρτησοειδή. Στην περίπτωση της δύναμης ζεύγους TMR είναι σχεδόν διπλάσια. Οπότε η μείωση της κεντρικής κοιλότητας είναι πιο έντονη στην τελευταία περίπτωση. Όπως είδαμε η μείωση αυτή έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση του μεγέθους του p διαχωρισμού που στην περίπτωση της TMR είναι περίπου 0.1 MeV. Συνυπολογίζοντας και την προηγούμενη ανάλυση για τον πυρήνα ^{36}S , οι συσχετίσεις ζεύγους, φέρνουν την σχετική ελάττωση αυτού του διαχωρισμού πιο κοντά στην πειραματική τιμή που προκύπτει από τα κύρια φράγματα του ενεργειακού φάσματος.

Στο τέλος, πήγαμε πέρα από το συνηθισμένο επίπεδο Hartree και συμπεριλάβαμε δύο φαινόμενα, τα οποία έχουν, εν γένει, σημαντική επίδραση στη μονοσωματιδιακή δομή, τον τανυστικό όρο και τη σύζευξη σωματιδίου-δονήσεων.

Σε ότι αφορά την τανυστική συνιστώσα της ανταλλαγής ενός πιονίου προέκυψε ότι τελικά έχει σχετικά μικρή επίδραση. Δρα σε κάποιο βαθμό στην αντίθετη κατεύθυνση από τις συσχετίσεις ζεύγους. Ενισχύει ξεκάθαρα την μείωση των διαχωρισμών σπιν-τροχιάς για τις f τροχιές και σε μικρότερη έκταση για τις p τροχιές καθώς πηγαίνουμε από τον ^{40}Ca στον ^{36}S , αναδεικνύοντας τον τανυστικό χαρακτήρα αυτής της μείωσης. Από την άλλη μεριά, για την μετάβαση $^{36}\text{S} \leftarrow ^{34}\text{Si}$ τα απόλυτα μεγέθη των διαχωρισμών μειώνονται ελάχιστα στους δύο πυρήνες, έτσι οι σχετικές μειώσεις παραμένουν πρακτικά ίδιες, υποδεικνύοντας την ξεκάθαρη προέλευσή του φαινομένου της ξαφνικής μείωσης από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς. Παρόμοιο φαινόμενο παρατηρείται και για την μη-σχετικιστική περίπτωση [190] όπως φαίνεται και στους πίνακες 4.1 και 4.9.

Στην τελευταία επέκταση, είδαμε ότι η σύζευξη σωματιδίου δονήσεων που είναι πέρα από την προσέγγιση μέσου-πεδίου δρα προς την ίδια κατεύθυνση με τις συσχετίσεις ζεύγους. Βρήκαμε ότι η σχετική μείωση του διαχωρισμού ανάμεσα στις $2p_{3/2}$ και $2p_{1/2}$ νετρονιακές καταστάσεις είναι λιγότερο έντονη. Αυτό είναι συνεπές με την γενική επίδραση της σύζευξης σωματιδίου-δονήσεων η οποία δημιουργεί πιο πυκνό φάσμα καταστάσεων κοντά στην επιφάνεια Fermi. Ακόμη, παρατηρήσαμε ότι η συγκεκριμένη επέκταση παρέχει καλύτερη περιγραφή των πειραματικών δεδομένων για τους πυρήνες ^{36}S και ^{34}Si , τόσο στη θέση των νετρονιακών καταστάσεων όσο και στο μέγεθος των μεταξύ τους διαφορών

Σαν επίλογο αυτής της ενότητας, πρέπει να αναφέρουμε ότι υπάρχουν συγκε-

κριμένα ανοιχτά ερωτήματα: Σχεδόν όλα τα συναρτησοειδή που χρησιμοποιήσαμε έχουν προσαρμοστεί σε πειραματικά δεδομένα από συλλογικές ιδιότητες, όπως είναι η ενέργεια σύνδεση και οι πυρηνικές ακτίνες. Μόνο η ισχύς της σχετικιστικής τανυστικής δύναμης στο συναρτησοειδές NL3RHF0.5 έχει βελτιστοποιηθεί συνυπολογίζοντας παράλληλα και δεδομένα από την μονοσωματιδική δομή των ισοτόπων κασσίτερου. Θεωρητικά, οι παράμετροι όλων αυτών των συναρτησοειδών θα έπρεπε να προσαρμοστούν μόνο αφού έχουμε εισάγει στο αρχικό πλαίσιο τις επιπρόσθετες επεκτάσεις της τανυστικής συνιστώσας και της σύζευξης σωματιδίου-δονήσεων. Κάτι τέτοιο όμως αποτελεί μία αρκετά φιλόδοξη προσέγγιση για το μέλλον, όμως έχουμε δείξει στην παρούσα έρευνα τουλάχιστον την επίδραση και την σχετική σημασία των διάφορων επιπρόσθετων συσχετίσεων στο συμβατικό επίπεδο Hartree, για μία επιτυχημένη περιγραφή των διαχωρισμών που οφείλονται στην αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς και στην εξάρτηση αυτής από το ισοσπίν.

Κεφάλαιο 5

Κ-Ισομερείς πυρήνες

5.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο, χρησιμοποιήσαμε τη θεωρία των συναλλοίωτων συναρτησοειδών πυκνότητας στην προσέγγιση του μέσου-πεδίου, για να περιγράψουμε τους ενεργειακούς διαχωρισμούς που οφείλονται στην αλληλεπίδραση σπιντροχιάς. Πιο συγκεκριμένα, μελετώντας τη μονοσωματιδιακή δομή της βασικής κατάστασης ισότονων πυρήνων με $N = 20$, μπορέσαμε να περιγράψουμε το φαινόμενο της σημαντικής μείωσης του $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ νετρονιακού διαχωρισμού στον “bubble” πυρήνα ^{34}Si . Όπως δείξαμε τα συναρτησοειδή DD-ME2 και DD-PC1, στο γενικευμένο πλαίσιο της σχετικιστικής Hartree-Bogoliubov προσέγγισης, με τη δύναμη TMR για τις συσχετίσεις ζεύγους ήταν τα πιο επιτυχή και στην ποιοτική αλλά και στην ποσοτική περιγραφή του φαινομένου. Στη βάση αυτού του αποτελέσματος θα χρησιμοποιήσουμε, στο παρόν κεφάλαιο, τα δύο συγκεκριμένα συναρτησοειδή για να μελετήσουμε διεγερμένες καταστάσεις πυρήνων, που οφείλονται σε μονοσωματιδιακά φαινόμενα και πιο ειδικά τους λεγόμενος K -ισομερείς.

Από την αρχική της διατύπωση μέχρι σήμερα, η σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου έχει εφαρμοστεί με επιτυχία για την περιγραφή μιας πληθώρας πυρηνικών φαινομένων. Από την άπειρη πυρηνική ύλη, σε ιδιότητες πεπερασμένων πυρήνων στη βασική τους κατάσταση, και από συλλογικές διεγέρσεις μέχρι τη μελέτη φαινομένων πυρηνικής αστροφυσικής. Πρόσφατα, έγινε για πρώτη φορά επέκταση αυτής της θεωρίας στην περιγραφή και μονοσωματιδιακών διεγέρσεων με την μελέτη K -ισομερών σε υπερ-βαρείς πυρήνες στην εργασία [203]. Εκεί, διερευνήθηκε η επιρροή του χάσματος των νετρονιακών φλοιών για $N = 162$, στο σχηματισμό καταστάσεων δύο ημι-σωματιδίων και στις ενέργειες των αντίστοιχων K -ισομερών. Διευρύνοντας αυτό το νέο πεδίο εφαρμογής, η παρούσα έρευνα έχει στόχο την αξιολόγηση αυτής της προσέγγισης για την περιγραφή των K -ισομερών. Για το λόγο αυτό, μελετήθηκαν αξονικά παραμορφωμένοι πυρήνες σε διάφορες

περιοχές του πυρηνικού τοπίου, όπου έχουν καταγραφεί πειραματικά K -ισομερείς.

Συνοπτικά, η δομή του τελευταίου κεφαλαίου της διατριβής έχει ως εξής. Θα ξεκινήσουμε με μία εισαγωγή στην έννοια της ισομέρειας στους πυρήνες. Θα αναφέρουμε συνοπτικά ορισμένες εφαρμογές των πυρηνικών ισομερών σχετικά με τη διαχείριση της αποθηκευμένης σε αυτούς ενέργειας. Στη συνέχεια θα περιγράψουμε τα φαινόμενα δομής με βάση τα οποία σχηματίζονται οι ισομερείς καταστάσεις. Εξειδικεύοντας στους K -Ισομερείς θα αναλύσουμε τη μέθοδο δημιουργίας τους στο πλαίσιο της προσέγγισης RHB. Τέλος, θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα των αριθμητικών υπολογισμών σε βαρείς και υπερβαρείς πυρήνες όπου υπάρχουν ήδη αρκετά πειραματικά δεδομένα.

Τα περισσότερα στοιχεία που αναφέρουμε προέρχονται από σύγχρονες αναφορές στο ευρύτατο πεδίο των μετασταθών πυρηνικών καταστάσεων. Μία από τις πρώτες αναλύσεις στη δομή καταστάσεων με υψηλό σπιν δόθηκε από τους de Voigt *κ.α.* περίπου τρεις δεκαετίες πριν [204]. Πιο σύγχρονες αναφορές περιλαμβάνουν, τη μελέτη [205] στην περιοχή παραμορφωμένων πυρήνων $A \approx 180$, τις δημοφιλείς και πιο περιγραφικές δημοσιεύσεις [206–210], καθώς και την πιο πρόσφατη και συνολική περιγραφή των μετασταθών καταστάσεων σε βαρείς πυρήνες από τους Dracoulis, Walker και Kondev το 2016 [211]. Από καθαρά πειραματική μεριά, υπάρχει η πολύ επισταμένη καταγραφή των ιδιοτήτων διάσπασης καθώς και των υποκείμενων σχηματισμών των K -ισομερών σε παραμορφωμένους πυρήνες με $A > 100$, που παρουσιάστηκε το 2015 [212]. Ενώ, και στη βάση δεδομένων πυρηνικής δομής [213] δημοσιεύονται στοιχεία ισομερών και των διασπάσεων τους.

5.2 Πυρηνική Ισομέρεια

Η ανακάλυψη των πυρηνικών ισομερών αποδίδεται στο έργο του Otto Hahn το 1921 [214], αν και ο όρος *ισομερής* στο πλαίσιο της πυρηνικής φυσικής εισήχθη αρχικά από τον Frederick Soddy, ο οποίος τον εφάρμοσε στους πυρήνες επηρεασμένος από την ισομέρεια στη χημεία, για να περιγράψει μεγάλης διάρκειας πυρηνικές καταστάσεις που σχηματίζονται από τον ίδιο αριθμό πρωτονίων και νετρονίων με άλλες, όμως έχουν ουσιαστικά διαφορετικές ιδιότητες [215]. Η πρώτη σημαντική θεωρητική συνεισφορά για την βασική κατανόηση της προέλευσης των ισομερών προήλθε το 1936 από τον von Weizsäcker, ο οποίος έδειξε ότι ο συνδυασμός μίας μεγάλης μεταβολής στην στροφορμή με μία μικρή ενέργεια μετάπτωσης, μπορεί να οδηγήσει σε μία μεγάλη ημι-ζωή της αντίστοιχης ηλεκτρομαγνητικής αποδιέγερσης.

Στις αρχές της δεκαετίας του '50, έγινε μία πρώτη προσπάθεια να ποστικοποιηθεί η ιδέα του von Weizsäcker στην αναφορά που δημοσιεύθηκε από τους Segré και Helmholtz [216]. Σε αυτήν την προσπάθεια, η πειραματική ανακάλυ-

ψη ισομερών σε αρκετούς πυρήνες και η ερμηνεία τους, έπαιξαν σπουδαίο ρόλο για την ανάπτυξη μοντέλων περιγραφής σφαιρικών και παραμορφωμένων πυρήνων. Σε σφαιρικούς πυρήνες περιττού- A , υπήρχε η πρόβλεψη από το μοντέλο φλοιών στο οποίο περιλαμβάνεται και η σύζευξη σπιν-τροχιάς, ότι τροχιακά με σημαντικές διαφορές στην τροχιακή στροφορμή εμφανίζονται κοντά στην επιφάνεια Fermi, παρέχοντας έτσι καταστάσεις χαμηλής ενέργειας σε μικρή απόσταση μεταξύ τους αλλά με πολύ διαφορετικούς κβαντικούς αριθμούς. Οι πιθανότητες για τις ηλεκτρομαγνητικές μεταβάσεις που συνδέουν τέτοιες καταστάσεις ήταν πολύ χαμηλές, δημιουργώντας με αυτόν τον τρόπο τους ισομερείς. Η παρατήρηση και η ταξινόμησή τους αποτέλεσε άμεση απόδειξη της παρουσίας των τροχιακών με τις εν λόγω ιδιότητες. Επιπλέον η καθαρότητα των παρατηρούμενων σχηματισμών και συνεπώς του πυρηνικού δυναμικού, δίνει μία εικόνα για τις σημαντικές εσωτερικές καταστάσεις στους πυρήνες.

Παράλληλα, άρχισαν να γίνονται ανακαλύψεις για την ύπαρξη παραμορφωμένων πυρήνων και να εξελίσσονται θεωρίες για την κατανόηση τους. Από τις πρώτες εργασίες που άνοιξαν τον δρόμο σε αυτήν την κατεύθυνση ήταν αυτή των Bohr και Mottelson το 1953 [217]. Σε αυτήν ερμήνευσαν το φάσμα των ακτίνων γάμμα της διάσπασης του ισομερούς των 5.5 ωρών [218] του ^{180}Hf , ως ακολουθία μεταβάσεων ανάμεσα στις περιστροφικές καταστάσεις ενός αξονικά παραμορφωμένου πυρήνα. Τελικά αποδείχτηκε ότι η μεγάλη διάρκεια της ημιζωής του συγκεκριμένου ισομερούς δεν οφείλεται στην μεγάλη μεταβολή της στροφορμής κατά την αποδιέγερση, όπως είδαμε ότι ισχύει για τους σφαιρικούς πυρήνες. Όπως φάνηκε, η αιτία είναι παραβίαση ενός πρωτοεμφανιζόμενου κανόνα επιλογής που συνδέεται με το K , έναν καινούριο κβαντικό αριθμό της προβολής της συνολικής στροφορμής του πυρήνα στον άξονα συμμετρίας ή παραμόρφωσης. Η ανακάλυψη ισομερών με υψηλές τιμές του K , αποτέλεσε το έναυσμα για την κατανόηση μετά από σημαντικά βήματα, της συλλογικής πυρηνική δομής, όπως επισήμανε ο Aage Bohr στην ομιλία αποδοχής του βραβείου Nobel το 1975 [219].

Έρευνες σχετικά με το υψηλό-σπιν στα τέλη του '70 και στις αρχές του '80 είχαν ως αποτέλεσμα την ανακάλυψη πολλών ισομερών. Καταστάσεων δηλαδή από συνδυασμό πολλών σωματιδίων, σε διάφορες περιοχές, με το σχηματισμό τους να οφείλεται στην ευθυγράμμιση σωματιδίων στο ισημερινό επίπεδο των σφαιρικών πυρήνων ή στην κάθετη στον άξονα συμμετρίας ζώνη των παραμορφωμένων πυρήνων. Η σπουδαιότητα αυτών των ανακαλύψεων και ο συνεπακόλουθος ενθουσιασμός καταγράφηκαν στην διατύπωση των Bohr και Mottelson στο συμπόσιο Nobel του 1980: *“η παρουσία πολλών ημισωματιδίων με ευθυγραμμισμένες στροφορμές μας παρουσιάζει την πυρηνική ύλη κάτω από συναρπαστικές συνθήκες, αναδεικνύοντας έναν νέο τύπο σπασίματος συμμετρίας”* [220]. Ένα ζήτημα που δεν έχει διευκρινιστεί εντελώς, είναι πόσα σωματίδια μπορούν να ευθυγραμμιστούν προτού η έννοια του μέσου-πεδίου σταματήσει να έχει πλέον νόημα.

Από θεωρητική άποψη, οι όροι “ισομερής” και “ισομέρεια” χρησιμοποιούνται

γενικά όταν διαφορετικά χαρακτηριστικά ή σχηματισμοί που προκύπτουν από τα ίδια συστατικά, έχουν ως αποτέλεσμα μία μειωμένη επικάλυψη ανάμεσα στην αρχική και τελική κυματοσυνάρτηση, και συνεπώς σημαντικό περιορισμό στην ενδιάμεση μετάβαση, όπως γίνεται για παράδειγμα στους ισομερείς σχήματος. Από τεχνική μεριά, κάθε κατάσταση η οποία έχει άμεσα μετρήσιμη ημιζωή, ακόμη και της τάξης των nanosecond, μπορεί να οριστεί ως ισομερές, η πιο σωστά ως μετασταθής κατάσταση. Πέρα από την ορολογία αυτό που είναι πολύ σημαντικό είναι το γεγονός ότι αυτές οι καταστάσεις έχουν μεγαλύτερη διάρκεια ζωής συγκριτικά με κανονικές καταστάσεις σε ένα συγκεκριμένο πυρήνα ή μία περιοχή πυρήνων [206]. Υπάρχει μία περαιτέρω διάκριση που πρέπει να γίνει ανάμεσα σε εσωτερικές καταστάσεις και στις συλλογικές καταστάσεις που μπορεί να έχουν συμπτωματικά άμεσα μετρήσιμους χρόνους ημιζωής. Ένα σύγχρονο ζήτημα είναι μέχρι ποιο σημείο μπορούν οι ισομερείς, στα όρια της πυρηνικής σύνδεσης, να παρέχουν επιπρόσθετη σταθερότητα, με την έννοια ότι οι χρόνοι ζωής τους μπορεί να ξεπερνούν τους αντίστοιχους των βασικών καταστάσεων.

Η βασική ιδέα, ότι ο χρόνος ημιζωής μίας πυρηνικής κατάστασης, η οποία αποδιεγείρεται με μία μετάπτωση εξαρτάται από την ενέργεια μετάπτωσης, ΔE , και την αλλαγή στους κβαντικούς αριθμούς ανάμεσα στο ισομερές και την καταληκτική κατάσταση, μεταφράζεται στη σχέση

$$\tau \propto |\langle f | T_\lambda | i \rangle|^2 / (\Delta E)^{2\lambda+1}, \quad (5.1)$$

όπου λ είναι η τάξη της πολυπολικότητας και T_λ είναι ο τελεστής της μετάπτωσης ανάμεσα στην αρχική, i , και στην τελική, f κατάσταση. Αυτή η σχέση εξαρτάται από τρεις παράγοντες, το συνδυασμό της ενέργειας και της πολυπολικότητας και τα υποκείμενα στοιχεία πίνακα της μετάπτωσης. Αν η ΔE είναι μικρή και η τάξη πολυπολικότητας μεγάλη, τότε ο χρόνος ημιζωής είναι πιθανόν να είναι σχετικά μεγάλος. Αυτό μπορεί να συμβεί κατά τύχη, με την έννοια τυχαίων ενεργειακών διαχωρισμών, ή επειδή ο σχηματισμός της διεγερμένης κατάστασης αντιπροσωπεύει έναν ασυνήθιστα αποτελεσματικό τρόπο για τον πυρήνα να διατηρεί στροφορμή (ένα φαινόμενο πυρηνικής δομής), έχοντας έτσι σχετικά χαμηλή ενέργεια και υψηλό σπιν. Εναλλακτικά, ένας μεγάλος χρόνος ημιζωής μπορεί να σηματοδοτεί μία ξεχωριστή αλλαγή στην πυρηνική δομή, οδηγώντας σε μικρή επικάλυψη και έτσι μικρά στοιχεία πίνακα. Για παράδειγμα μπορεί να υποδεικνύει μία μεγάλη αλλαγή στον σχηματισμό (ανακατανομή πολλών τροχιών) ή μία μεγάλη αλλαγή σχήματος, ή ακόμα ένα σημαντικό επαναπροσανατολισμό του διανύσματος του σπιν, και με τις τρεις περιπτώσεις να οδηγούν σε απαγορευμένες μεταπτώσεις. Ο βασικός παράγοντας εδώ είναι ότι οι διαφορετικοί τρόποι διέγερσης δεν περιορίζονται σε μία συγκεκριμένη περιοχή του πυρηνικού χάρτη αλλά αναπτύσσονται μέσα σε έναν μεμονωμένο πυρήνα, από τη στιγμή που οι διεγέρσεις αυτές μεταβάλλουν το πυρηνικό μέσο-πεδίο.

Έρευνες ισομερών που στόχο έχουν τη μελέτη της πυρηνικής δομής εκμεταλλεύονται τις σχετικές προοπτικές για:

- να κάνουν νέες ανακαλύψεις με μεγαλύτερη ακρίβεια
- να χαρακτηρίσουν ασυνήθιστες περιπτώσεις πυρηνικής δομής και σχηματισμών
- να ανιχνεύσουν τα δυναμικά μέσου-πεδίου
- να ταξινομήσουν σχήματα - σφαιρικά, παραμορφωμένα και συνύπαρξης.

Τέλος η βασική έρευνα γύρω από την πυρηνική ισομέρεια, που ξεκινάει από την απρόσμενη ανακάλυψη καταστάσεων με πολύ συγκεκριμένες ιδιότητες, παρέχει τη δυνατότητα πραγματοποίησης ενός μεγάλου φάσματος εφαρμογών. Αυτές οι εφαρμογές ξεκινούν από ευκαιρίες για την αποθήκευση και την απελευθέρωση ενέργειας [206, 210] και μελέτες για συζευγμένα ατομικά-πυρηνικά φαινόμενα [221–224], έως εφαρμογές στην ιατρική (βλ. για παράδειγμα [207]). Η ύπαρξη των ισομερών μπορεί επίσης να έχει ρόλο στις αστρικές διεργασίες [225–227].

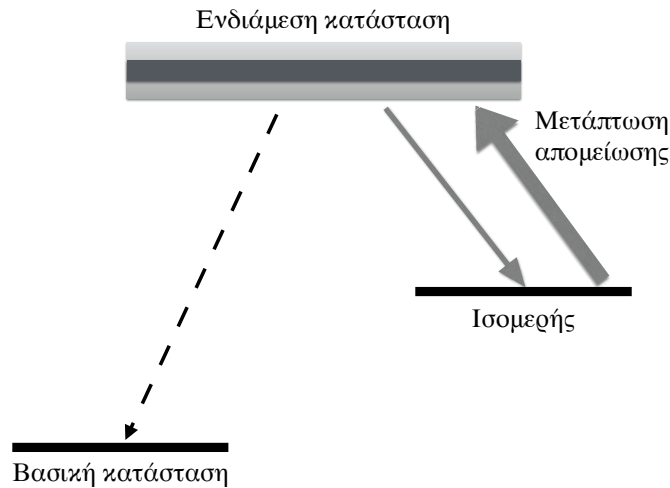
Προτού, λοιπόν παρουσιάσουμε τις λεπτομέρειες της εφαρμογής της προσέγγισης RHB στη μελέτη των K-isomer και τα αντίστοιχα αποτελέσματα, θα αναφέρουμε περισσότερες λεπτομέρειες για τις πιθανές εφαρμογές.

5.3 Εφαρμογές των ισομερών στην διαχείριση ενέργειας

5.3.1 Υπόβαθρο

Ως μετασταθείς καταστάσεις με μεγάλη διάρκεια ζωής, οι ισομερείς μπορούν να αποθηκεύσουν μεγάλες ποσότητες ενέργειας για σημαντικό χρονικό διάστημα. Η μεγαλύτερη διάρκεια ημιζωής για οποιοδήποτε γνωστό ισομερές είναι μεγαλύτερη από 10^{16} χρόνια (^{180m}Ta), ενώ η μεγαλύτερη αποθηκευμένη ενέργεια είναι 2.466 MeV ($^{178m2}\text{Hf}$). Η δυνατότητα αυτή των ισομερών να αποθηκεύουν ενέργεια, έχει οδηγήσει στην διατύπωση πιθανών διαφορετικών εφαρμογών.

Η θεώρηση των εφαρμογών των ισομερών ξεκινάει με το ερώτημα : Τι μπορεί να κάνει κάποιος με μία “καθαρή” πηγή ενέργειας; Αυτό το ερώτημα φυσικά υπάρχει πολύ πριν την ανακάλυψη των ισομερών το 1921, παρόλα αυτά αποτελεί το κίνητρο για την αναζήτηση επαγόμενης απελευθέρωσης ενέργειας από ισομερείς. Η απάντηση σε αυτό το ερώτημα οδηγεί σε επιμέρους ζητήματα: Είναι η φυσική διάσπαση αρκετή; Αν όχι, πως μπορεί η απελευθέρωση της πυρηνικής ενέργειας να προκληθεί κατ’ απαίτηση; Τι σημαίνει “καθαρή” ενέργεια όταν σκεφτόμαστε



Σχήμα 5.1: Σχηματική απεικόνιση της διαδικασίας της εξαναγκασμένης απομείωσης του πληθυσμού των ισομερών. Ένας ισομερής πυρήνας διεγείρεται πρώτα σε μία ενδιάμεση κατάσταση υψηλότερης ενέργειας. Παράλληλα με την αποδιέγερση πίσω στον ισομερή, η ενδιάμεση κατάσταση πρέπει να έχει και ένα κανάλι διάσπασης που να οδηγεί στη βασική παρακάμπτοντας τον ισομερή.

συγκεκριμένες εφαρμογές; Ακόμη και χωρίς έναν πλήρη ορισμό, αναμένει κάποιος ότι η “καθαρή” απελευθέρωση ενέργειας αποκλείει πιθανόν την σχάση και τη σύντηξη, οι οποίες παράγουν αρκετά ραδιενεργά υπο-προϊόντα, και εννοεί άλλες μορφές αποθήκευσης ενέργειας στους πυρήνες.

Αρκετά νωρίς αναγνωρίστηκε η δυνατότητα εξαναγκασμένης εκπομπής από πυρηνικές μεταπτώσεις, κατ’ αναλογία με τις ατομικές μεταπτώσεις στις οποίες βασίζεται η λειτουργία των laser. Αυτό ακολουθήθηκε αρκετά πιο μετά, από άμεσες προτάσεις για ένα laser ακτίνων γ . Έγινε αντιληπτό ότι η γνωστή διαδικασία των τεσσάρων επιπέδων του laser μπορεί να αναπαραχθεί στους πυρήνες, ξεκινώντας από την πλήρωση μίας ισομερούς κατάστασης. Έτσι, οι ισομερείς έγιναν αντικείμενο έρευνας ως βάση για μία ελεγχόμενη και κατ’ απαίτηση απελευθέρωση ενέργειας από τους πυρήνες μέσω ηλεκτρομαγνητικής αποδιέγερσης.

Ο προτεινόμενος μηχανισμός για την εξαναγκασμένη απελευθέρωση ενέργειας, η οποία δυνητικά απομειώνει τον πληθυσμό ενός ισομερούς, παρουσιάζεται στο Σχ. 5.1. Η διαδικασία δεν επιταχύνει την διάσπαση του ισομερούς, αλλά παρακάμπτει την αργή διαδικασία της μετάπτωσης της μετασταθούς κατάστασης. Με βάση αυτήν την εικόνα μπορεί να θεωρηθεί αναμενόμενη η εύρεση υπονήφιδων ενδιάμεσων καταστάσεων, με μια απλή ταυτοποίησή τους από τις βάσεις πυρηνικών δεδομένων. Δυστυχώς, κάτι τέτοιο αποτελεί την εξαίρεση και όχι τον κανόνα.

5.3.2 Ισομερείς “αποθήκευσης” ενέργειας

Έχουν καταγραφεί περίπου 30 ισομερείς που έχουν ημιζωή μεγαλύτερη από μία μέρα, οι οποίοι μπορούν να θεωρηθούν ως ισομερείς “αποθήκευσης”. Η μετασταθής κατάσταση του ^{180}Ta είναι το πρώτο και πιο χαρακτηριστικό παράδειγμα ισομερούς λόγω σπιν, όπου οι ηλεκτρομαγνητικές διασπάσεις περιορίζονται επειδή απαιτείται μεγάλη μεταβολή του μεγέθους της στροφορμής για να καταλήξει σε χαμηλότερες καταστάσεις. Ο ισομερής χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς $J^\pi = 9^-$ ενώ η βασική κατάσταση έχει $J^\pi = 1^+$. Συνεπώς, μία ηλεκτρομαγνητική αποδιέγερση από τον ισομερή στη βασική κατάσταση θα ήταν μία μαγνητική μετάπτωση 2^8 -πολική, με αντίστοιχα πολύ μικρή πιθανότητα. Η ενέργεια διέγερσης του ισομερούς είναι 75 KeV πάνω από την ασταθή βασική κατάσταση ($T_{1/2} = 8.2 \text{ h}$), η οποία διασπάται μέσα από την αρπαγή ηλεκτρονίου ή την εκπομπή ακτινοβολίας β^- .

Ο ισομερής $^{178m2}\text{Hf}$ με $T_{1/2} = 31$ χρόνια, είναι ένα παράδειγμα ενός K ισομερούς. Ο πυρήνας ^{178}Hf εμφανίζει τετραπολικά παραμορφωμένο σχήμα prolate τύπου, όπως είναι συνήθως οι πυρήνες στη μέση των φλοιών. Οπότε, η κβάντωση του σχετικού προσανατολισμού του διανύσματος της στροφορμής γίνεται με το K , την προβολή στον άξονα συμμετρίας. Η φυσική διάσπαση του $^{178m2}\text{Hf}$ γίνεται με ηλεκτρομαγνητική μετάπτωση πέρα από τη διπολική, όπου πάλι απαιτούνται μεγάλες αλλαγές στον προσανατολισμό της στροφορμής. Οι εσωτερικές (μονοσωματιδιακές) διεγέρσεις σε παραμορφωμένους πυρήνες σχηματίζουν περιστροφικές ζώνες όπως στα διατομικά μόρια. Η κατάσταση που δίνει το $^{178m2}\text{Hf}$ είναι το εσωτερικό επίπεδο με $J^\pi = K^\pi = 16^+$ και η κυρίαρχη αποδιέγερση γίνεται μέσα από την μετάπτωση με ενέργεια 12.7 keV στην κατάσταση $J^\pi = 13^-$, που ανήκει στην περιστροφική ζώνη που “χτίζεται” πάνω στην εσωτερική κατάσταση με $J^\pi = K^\pi = 8^-$. Η πολυπολικότητα της συγκεκριμένης διάσπασης είναι $L = 3$, αλλά η αντίστοιχη ηλεκτρομαγνητική διάσπαση E3 είναι K -απαγορευμένη αφού ισχύει $\Delta K = 8$, δίνοντας μία περίσσεια $\nu = \Delta K - L = 5$ αλλαγή στον προσανατολισμό. Στην πραγματικότητα, λόγω μηχανισμών ανάμιξης η μετάπτωση δεν είναι απολύτως απαγορευμένη, αλλά επιβραδύνεται κατά ένα σημαντικό παράγοντα. Οι μεγάλες αλλαγές στην τιμή του K είναι η κυρίαρχη αιτία για την μετασταθή κατάσταση των ισομερών όπως ο $^{178m2}\text{Hf}$.

Σε κάθε περίπτωση, οι μετασταθείς ισομερείς θεωρούνται ως αποθήκες ενέργειας και μπορεί να αποδειχτούν χρήσιμοι ως μπαταρίες με υψηλή εσωτερική ενεργειακή πυκνότητα. Με εξαίρεση τους φυσικούς ισομερείς όπως ο ^{180m}Ta ή αυτούς που προκύπτουν από τη διάσπαση σε γεωλογικά ορυκτά, οι ισομερείς πρέπει να παραχθούν τεχνητά οπότε δεν είναι αυτούσιες πηγές ενέργειας.

5.3.3 Πειραματικές έρευνες για την επαγόμενη απομείωση ισομερών

Λόγω της ιδιαίτερης ημι-ζωής του, το ^{180m}Ta υπάρχει σε όλα τα δείγματα ταντάλιου που ανακαλύπτονται φυσικά και έτσι είναι κατάλληλο για μελέτη. Η βασική κατάσταση ^{180m}Ta είναι ασταθής και υπάρχει μόνο σε ισορροπία με το μεγάλης διάρκειας ισομερές, οπότε στη γλώσσα της φυσικής των laser αυτό το υλικό είναι πλήρως ανεστραμμένο. Η πρώτη σαφής ένδειξη της επαγόμενης απομείωσης του πληθυσμού του ισομερούς έγινε το 1987 [228] με τη χρήση ακτινοβολίας πέδησης 6 MeV. Ύστερα από εκτεταμένη έρευνα η επαγόμενη απομείωση του ^{180m}Ta αποδείχτηκε οριστικά από ανεξάρτητα πειράματα (για παράδειγμα [229]). Το συμπέρασμα για εφαρμογές αυτού του ισομερούς είναι ξεκάθαρο: η χαμηλότερη ενέργεια που απαιτείται για τον εξαναγκασμό της απομείωσης είναι περίπου στο 1 MeV, ενώ η αποθηκευμένη ενέργεια στο ισομερές είναι 75 keV. Ακόμη και αν συνυπολογιστεί η επιπρόσθετη ενέργεια από την διάσπαση της βασικής κατάστασης, η όλη διαδικασία δεν μπορεί να αποτελέσει πηγή ενέργειας. Τα αποτελέσματα ωστόσο απέδειξαν στην πράξη τη διαδικασία που παρουσιάζεται στο Σχ. 5.1 και υπέδειξαν τον προσανατολισμό της έρευνας σε ισομερείς με μεγαλύτερη ενέργεια.

Ο ισομερής $^{178m2}\text{Hf}$ με διάρκεια ζωής 31 χρόνια αποθηκεύει πολύ περισσότερη ενέργεια από τον ^{180m}Ta . Τα δείγματα στα οποία βρίσκονται ίχνη του δεν είναι φυσικά, αλλά προέρχονται κυρίως από προϊόντα πυρηνικών διεργασιών. Στις αρχές του 1998, πραγματοποιήθηκαν πολλά πειράματα για τη δοκιμή της απομείωσης πληθυσμού του $^{178m2}\text{Hf}$, από φωτόνια με ενέργειες μικρότερες των 100 keV. Υπήρξαν άρθρα που υποστήριζαν την θετική ένδειξη μιας εξαναγκασμένης απελευθέρωσης ενέργειας με τη χρήση φωτονίων με ενέργεια κοντά στα 10 keV. Όμως, όπως εξηγείται συνοπτικά και στο [230], όλες οι σχετικές δημοσιεύσεις προήλθαν από μία συγκεκριμένη ερευνητική ομάδα και τα αποτελέσματα δεν μπόρεσαν να επαναληφθούν από άλλες ανεξάρτητες ομάδες, με τις τελευταίες προσπάθειες να γίνονται το 2004. Το κυρίαρχο πρόβλημα είναι ότι δεν υπάρχουν δεδομένα από την πυρηνική δομή για τον πυρήνα ^{178}Hf , που να δείχνουν ότι υπάρχει πάνω από τον ισομερή μία κατάσταση με ενέργεια περίπου 17 keV, χωρίς αυτό να σημαίνει ότι αποκλείεται να βρεθεί μία τέτοια κατάσταση.

Παρόμοιες καταστάσεις υπάρχουν και για άλλους μετασταθείς ισομερείς, όπως ο ^{177m}Lu ($E^* = 970$ keV, $T_{1/2} = 160$ μέρες) και ο ^{242m}Am ($E^* = 49$ keV, $T_{1/2} = 141$ χρόνια). Η πιο λεπτομερής πληροφόρηση για τη δομή του ^{177}Lu παρήχθη το 2004 [231] όπου αναγνωρίστηκαν τρεις μεταπτώσεις που συνδέουν την ισομερή κατάσταση με υψηλότερης ενέργειας καταστάσεις. Δυστυχώς όμως, αυτές οι καταστάσεις δεν έχουν γνωστές διαδρομές διάσπασης που να αποφεύγουν το ισομερές, έτσι ώστε να αποτελέσουν πιθανές ενδιάμεσες καταστάσεις.

Το ισομερές του ^{242m}Am είναι ενδιαφέρον για μία σειρά από λόγους. Το ισό-

τοπο είναι περιττό-περιττό, οπότε η δομή των επιπέδων αναμένεται να είναι πολύ πλούσια, όμως τα διαθέσιμα δεδομένα είναι σχετικά λίγα. Η διάσπαση της βασικής κατάστασης των 16 ωρών, θα προκαλούσε μία σειρά από μεταστοιχειώσεις που θα απελευθέρωναν ενέργεια. Επίσης μία διεγερμένη κατάσταση έχει μετρηθεί ότι βρίσκεται μόλις 4.3 keV πάνω από το ισομερές, προσβάσιμη από μία E2 ηλεκτρομαγνητική διέγερση, η οποία όμως δεν έχει ακόμα παρατηρηθεί.

Γενικά αυτό που δημιουργεί τους μεγαλύτερους περιορισμούς για την πειραματική επίτευξη της διαδικασίας του Σχ. 5.1 είναι η έλλειψη λεπτομερούς πληροφορίας της δομής, έτσι ώστε να υπάρξει καθοδήγηση στον πειραματικό σχεδιασμό. Κάτι που σταδιακά πρόκειται να αλλάξει με την ανάπτυξη πιο εξελιγμένων ανιχνευτικών διατάξεων, που χρησιμοποιούν ακτίνες καθαρά ισομερών, με μεγαλύτερη ευαισθησία στις ασθενείς μεταπτώσεις.

5.3.4 Laser ακτινοβολίας γ

Η χρήση των ισομερών για την κατασκευή laser ακτίνων γ , αποτελεί μία σημαντική πρόκληση και ένα ανολοκλήρωτο μέχρι στιγμής όνειρο όπως η ελεγχόμενη σύντηξη. Οι πρώτες σαφείς προτάσεις για ένα laser που θα χρησιμοποιεί διεγερμένες καταστάσεις πυρήνων για την παραγωγή της ακτινοβολίας εμφανίστηκαν στη βιβλιογραφία το 1963 [232], ακολουθώντας μία προηγούμενη πατέντα του Ρώσου ερευνητή Rivlin [233]. Είναι ενδιαφέρον πόσο σύντομα διατυπώθηκαν αυτές οι εργασίες, μετά την πρώτη επίδειξη ότι τα οπτικά laser όντως λειτουργούν.

Η κατασκευή ενός laser ακτίνων γ , απαιτεί να ξεπεραστεί η πρόκληση του συνδυασμού των απαραίτητων φυσικών παραμέτρων και της τεχνολογικής επάρκειας, κάτι που μέχρι στιγμής δεν έχει ακόμη επιτευχθεί. Σε κάθε laser, η πιο βασική προϋπόθεση είναι η αντιστροφή πληθυσμού ανάμεσα στις συζευγμένες κβαντικές καταστάσεις οι οποίες αποτελούν τα άνω και κάτω επίπεδα. Η εξαναγκασμένη εκπομπή της αντίστοιχης ηλεκτρομαγνητικής διάσπασης δίνει την ακτινοβολία του laser, με επαναλαμβανόμενες διεγέρσεις του πάνω επιπέδου του laser μεγάλωνοντας την αντιστροφή και επαναλαμβάνοντας την εξαναγκασμένη διέγερση της εκπομπής αυξάνοντας την ενίσχυση. Αυτή η απαραίτητη για την αντιστροφή πληθυσμού επανάληψη, είναι αδύνατη για ένα γ -laser, εξαιτίας της δυσκολίας να υπάρξει αποδοτική ανάκλαση φωτονίων πολύ υψηλής ενέργειας, από οποιοδήποτε υλικό ανάκλασης.

Ακριβώς σε αυτήν την προετοιμασία της αντιστροφής πληθυσμού έχουν προταθεί οι ισομερείς να παίξουν ένα σημαντικό ρόλο. Ο μεγαλύτερος αποτρεπτικός παράγοντας για την κατασκευή ενός laser ακτίνων γ , είναι η εγγενής αντίφαση ανάμεσα στην αύξηση του πληθυσμού αντιστροφής και στην απαίτηση το εύρος της γραμμής για την μετάπτωση να διατηρείται όσο πιο κοντά γίνεται στο φυσικό εύρος. Διάφορες μέθοδοι έχουν προταθεί για να αρθεί αυτή η αντίφαση, όπως η χρήση του φαινομένου Mössbauer, όμως η ισχυρή ακτινοβόληση του υλικού του

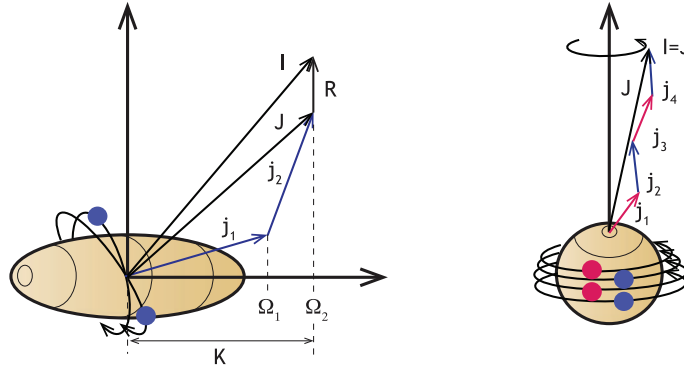
laser μπορεί να καταστρέψει το στενό εύρος της γραμμής. Ένα πυρηνικό ανάλογο σχήμα, του γνωστού laser τεσσάρων βημάτων, με τους πυρήνες να ξεκινούν από μία κατάσταση ενός ισομερούς με μεγάλη διάρκεια ζωής αντί της βασικής κατάστασης, μπορεί να μειώσει τις απώλειες τις αντιστροφής του πληθυσμού. Προς το παρόν, δεν έχει βρεθεί κάποιο σύστημα με τα κατάλληλα επίπεδα και τις απαραίτητες πιθανότητες μετάπτωσης σε κάποιο από τα νουκλίδια.

Οπότε το πεδίο των laser ακτίνων γ εξαρτάται από την ανάπτυξη επιπρόσθετων καινοτομιών. Ένα κρίσιμο βήμα θα είναι η επίδειξη της απελευθέρωσης της ενέργειας του ισομερούς επαγόμενη από χαμηλής ενέργειας ($\ll 1$ MeV) φωτόνια.

5.4 Βασικό υπόβαθρο του σχηματισμού ισομερών

Αν και πολλά είναι γνωστά για την πυρηνική δομή που ελέγχει τις ενέργειες διεγερσης και τους ρυθμούς διάσπασης των πυρηνικών καταστάσεων, είναι ουσιαστικά αδύνατο να προβλεφθεί ακριβώς η πιθανότητα εύρεσής τους, και ειδικά οι χρόνοι ημιζωής. Αυτό συμβαίνει επειδή ακόμα και μικρές ενεργειακές διαφορές ανάμεσα στις αρχικές και τελικές καταστάσεις μπορεί να έχουν μεγάλη επίδραση στους ρυθμούς μετάβασης. Στην πιο ακραία περίπτωση μία μικρή αλλαγή στην ενέργεια μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα την αντιστροφή της κατανομής κοντινών επιπέδων, έτσι εκεί που είχε προβλεφθεί μία διαδρομή διάσπασης, στην πραγματικότητα να μην υπάρχει καθόλου, ή το ανάποδο. Επιπλέον, από τη στιγμή που οι μεταπτώσεις που συμβαίνουν μπορεί να είναι, θεωρητικά, απαγορευμένες, πρέπει να συμβαίνουν μόνο μέσα από την μικροσκοπική ανάμειξη κυματοσυναρτήσεων κάτι που είναι αδύνατο να προβλεφθεί επακριβώς. Συνεπώς, υπάρχει μία αναπόφευκτη εξάρτηση από τη φαινομενολογία που καθοδηγείται από το πείραμα και τις ανακαλύψεις.

Οι παραδοσιακές περιοχές όπου βρίσκονται τέτοιες καταστάσεις, είναι όντως εκεί που είναι περισσότερο αναμενόμενες, δηλαδή στου μεσαίου βάρους και βαρείς πυρήνες κοντά σε πλήρεις φλοιούς, όπου τα σωματίδια σθένους μπορούν να καταλάβουν τροχιές με υψηλό σπιν. Αυτό συμβαίνει κοντά σε πλήρεις νετρονιακούς και πρωτονιακούς φλοιούς με $N = 82$ και $Z = 50$ ($A \approx 130$), $N = 82$ και $Z = 64$ ($A \approx 150$), και $N = 126$ και $Z = 82$ ($A \approx 210$), δημιουργώντας καταστάσεις πολλών σωματιδίων με υψηλό σπιν σε σχετικά χαμηλές ενέργειες. Ενώ αυτές οι καταστάσεις πηγάζουν από σφαιρικούς σχηματισμούς, η σύζευξη σε οκταπολικές δονήσεις φαίνεται να παίζει ουσιαστικό ρόλο στη δημιουργία τους. Στους καλά παραμορφωμένους πυρήνες, οι οποίοι εμφανίζονται ανάμεσα στους πλήρεις φλοιούς, οι συλλογικές (περιστροφικές) διεγέρσεις είναι αυτές που συνήθως κυριαρχούν στις χαμηλές ενέργειες, εκτός από την περιοχή με $A \approx 180$. Εκεί, οι καταστάσεις πολλών ημισωματιδίων με υψηλό K , που σχηματίζονται από το άθροισμα των προβολών στον άξονα συμμετρίας ενός αριθμού από ασύζευκτα



Σχήμα 5.2: Σχηματική απεικόνιση της σύζευξης στροφορμής, όπως δίνεται στο [211]. Στ' αριστερά η σύζευξη υψηλού- K σε παραμορφωμένους πυρήνες. Στα δεξιά το αντίστοιχο σχήμα του προσανατολισμού πολλών σωματιδίων σε ένα σφαιρικό πυρήνα.

νουκλεόνια με υψηλό-σπιν, είναι αρκούντως χαμηλές σε ενέργεια έτσι ώστε να ανταγωνίζονται με καθαρά συλλογικές διεγέρσεις.

5.4.1 K -ισομερείς σε παραμορφωμένους πυρήνες

Οι K -ισομερείς είναι ειδική περίπτωση χαμηλής ενέργειας, μονοσωματιδιακών, πυρηνικών διεγέρσεων. Εμφανίζονται σε αρκετούς καλά παραμορφωμένους βαρείς πυρήνες, όπου η προβολή Ω στον άξονα συμμετρίας της συνολικής στροφορμής J είναι καλός κβαντικός αριθμός. Ο σχηματισμός τους προέρχεται από το γεγονός ότι μονοσωματιδιακές τροχιές με μεγάλες τιμές της συνολικής στροφορμής j έρχονται κοντά στην επιφάνεια Fermi. Συνεπώς, με ένα ελάχιστο ποσό ενέργειας το οποίο είναι κατά προσέγγιση ίσο με την ενέργεια που απαιτείται για το σπάσιμο ενός ζεύγους νουκλεονίων, γίνεται δυνατή η δημιουργία διεγερμένων καταστάσεων δύο ή και περισσότερων ημισωματιδίων, περιλαμβάνοντας συγκεκριμένες τροχιές.

Σε πυρήνες που είναι καλά παραμορφωμένοι στην βασική τους κατάσταση, διεγερμένες καταστάσεις με μεγάλη τιμή στροφορμής μπορούν να κατασκευαστούν από συλλογική περιστροφή γύρω από ένα άξονα κάθετο στον άξονα συμμετρίας. Το επιπλέον σπάσιμο των ζευγών των σωματιδίων και ο προσανατολισμός των μεμονωμένων στροφορμών με την περιστροφή, συμβαίνουν όταν τα φαινόμενα Coriolis είναι σημαντικά. Αυτό είναι πιο ευνοϊκό για τροχιές με υψηλό εσωτερικό σπιν (j) και μικρή προβολή αυτού του σπιν στον άξονα συμμετρίας (Ω). Ωστόσο, όταν το Ω είναι μεγάλο τα φαινόμενα Coriolis είναι γενικά μικρά, και αν τόσο τα πρωτόνια όσο και τα νετρόνια έχουν τροχιές με μεγάλο Ω κοντά στις

επιφάνειες Fermi, τότε οι προβολές τους μπορούν να συζευκτούν σε μία μεγάλη συνισταμένη, παράλληλη με τον άξονα συμμετρίας,

$$J^\pi = K^\pi = \sum_i \Omega_i^{\Pi(\pi_i)} \quad (5.2)$$

με ενεργειακό κόστος το οποίο κυριαρχείται από το σπάσιμο των ζευγών, έτσι ώστε (σε πρώτη προσέγγιση)

$$E^* \approx \sum_k \sqrt{(\epsilon_k - \epsilon_F)^2 + \Delta^2} \quad (5.3)$$

όπου ϵ_k είναι η μονοσωματιδιακή ενέργεια, ϵ_F είναι η ενέργεια Fermi και Δ είναι το χάσμα ζευγαρώματος. Εσωτερικές καταστάσεις με υψηλό- K παρέχουν μία μεγάλη βάση (ή κεφαλή ζώνης) στροφορμής πάνω στις οποίες μπορούν να χτιστούν μέσα από συλλογική περιστροφή καταστάσεις με ψηλότερο σπιν. Το σχήμα της σύζευξης της στροφορμής φαίνεται στο Σχ. 5.2.

Στην περιοχή πυρήνων με μαζικό αριθμό 180, οι υψηλού- K εσωτερικές καταστάσεις συχνά ανταγωνίζονται για να σχηματίσουν τη γραμμή Y_{rast} ¹ με τις καταστάσεις που παράγονται από συλλογική περιστροφή χαμηλότερης ιεράρχησης σχηματισμών. Για παράδειγμα, στον περιττό-περιττό πυρήνα ¹⁷⁸Ta ($Z = 73$, $N = 105$), μπορεί κανείς να κατασκευάσει μία κατάσταση τριών ημι-πρωτονίων-τριών ημι-νεutronίων με ενεργειακό κόστος περίπου $2(\Delta_p + \Delta_n) \sim 3$ MeV. Αυτό ακριβώς παρατηρείται πειραματικά στο ¹⁷⁸Ta ο οποίος έχει ένα ισομερές με $K^\pi = 21^-$ στα 2912 keV και ένα 22^+ ισομερές στα 3132 keV [234], τα οποία και τα δύο είναι χαμηλότερα σε ενέργεια από μέλη περιστροφικών ζωνών που ορίζονται από το ίδιο σπιν. Γενικά, οι ενεργειακά προτιμητέες εσωτερικές καταστάσεις συνήθως περιλαμβάνουν διεγέρσεις με ισοροπία, δηλαδή με παρόμοιο αριθμό νεutronίων και πρωτονίων παρόντων. Ελάχιστες περιπτώσεις είναι γνωστές που περιλαμβάνουν μόνο τέσσερα νεutronία (ν^4), και μέχρι στιγμής, κανένα ισομερές με τέσσερα πρωτόνια δεν έχει ανακαλυφθεί.

Από τη γενικότερη σκοπιά της πυρηνικής δομής, οι τροχιές με υψηλό- Ω βρίσκονται στο ανώτερο μισό κάθε δεδομένου φλοιού υποθέτοντας prolate παραμόρφωση, περιορίζοντας συνεπώς τις περιοχές των N και Z όπου είναι πιο πιθανό να παρατηρηθούν K -ισομερείς. Επιπροσθέτως, αν το επίπεδο Fermi είναι πολύ ψηλά σε έναν φλοιό, η παραμόρφωση αποδυναμώνεται και η αξονική συμμετρία χάνεται. Το συνολικό αποτέλεσμα είναι ότι ο K ισομερισμός είναι περισσότερο πιθανός περίπου στα δύο τρίτα της πλήρωσης ενός φλοιού. Για παράδειγμα, στο Άφνιο, με $Z = 72$, είναι περίπου κοντά στο 70% του 50-82 πρωτονιακού φλοιού.

¹Η καμπύλη που ορίζεται από τις διεγέρσεις με τη χαμηλότερη ενέργεια για μία δεδομένη τιμή της ολικής στροφορμής.

5.4.2 *K*-Ισομερείς στο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας Hartree-Bogoliubov

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή αυτής της ενότητας, στην παρούσα εργασία σκοπός μας είναι επέκταση της θεωρίας των συναλλοίωτων συναρτησοειδών πυκνότητας στη μελέτη των *K*-ισομερών καταστάσεων που εμφανίζονται σε αξονικά παραμορφωμένους βαρείς και υπερβαρείς πυρήνες. Όπως αναλύσαμε ήδη η θεωρία αυτή περιγράφει αρκετά καλά τις ιδιότητες των πυρήνων της συγκεκριμένης περιοχής στη βασική τους κατάσταση και στις συλλογικές τους ιδιότητες. Επίσης, στην προηγούμενη ενότητα είδαμε ότι περιγράφει με επιτυχία την μικροσκοπική δομή εξωτικών πυρήνων με σχετικά μικρό αριθμό νουκλεονίων. Συγκεκριμένα είδαμε ότι τα συναρτησοειδή DD-ME2 και DD-PC1 ήταν αρκετά επιτυχή τόσο στην ποιοτική όσο και στην ποσοτική περιγραφή του φαινομένου της μείωσης του μεγέθους του διαχωρισμού σπιν-τροχιάς στα $2p$ νετρονιακά τροχιακά. Με βάση λοιπόν αυτό το αποτέλεσμα τα συγκεκριμένα συναρτησοειδή θα χρησιμοποιηθούν και για τη μελέτη διεγερμένων καταστάσεων που οφείλονται σε μικροσκοπικά φαινόμενα.

Από τη στιγμή που οι *K*-ισομερείς εμφανίζονται σε πυρήνες με ανοιχτούς φλοιούς είναι αναμενόμενο οι συσχετίσεις ζεύγους να παίζουν έναν σημαντικό ρόλο. Όπως είδαμε ήδη αρκετές φορές στην παρούσα έρευνα χρησιμοποιούμε το γενικευμένο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας Hartree-Bogoliubov για να συμπεριλάβουμε στην μελέτη των πυρηνικών συστημάτων και τη δύναμη ζευγαρώματος. Έτσι το κάθε σύστημα περιγράφεται από μία γενικευμένη ορίζουσα Slater $|\Phi\rangle$. Στο συγκεκριμένο πλαίσιο, η πυρηνική βασική κατάσταση $|\Phi\rangle$ αντιπροσωπεύει το κενό ως προς τα ανεξάρτητα ημισωματίδια. Όπως είπαμε και στο κεφ. 2.4 η έννοια των ημισωματιδίων εισάγεται στην προσέγγιση του μέσου-πεδίου για την ταυτόχρονη περιγραφή τόσο των αλληλεπιδράσεων σωματιδίου-οπής, μακράς εμβέλειας όσο και των αλληλεπιδράσεων σωματιδίου-σωματιδίου μικρής εμβέλειας.

Τα ημισωματίδια ορίζονται από τον γραμμικό μοναδιακό μετασχηματισμό των σωματιδιακών c_l^+ , c_l τελεστών δημιουργίας και καταστροφής,

$$\alpha_k^+ = \sum_l U_{lk} c_l^+ + V_{lk} c_l, \quad (5.4)$$

ή σε μορφή πινάκων

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^+ & V^+ \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} = \mathcal{W}^+ \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

όπου α_k^+ , α_k είναι οι αντίστοιχοι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των ημισωματιδίων και \mathcal{W} είναι ο μοναδιακός πίνακας του μετασχηματισμού. Οι συντελε-

στές U_{lk}, V_{lk} Hartree-Bogoliubov καθορίζουν πλήρως τη συνολική κυματοσυνάρτηση του πυρηνικού συστήματος πολλών σωμάτων. Για την εύρεσή τους πρέπει να επιλύσουμε τις εξισώσεις Hartree-Bogoliubov (2.54)

$$\begin{pmatrix} \hat{h}_D - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Για την μελέτη πυρηνικών συστημάτων με αξονική συμμετρία, όπως την αναλύσαμε στον κεφάλαιο 2.5.2, εκμεταλλευόμαστε μία από τις βασικές ιδιότητες των εξισώσεων HFB. Συγκεκριμένα, εάν η λύση τους αντιστοιχεί στο απόλυτο ελάχιστο της πολυδιάστατης ενεργειακής επιφάνειας ή απλώς ένα τοπικό ελάχιστο ή ίσως κάποιο σαγματοειδές σημείο, εξαρτάται από τον τρόπο επίλυσης αυτών των εξισώσεων. Αν για παράδειγμα, χρησιμοποιήσουμε μία αυτό-συνεπή συμμετρία, δεν μπορούμε ποτέ να καταλήξουμε σε ένα απόλυτο ελάχιστο το οποίο παραβιάζει τη συμμετρία αυτή. Το γεγονός αυτό μας επιτρέπει να προσεγγίσουμε τις συναρτήσεις πυρηνικών συστημάτων που εμφανίζουν μία συγκεκριμένη συμμετρία. Αν για παράδειγμα υπάρχει ένα συγκεκριμένος τελεστής συμμετρίας, όπως είναι η στροφορμή ή ο κβαντικός αριθμός K , τότε η Χαμιλτονιανή του συστήματος πολλών σωμάτων μπορεί να διαγωνοποιηθεί ξεχωριστά σε κάθε υποχώρο αυτής της συμμετρίας.

Στη παρούσα περίπτωση, οι πυρήνες που μελετάμε παρουσιάζουν τετραπολική-αξονική παραμόρφωση. Ακολουθούμε λοιπόν τη μέθοδο επίλυσης που αναπτύξαμε στην ενότητα 2.5.2. Έτσι, η ομοτιμία και η τρίτη συνιστώσα της ολικής στροφορμής διατηρούνται, και οι αντίστοιχοι κβαντικοί αριθμοί π_k και K_k χαρακτηρίζουν τον σπίνορα Dirac των μεμονωμένων νουκλεονίων του συστήματος. Η διαγωνοποίηση τελικά εκτελείται ξεχωριστά σε κάθε υποχώρο που ορίζεται από τις τιμές των δύο αυτών κβαντικών αριθμών.

Η επίλυση των εξισώσεων RHB για την βασική κατάσταση των άρτιων-άρτιων πυρήνων απλοποιείται επίσης από την συμμετρία της χρονικής αναστροφής. Αυτό σημαίνει ότι δεν υπάρχουν ρεύματα και μόνο οι χρονικές συνιστώσες των τετραδιανυσμάτων των μεσονίων και των πυκνοτήτων συνεισφέρουν στις εξισώσεις κίνησης. Επίσης σημαίνει ότι καταστάσεις με τη ίδια τιμή του K αλλά με αντίθετα πρόσημα είναι εκφυλισμένες και ότι οι RHB εξισώσεις αρκεί να λυθούν στον υποχώρο $+K$ του συστήματος και για κάθε ημι-σωματιδιακή κατάσταση έχουμε πολλαπλότητα 2.

Με στόχο την επέκταση της προηγούμενης ανάλυσης στην μελέτη των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων των K ισομερών, πρέπει να εφαρμόσουμε το φαινόμενο του μπλοκαρίσματος για τη δημιουργία καταστάσεων πολλών ημισωματιδίων ξεκινώντας από την βασική κατάσταση $|\Phi_0\rangle$ του συστήματος υπό εξέταση. Όπως αναφέρθηκε, η βασική κατάσταση ορίζει το κενό ως προς τα ημισωματίδια,

δηλαδή ισχύει

$$\alpha_k |\Phi_0\rangle = 0 \quad \text{για} \quad E_k > 0 \quad \text{ή} \quad |\Phi_0\rangle = \prod_{E_k > 0} \alpha_k |-\rangle, \quad (5.7)$$

όπου $|-\rangle$ είναι το κενό του διανυσματικού χώρου που ορίζεται από τα αρχικά ελεύθερα μεμονωμένα σωματίδια. Αν η κυματοσυνάρτηση $|\Phi_0\rangle$ περιγράφει ένα άρτιο-άρτιο σύστημα όπως συνήθως συμβαίνει, τότε μπορεί κανείς να μελετήσει το γειτονικό περιττό σύστημα κατασκευάζοντας μία κατάσταση ενός ημισωματιδίου $|\Phi_1\rangle$,

$$|\Phi_1\rangle = \alpha_1^\dagger |\Phi_0\rangle = \alpha_1^\dagger \prod_k \alpha_k |-\rangle \quad (5.8)$$

επιλέγοντας να μπλοκάρει την ημισωματιδιακή κατάσταση με τη χαμηλότερη ενέργεια, η οποία αντιστοιχεί στον τελεστή δημιουργίας ημισωματιδίων α_1^\dagger . Κάτι τέτοιο γίνεται για παράδειγμα στην έρευνα [235]. Η ίδια διαδικασία μπορεί να επεκταθεί και για τις χαμηλές διεγέρσεις του συστήματος κατασκευάζοντας για παράδειγμα, καταστάσεις δύο ημισωματιδίων,

$$|\Phi_2\rangle = \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger |\Phi_0\rangle \quad (5.9)$$

Τώρα, αυτή η νέα κατάσταση ορίζει το κενό του συνόλου των ημισωματιδιακών τελεστών $(\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_N)$, όπου N είναι η διάσταση του χώρου των ημισωματιδίων με

$$\alpha'_1 = \alpha_1^\dagger, \alpha'_2 = \alpha_2^\dagger, \dots, \alpha'_N = \alpha_N. \quad (5.10)$$

Με τον τρόπο αυτόν σχηματίζεται μία καινούρια βάση ημισωματιδίων από το σύνολο των τελεστών $(\alpha'_1, \dots, \alpha'_N, \alpha_1^\dagger, \dots, \alpha_N^\dagger)$, με την ανταλλαγή των τελεστών $\alpha_1^\dagger \leftrightarrow \alpha_1, \alpha_2^\dagger \leftrightarrow \alpha_2$ η οποία ισοδυναμεί στην ανταλλαγή των στηλών $(U_{l1}, V_{l1}) \leftrightarrow (V_{l1}^*, U_{l1}^*)$ και $(U_{l2}, V_{l2}) \leftrightarrow (V_{l2}^*, U_{l2}^*)$ στο πίνακα μετασχηματισμού \mathcal{W} της Εξ.(5.4.2). Οι τελεστές α_1^\dagger και α_2^\dagger αντιστοιχούν στις καταστάσεις των ημισωματιδίων με τη χαμηλότερη ενέργεια, ή στην μονοσωματιδιακή βάση στις καταστάσεις που είναι πιο κοντά στην επιφάνεια Fermi. Με άλλα λόγια, για να μελετήσουμε την χαμηλότερη διεγερμένη μονοσωματιδιακή κατάσταση, εφαρμόζουμε το φαινόμενο μπλοκαρίσματος ανταλλάσσοντας τους τελεστές καταστροφής α_1, α_2 με τους αντίστοιχους τελεστές δημιουργίας $\alpha_1^\dagger, \alpha_2^\dagger$.

Τυπικά, αν έχουμε ένα συνδυασμό από n ημισωματίδια το τελικό ισομερές θα ανήκει σε μία από τις 2^{n-1} διεγερμένες καταστάσεις, με συνολικό K και ομοτιμία, που καθορίζονται από τον συνδυασμός των μεμονωμένων ημισωματιδιακών τροχιών με τον ακόλουθο τρόπο:

$$K = |\pm K_1 \pm K_2 \pm \dots \pm K_n|, \quad \pi = \prod_{i=1}^n \pi_i \quad (5.11)$$

Συνήθως ανάμεσα σε αυτές τις καταστάσεις, αυτή με την υψηλότερη τιμή του K , $K = \sum_i |K_i|$ έχει τη χαμηλότερη ενέργεια και έχει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να αντιστοιχεί σε έναν πραγματικό K -ισομερή.

Τώρα, στη δική μας περίπτωση, όπου κατασκευάζουμε σχηματισμούς δύο ή περισσότερων ημισωματιδίων μπλοκάροντας συγκεκριμένες ημισωματιδιακές καταστάσεις διαφορετικών k -blocks στον $+K$ υποχώρο, εξ ορισμού, μπλοκάρουμε ταυτόχρονα και τις συζυγείς καταστάσεις στον $-K$ υποχώρο. Το συγκεκριμένο ζεύγος νουκλεονίων σπάει και πρέπει να αφαιρέσουμε την συνεισφορά του από τον τανυστή ζευγαρώματος. Ακόμη, σπάει η συμμετρία χρονικής αναστροφής και αίρεται ο εκφυλισμός ανάμεσα στις καταστάσεις με αντίθετο πρόσημο του K . Οπότε, πρέπει να επιλύσουμε τις εξισώσεις RHB και για τον υποχώρο με $-K$ και να συμπεριλάβουμε τα ρεύματα στο σχηματισμό των μεσονικών πεδίων. Αυτό εφαρμόζεται στην έρευνα [203] όπου μελετήθηκε ο σχηματισμός ισομερών δύο ημισωματιδίων στους πυρήνες στην περιοχή των ακτινίδων κοντά στο $N = 162$. Στα αποτελέσματα αυτής της διερεύνησης μπορεί κανείς να δει, για έναν δεδομένο σχηματισμό δυο ημισωματιδίων, ότι υπάρχουν δύο καταστάσεις με ελάχιστα διαφορετική ενέργεια διέγερσης, οι οποίες ταυτοποιούνται από την συνολική τιμή του K που αντιστοιχεί είτε στην τιμή $K_{max} = K_1 + K_2$ ή $K_{min} = |K_1 - K_2|$. Επίσης μπορεί να δει κανείς και το γεγονός ότι ο σχηματισμός του ισομερούς με την τιμή K_{max} έχει πάντα χαμηλότερη ενέργεια από ότι αυτός με το K_{min} , σε συμφωνία με τον κανόνα που αναφέρθηκε προηγουμένως.

Ωστόσο, στην παρούσα έρευνα, ο πρωταρχικός μας στόχος είναι να αξιολογήσουμε την περιγραφή των K ισομερών στο πλαίσιο της θεωρίας των συναλλοιώτων συναρτησοειδών πυκνότητας μέσα από την προσέγγιση RHB, συγκρίνοντας τα θεωρητικά αποτελέσματα με γνωστά και καθιερωμένα πειραματικά παραδείγματα. Από τη στιγμή που η ενεργειακή διαφορά, όπως αυτή μετρήθηκε στο [203], ανάμεσα στις καταστάσεις με K_{max} και K_{min} είναι σχετικά μικρή και περίπου στα 0.1 MeV, ακολουθούμε μία διαφορετική προσέγγιση και διατηρούμε τη συμμετρία χρονικής αναστροφής για τις καταστάσεις πολλών ημισωματιδίων που κατασκευάζουμε. Αυτό γίνεται με την προσέγγιση της ίσης πλήρωσης (Equal Filling Approximation EFA), η εφαρμογή της οποίας στο πλαίσιο της μικροσκοπικής θεωρίας HFB, δικαιολογείται στην εργασία των Perez κ.α. [236]. Εφαρμογές της συγκεκριμένης προσέγγισης έχουν γίνει στη μη σχετικιστική HFB θεωρία με δυνάμεις τύπου Skyrme [237], όπου εξέτασαν καταστάσεις ενός ημισωματιδίου στην περιοχή των σπάνιων γαιών. Απεδείχθη ότι η προσέγγιση ίσης πλήρωσης είναι μία λογική προσέγγιση και ότι ουσιαστικά είναι ισοδύναμη με την τυπική διαδικασία μπλοκαρίσματος, αν σε αυτήν παραλειφθούν τα περιττά χρονικά πεδία. Στο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας RHB η προσέγγιση EFA έχει εφαρμοστεί όπως είπαμε στην μελέτη [235] για την περίπτωση περιττών συστημάτων, μπλοκάροντας την κατάσταση του ημισωματιδίου με την χαμηλότερη ενέργεια στην βασική κατάσταση του γειτονικού άρτιου συστήματος. Όπως εξηγείται, σε

αυτήν την προσέγγιση αγνοείται η συνεισφορά των ρευμάτων και το φαινόμενο του μπλοκαρίσματος μοιράζεται κατά μέσο όρο και στους δύο σχηματισμούς των $+K$ και $-K$ υποχώρων. Με αυτόν τον τρόπο σε κάθε επανάληψη της επίλυσης, καταλήγουμε σε πεδία που διατηρούν τη συμμετρία χρονικής αναστροφής. Πρακτικά, αυτό σημαίνει ότι σε κάθε βήμα, υπολογίζουμε το μέσο όρο του πίνακα πυκνότητας ρ και μετατρέπουμε σε συμμετρικό τον πίνακα ζευγαρώματος κ για κάθε υποχώρο του K στον οποίο εκτελείται το μπλοκάρισμα. Αυτό γίνεται αντικαθιστώντας τις κανονικές σχέσεις με τις ακόλουθες:

$$\rho' = \rho_{M \times M} + \frac{1}{2}(U_{k_b} U_{k_b}^{*T} - V_{k_b}^* V_{k_b}^T), \quad (5.12)$$

$$\kappa' = \kappa_{M \times M} - \frac{1}{2}(U_{k_b} V_{k_b}^{*T} + V_{k_b}^* U_{k_b}^T), \quad (5.13)$$

όπου U_{k_b} και V_{k_b} αντιστοιχούν στον συντελεστής Bogoliubov U και V των μπλοκαρισμένων ημισωματιδιακών επιπέδων.

Επεκτείνοντας αυτή τη μέθοδο, μπορούμε να κατασκευάσουμε καταστάσεις δύο ημισωματιδίων οι οποίες θεωρητικά αποτελούν διεγερμένες καταστάσεις με καλά καθορισμένο K και ομοτιμία. Ξεκινώντας από τον ισότοπο που θέλουμε να εξετάσουμε επιλύουμε αρχικά τις εξισώσεις RHB για τη βασική κατάσταση. Στη συνέχεια μελετώντας το φάσμα των μονοσωματιδιακών τροχιών γύρω από την ενέργεια Fermi, επιλέγουμε να μπλοκάρουμε εκείνο το συνδυασμό ημισωματιδιακών καταστάσεων που δημιουργούν τον K -ισομερή τον οποίο θέλουμε να μελετήσουμε. Το σημαντικό μέγεθος που μας ενδιαφέρει είναι η ενέργεια διέγερσης. Για τον υπολογισμό της αφαιρούμε τη συνολική ενέργεια του ισότοπου μετά τη διαδικασία του μπλοκαρίσματος από την αντίστοιχη της βασικής κατάστασης. Με αυτήν την μέθοδο μπορούμε να συγκρίνουμε την θεωρητική αυτή πρόβλεψη με πειραματικά δεδομένα.

5.5 Παραμορφωμένοι και μεταβατικοί πυρήνες με $A \approx 160 - 190$

Σε αυτήν την ενότητα επικεντρωνόμαστε στην περιοχή των σπάνιων γαιών. Πιο βαρείς πυρήνες θα συζητηθούν με μεγαλύτερη λεπτομέρεια στην επόμενη ενότητα.

5.5.1 Διεγέρσεις πολλών ημισωματιδίων-κοινά δομικά στοιχεία και χαρακτηριστικά παραδείγματα K -ισομερών

Όπως αναφέρθηκε και νωρίτερα, σε περιοχές όπως αυτές με $Z \sim 72$, $N \sim 104$, οι εσωτερικές διεγέρσεις που οφείλονται στη μονοσωματιδιακή κατανομή πολλών η-

μισωματιδίων, ανταγωνίζονται τις διεγερμένες καταστάσεις συλλογικού χαρακτήρα βασισόμενες σε χαμηλότερης ενέργειας εσωτερικές καταστάσεις, και συχνά οι εσωτερικές μονοσωματιδιακές καταστάσεις καταλήγουν στους παρατηρούμενους ισομερείς. Οι σχηματισμοί δύο ημισωματιδίων που εμφανίζονται ως οι κύριες

Νετρόνια	Πρωτόνια
$Z \sim 70 - 74 \quad N \sim 100 - 108$	
$6^- : 5/2^- [512], 7/2^+ [633]$	
$6^+ : 5/2^- [512], 7/2^- [514]$	$6^+ : 5/2^+ [402], 7/2^+ [404]$
$8^- : 9/2^+ [624], 7/2^- [514]$	$8^- : 9/2^- [514], 7/2^+ [404]$
$Z \sim 76 \quad N \sim 110 - 116$	
$10^- : 9/2^- [505], 11/2^+ [615]$	
$10^+ : 9/2^+ [624], 11/2^+ [615]$	$10^+ : 9/2^- [514], 11/2^- [505]$
$12^+ : 11/2^+ [615], 13/2^+ [606]$	
$Z \sim 102 - 108 \quad N \sim 150 - 164$	
$8^- : 7/2^+ [624], 9/2^- [734]$	$8^- : 7/2^- [514], 9/2^+ [624]$
$8^- : 7/2^+ [613], 9/2^- [734]$	
$10^- : 9/2^+ [615], 11/2^- [725]$	$10^- : 9/2^- [505], 11/2^+ [615]$

Πίνακας 5.1: Παραδείγματα διεγέρσεων δύο-ημισωματιδίων σε prolate παραμορφωμένους πυρήνες, όπως προκύπτουν από το παραμορφωμένο μοντέλο φλοιών.

συνιστώσες των ισομερών με υψηλό- K , στις περιοχές με καθαρή παραμόρφωση, δίνονται στον πίνακα 5.1. Αυτές οι καταστάσεις προκύπτουν από το παραμορφωμένο μοντέλο φλοιών, όπου το πυρηνικό δυναμικό προσεγγίζεται από αυτό ενός ανισότροπου αρμονικού ταλαντωτή με αξονική συμμετρία. Σε αυτήν την περίπτωση οι ιδιοσυναρτήσεις χαρακτηρίζονται από τους κβαντικούς αριθμούς n_z, n_ρ, m_l όπου m_l είναι η προβολή της τροχιακής στροφορμής στον άξονα συμμετρίας, με

$$N = n_z + 2n_\rho + m_l = n_x + n_y + n_z. \quad (5.14)$$

Η αξονική συμμετρία σημαίνει ότι το m_l είναι καλός κβαντικός αριθμός. Το ίδιο ισχύει και για την τρίτη συνιστώσα του σπιν s_z , καθώς και για την τρίτη συνιστώσα

της ολικής στροφομής j_z , η οποία έχει ιδιοτιμή

$$\Omega = m_l + m_s = m_l \pm \frac{1}{2}. \quad (5.15)$$

Με βάση αυτό το μοντέλο που αναπτύχθηκε από τον Nilsson, έχει καθιερωθεί ο χαρακτηρισμός των ιδιοσυναρτήσεων συστημάτων με αξονική συμμετρία σε κυλινδρική βάση με τους λεγόμενους κβαντικούς αριθμούς Nilsson

$$\Omega\pi[Nn_zm_l], \quad (5.16)$$

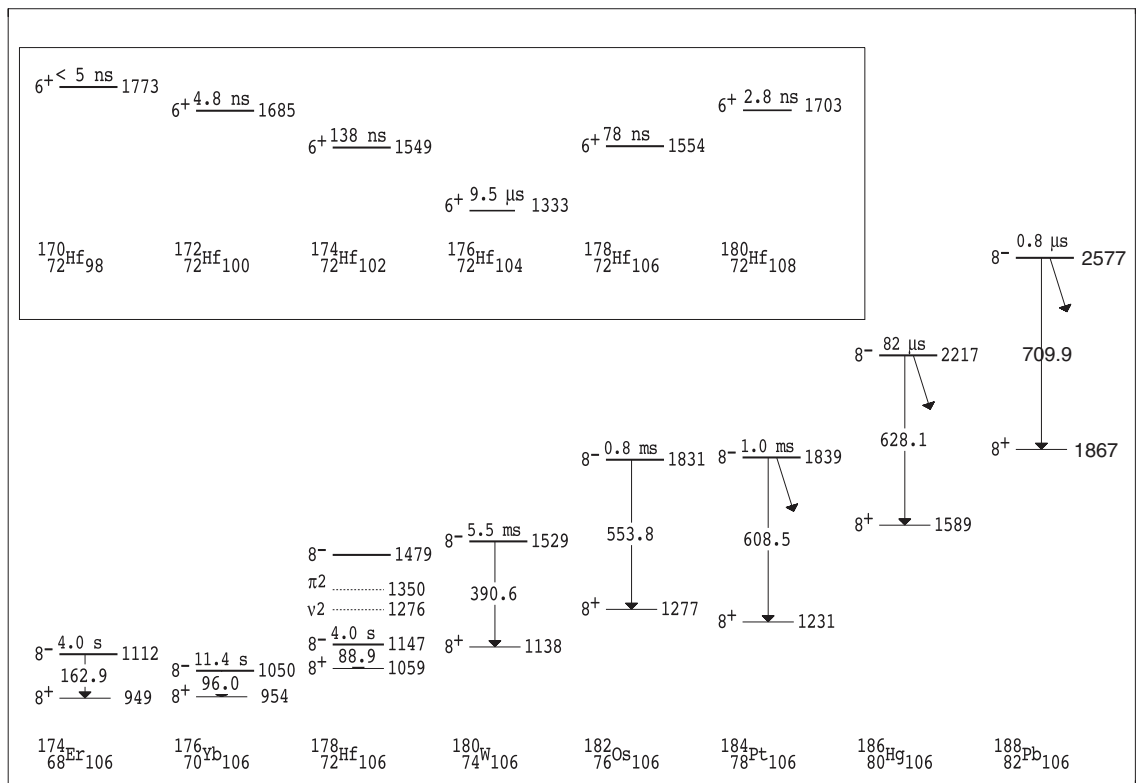
όπου π είναι η ομοτιμία της κατάστασης [$\pi = (-1)^N$].

Αυτό που έχουμε λοιπόν στον πίνακα 5.1 είναι συνδυασμοί τροχιών με υψηλό- Ω που κείτονται κοντά είτε στην πρωτονιακή είτε την νετρονιακή επιφάνεια Fermi, για παραμόρφωση κοντά στο $\beta \sim 0.25$. Στην περιοχή του Άφνιου, για παράδειγμα προκύπτουν εναλλασσόμενα ζεύγη των 6^+ και 8^- σχηματισμών, τα πιο χαμηλά από τα οποία οδηγούν σε ένα 6^+ και 8^- ισομερές. Σημαντική ανάμειξη συμβαίνει όταν οι εσωτερικές καταστάσεις από τους εναλλακτικούς σχηματισμούς πρωτονίων και νετρονίων βρίσκονται κοντά σε ενέργεια, όπως είναι η περίπτωση των 8^- καταστάσεων στο ^{178}Hf .

Στο Σχ.5.3 όπως δίνεται στο άρθρο [211], φαίνεται χαρακτηριστικά η συστηματική πειραματική εμφάνιση του K -ισομερούς 8^- , που προκύπτει από τον συνδυασμό των δύο νετρονιακών καταστάσεων $\nu^2 7/2^- [514] \otimes 9/2^+ [624]$, στους ισότονους πυρήνες $N = 106$ και του K -ισομερούς 6^+ , από τον συνδυασμό των $5/2^- [512]$, $7/2^- [514]$, στα ισότοπα του Άφνιου με $Z = 72$. Όπως αναφέρεται και στο [211], είναι αξιοσημείωτη η εμφάνιση του 8^- ισομερούς, από τον πλούσιο σε νετρόνια πυρήνα ^{174}Er και σε όλους του καλά παραμορφωμένους πυρήνες μέχρι το Os, αλλά και μέσω της μεταβατικής περιοχής του ^{184}Pt στην περιοχή όπου έχουμε συνύπαρξη prolate-oblate² σχήματος (^{186}Pb). Αυτό συνεπάγεται την ύπαρξη ενός τοπικού ελάχιστου prolate σχήματος στην δυναμική επιφάνεια των αντίστοιχων πυρηνικών συστημάτων. Επίσης στα ίδια ισότοπα του Hf, έχει παρατηρηθεί η εμφάνιση του ισομερούς 8^- που δημιουργείται από τον σχηματισμό των δύο πρωτονιακών τροχιών $\pi^2 7/2^+ \otimes 9/2^-$, ενώ στην αρχική έρευνα [238] από την οποία προέρχεται και το σχήμα 5.3 παρουσιάζεται και η ακολουθία του 6^+ ισομερούς από τις δύο εσωτερικές μονοσωματιδιακές τροχιές $\nu^2 7/2^- [514] \otimes 5/2^- [512]$, για τους ισότονους πυρήνες με $N = 104$. Συνολικά τα παραδείγματα που αναφέραμε αποτελούν χαρακτηριστικές περιπτώσεις οι οποίες έχουν μελετηθεί επισταμένα και θα αποτελέσουν τη βάση της αξιολόγησης της θεωρητικής μας προσέγγισης.

Προτού προχωρήσουμε με την παρουσίαση των αριθμητικών αποτελεσμάτων των ισομερών στις περιπτώσεις που μόλις αναφέραμε, θα εξετάσουμε πρώτα την

²Ελλειψοειδές σχήμα που προέρχεται από την περιστροφή στο χώρο μίας έλλειψης γύρω από μικρό άξονα. (Σε αντίθεση με το prolate όπου η περιστροφή γίνεται γύρω από τον μεγάλο άξονα.)



Σχήμα 5.3: Συστηματική απεικόνιση του πειραματικά παρατηρούμενου ισομερούς 8^- στους $N = 106$ και του 6^+ στους $Z = 72$ πυρήνες.

ύπαρξη παρόμοιων καταστάσεων όπως αυτές που δίνονται στον πίνακα 5.1 και αποτελούν τα δομικά στοιχεία για την πιθανή ύπαρξη K -ισομερών.

5.5.2 Διαγράμματα Nilsson με τη σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου

Όπως είναι γνωστό η αξονική παραμόρφωση επηρεάζει τη μονοσωματιδιακή δομή των πυρήνων. Σε μαγικούς πυρήνες, όπου ισχύει η σφαιρική συμμετρία, έχουμε διατήρηση της στροφορμής, έτσι στην προσέγγιση του σφαιρικού μοντέλου φλοιών οι τροχιές που ορίζονται από μία συγκεκριμένη τιμή της ολικής στροφορμής j είναι εκφυλισμένες. Όμως η πλειονότητα των πυρήνων έχουν ανοιχτούς φλοιούς και το σχήμα τους παρουσιάζει παραμόρφωση, οπότε ο παραπάνω εκφυλισμός δεν ισχύει, και κάθε τροχιά διασπάται σε $j + 1/2$ τροχιές. Ένας τρόπος για να εξεταστεί η επίδραση της παραμόρφωσης στην εσωτερική δομή του πυρήνα είναι τα γνωστά διαγράμματα Nilsson, στα οποία απεικονίζεται η μεταβολή των ενεργειών των μονοσωματιδιακών επιπέδων σε σχέση με την αύξηση της παραμόρφωσης.

Η παράμετρος παραμόρφωσης β_2 , είναι ένα μέτρο της αξονικής παραμόρφωσης του πυρηνικού σχήματος και καθορίζεται από την τετραπολική ροπή Q_{20} μέσα από τη σχέση

$$Q_{20} = \sqrt{\frac{9}{5\pi}} AR_0^2 \beta_2. \quad (5.17)$$

Στην περίπτωση της σχετικιστικής προσέγγισης Hartree-Bogoliubov για αξονική συμμετρία, έχουμε τη δυνατότητα να μεταβάλλουμε την παραμόρφωση του πυρηνικού συστήματος που μας ενδιαφέρει, επιλύοντας τις RHB εξισώσεις με επιπλέον περιορισμό στη συλλογική τετραπολική ροπή. Πιο συγκεκριμένα, όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή της ενότητας 2.5. χρησιμοποιούμε την μέθοδο του τετραγωνικού περιορισμού. Με τη μέθοδο αυτή έχουμε τη δυνατότητα να κατασκευάσουμε αντίστοιχα διαγράμματα με τα διαγράμματα Nilsson για τις περιοχές των πυρήνων όπου θέλουμε να εξετάσουμε την δημιουργία των K -ισομερών.

Τα σχήματα που ακολουθούν δείχνουν ακριβώς αυτήν την προσπάθεια για τις περιοχές των πυρήνων που αναφέρονται και στον πίνακα 5.1. Δηλαδή για την περιοχή των βαρέων πυρήνων με $Z \sim 70 - 74$ $N \sim 100 - 108$ και $Z \sim 76$ $N \sim 110 - 116$ και για τους υπερβαρείς πυρήνες με $Z \sim 102 - 108$ $N \sim 150 - 164$. Στο κάθε διάγραμμα η παράμετρος παραμόρφωσης μεταβάλλεται από το 0 που αντιστοιχεί στο σφαιρικό σχήμα σε θετικές τιμές που αντιστοιχούν σε παραμορφωμένους πυρήνες με επίμηκες σχήμα prolate τύπου μέχρι το 0.5. Για την περίπτωση της σφαιρικής συμμετρίας όπου οι τροχιές χαρακτηρίζονται από τους κβαντικούς αριθμούς $n\ell_j$, δίνουμε στον κατακόρυφο άξονα και δίπλα στα σημεία που αντιστοιχούν στο σύνολο των $j + 1/2$ εκφυλισμένων τροχιών τους αντίστοιχους κβα-

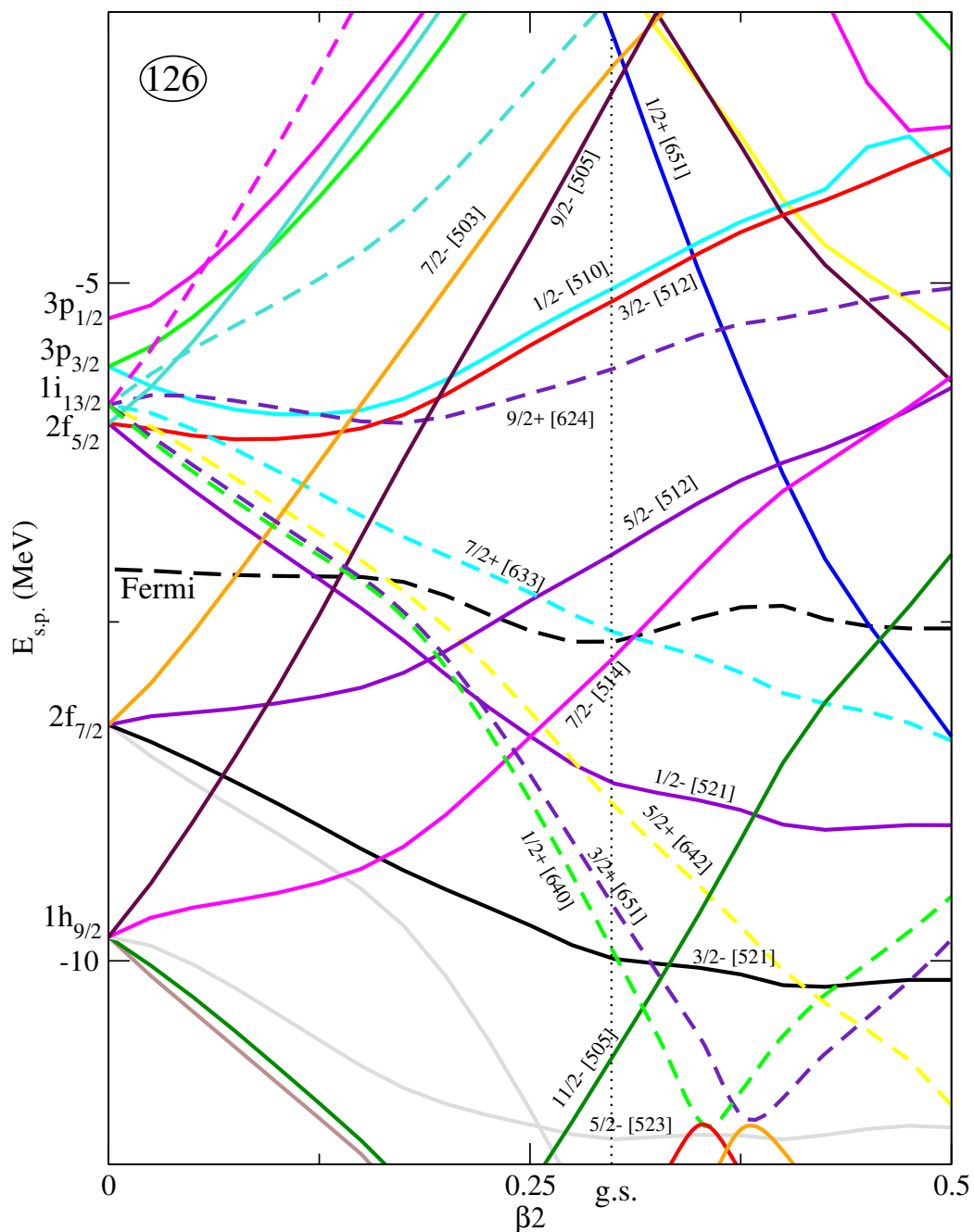
ντικούς αριθμούς. Βλέπουμε όπως είναι αναμενόμενο ότι όσο αυξάνεται η τιμή της παραμόρφωσης το σπάσιμο κάθε σφαιρικής τροχιάς στις συνιστώσες της. Οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις που προέρχονται από την τροχιά που παρεισφρεί από τον ανώτερο j φλοιό, λόγω της σύζευξης σπιν-στροφορμής, αναπαριστώνται με διακεκομμένες καμπύλες. Επίσης, με μαύρη διακεκομμένη καμπύλη παρουσιάζεται η μεταβολή της επιφάνειας Fermi ενώ με κατακόρυφη διακεκομμένη γραμμή δείχνεται η τιμή της παραμόρφωσης της βασικής κατάστασης χωρίς την επιβολή του περιορισμού. Τέλος, γύρω από αυτήν την γραμμή αναγράφονται οι κβαντικοί αριθμοί Nilsson που αντιστοιχούν σε κάθε ξεχωριστή μονοσωματιδιακή κατάσταση.

Για την πρώτη περιοχή βαρέων πυρήνων, επιλέχθηκαν τρία ισότοπα του Άφνιου, τα ^{174}Hf , ^{176}Hf και ^{178}Hf , με $Z = 72$ και $N = 102 - 106$. Έτσι, στα Σχ. 5.4-5.5 έχουμε τα διαγράμματα Nilsson για τα νετρόνια και τα πρωτόνια αντίστοιχα, με βάση τον πυρήνα ^{174}Hf . Παρομοίως στα 5.6-5.7 τα ίδια διαγράμματα για τον ^{176}Hf και στα 5.8-5.9 για τον ^{178}Hf . Ο λόγος που διαλέξαμε τρεις πυρήνες για την ίδια περιοχή είναι για να δείξουμε ότι η εικόνα του διαγράμματος είναι ίδια ανάμεσα στους πυρήνες που ανήκουν στην ίδια περιοχή. Στη συνέχεια, για τη δεύτερη περιοχή βαρέων πυρήνων επιλέχθηκε ο πυρήνας ^{186}Os με $Z = 76$ και $N = 110$, στα Σχ. 5.10-5.11 παρουσιάζονται τα αντίστοιχα διαγράμματα Nilsson για τα νετρόνια και τα πρωτόνια. Για την τελευταία περιοχή των υπερβαρέων πυρήνων χρησιμοποιήθηκε ο πυρήνας ^{254}No με $Z = 102$ και $N = 152$, τα διαγράμματα Nilsson για τα νετρόνια και τα πρωτόνια αυτού του πυρήνα δίνονται στα Σχ. 5.12-5.13.

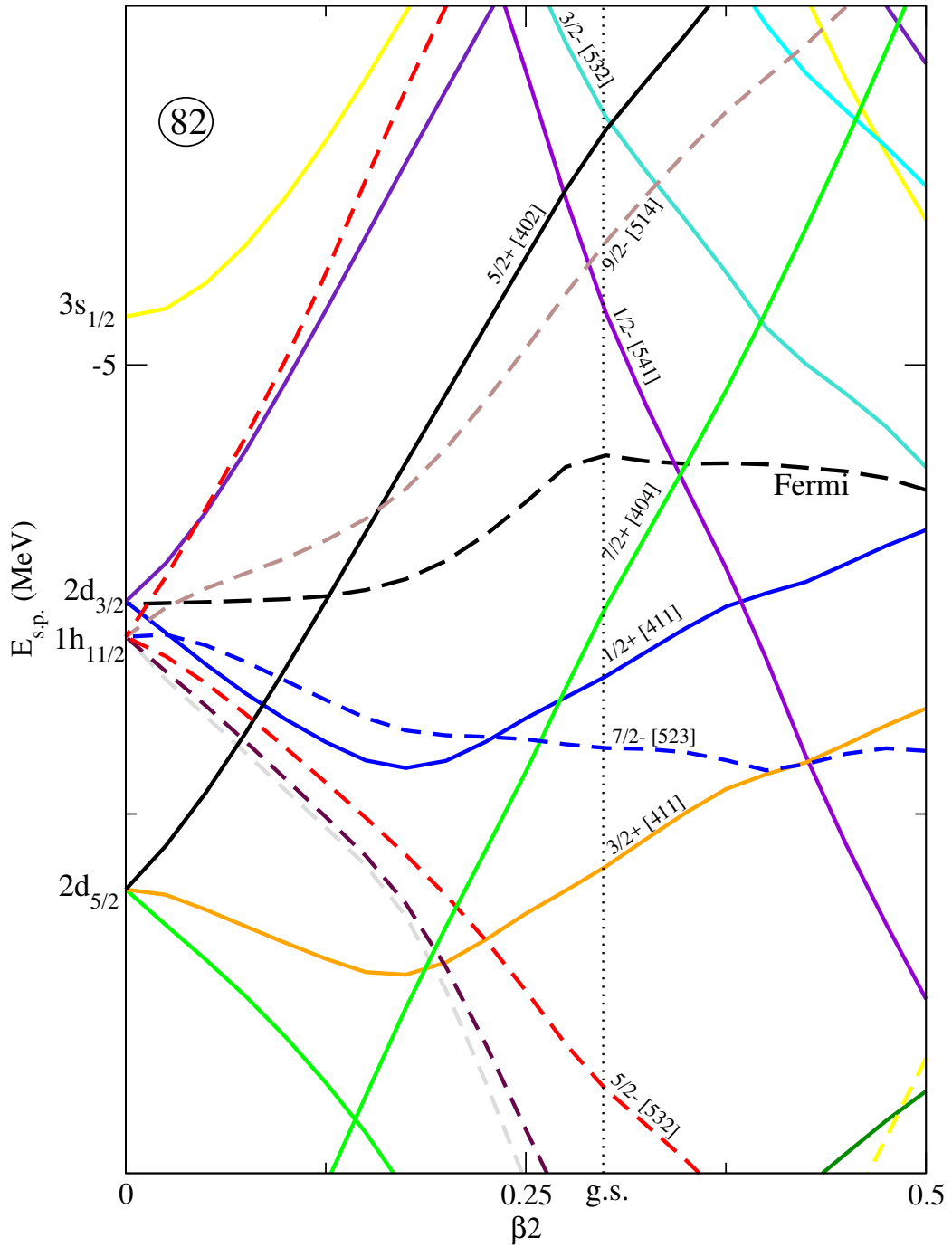
Παρατηρούμε ότι για τιμές παραμόρφωσης $b_2 \approx 0.2 - 0.3$, οι καταστάσεις που αναφέρονται στον πίνακα 5.1 εμφανίζονται και με τους υπολογισμούς που βασίζονται στη σχετικιστική θεωρία μέσου-πεδίου. Αυτό το γεγονός μας επιτρέπει να μελετήσουμε K -ισομερείς που προέρχονται από τον συνδυασμό των συγκεκριμένων μονοσωματιδιακών τροχιών και έχουν ανακαλυφθεί πειραματικά.

5.5.3 Οι 6^+ K -ισομερείς στα ισότοπα του Hf και στους $N = 104$ ισότονους πυρήνες

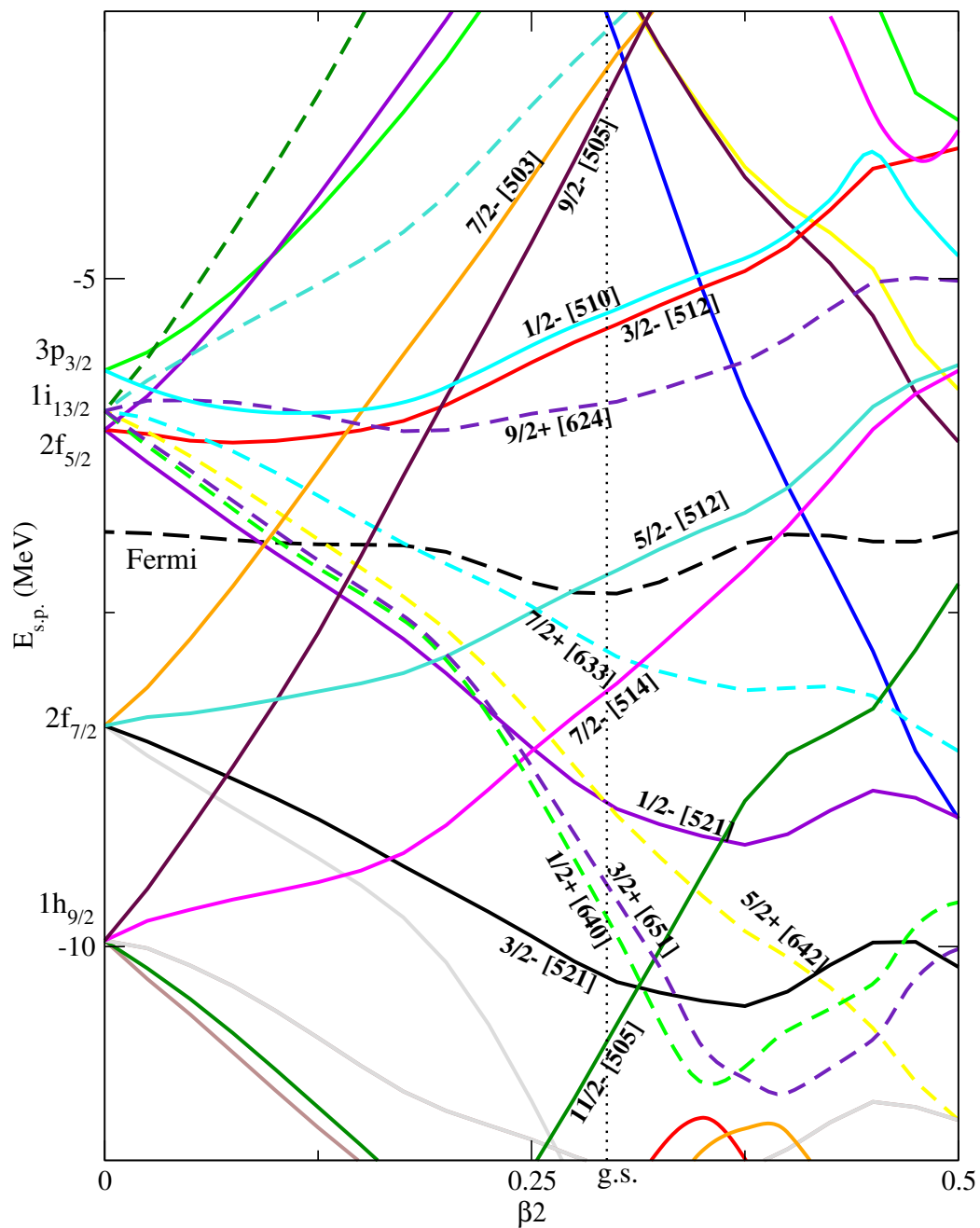
Σε αυτήν την ενότητα θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα της μελέτης των 6^+ K -ισομερών που συστηματικά εμφανίζονται στα ισότοπα του Hf και στους $N = 104$ ισότονους πυρήνες. Οι σχηματισμοί δύο ημισωματιδίων που μπορούν να δημιουργήσουν αυτόν τον K -ισομερή με βάση τον πίνακα 5.1, είναι οι $\nu 5/2^- [512] \otimes \nu 7/2^- [514]$ και $\pi 9/2^- [514] \otimes \pi 7/2^+ [404]$. Συγκεκριμένα, όπως αναφέρεται στα άρθρα [211, 238] αλλά όπως καταγράφεται και στον πίνακα με τους συνολικούς K -ισομερείς σε πυρήνες με $A > 100$ στην ανασκόπηση [212], στα έξι ισότοπα $^{170-176}\text{Hf}$ και στους $N = 104$ ισότονους ^{172}Er ^{174}Yb ^{178}W ^{180}Os , ο ισομερής



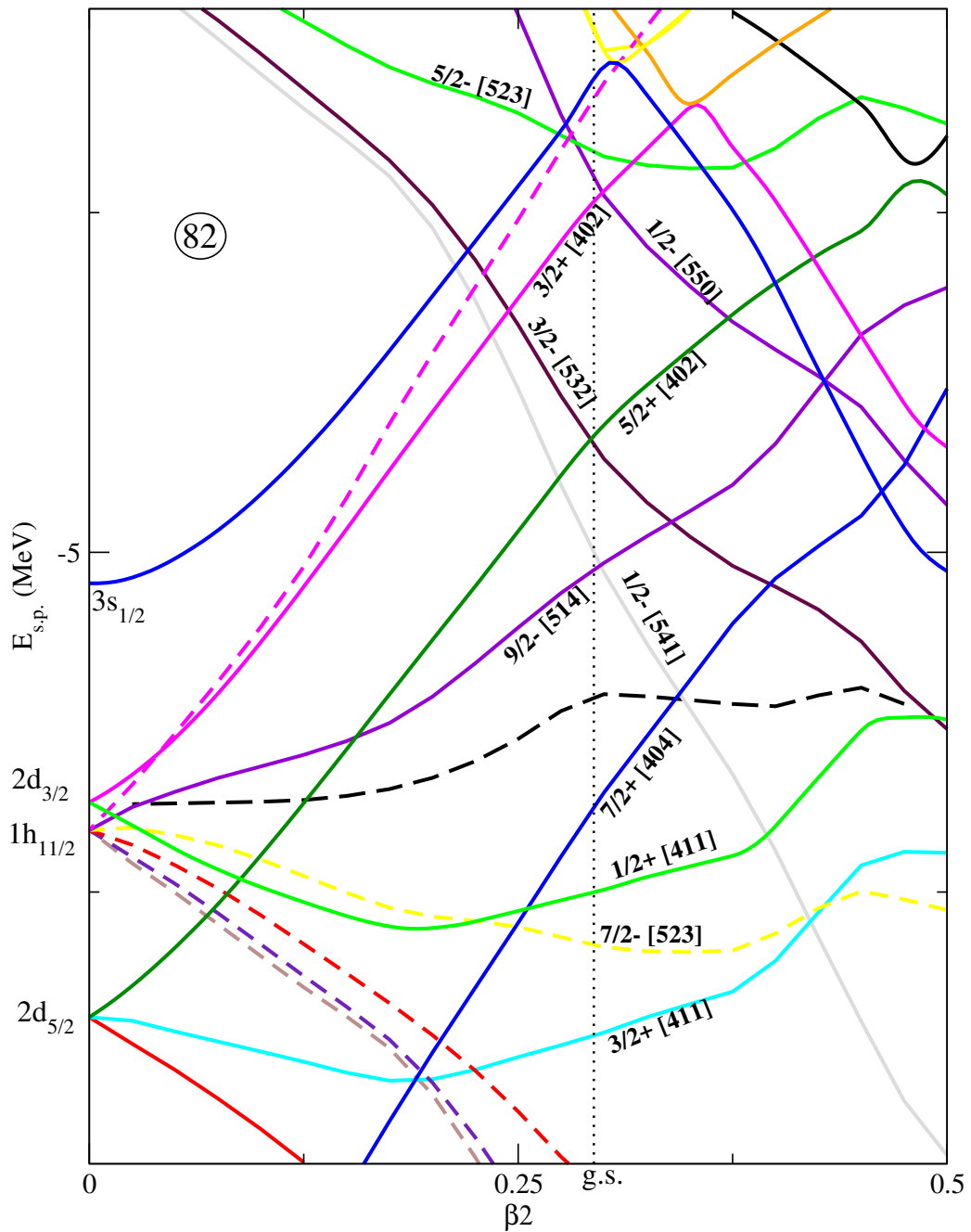
Σχήμα 5.4: Μεταβολή των ενεργειών των νετρονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{174}Hf .



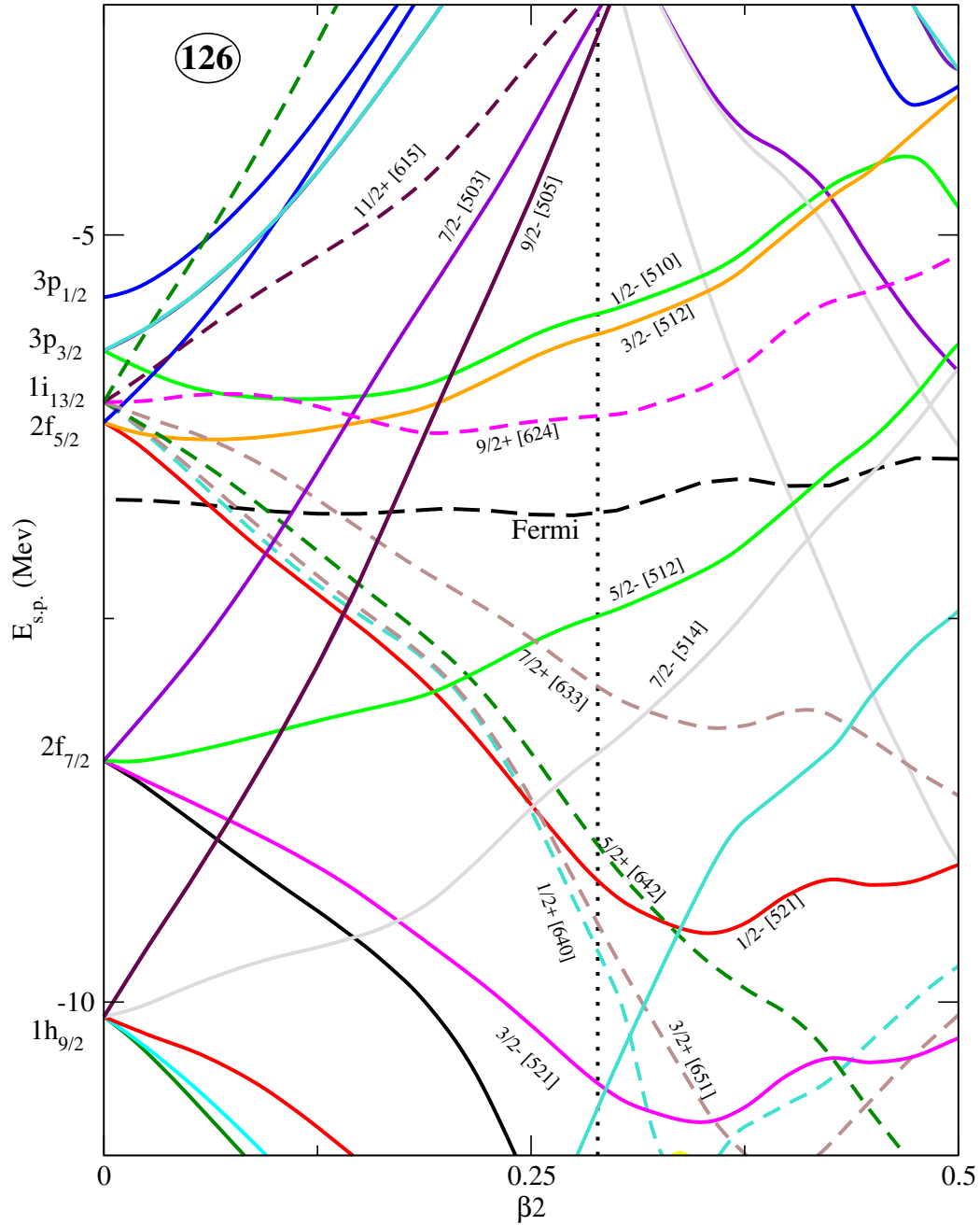
Σχήμα 5.5: Μεταβολή των ενεργειών των πρωτονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{174}Hf .



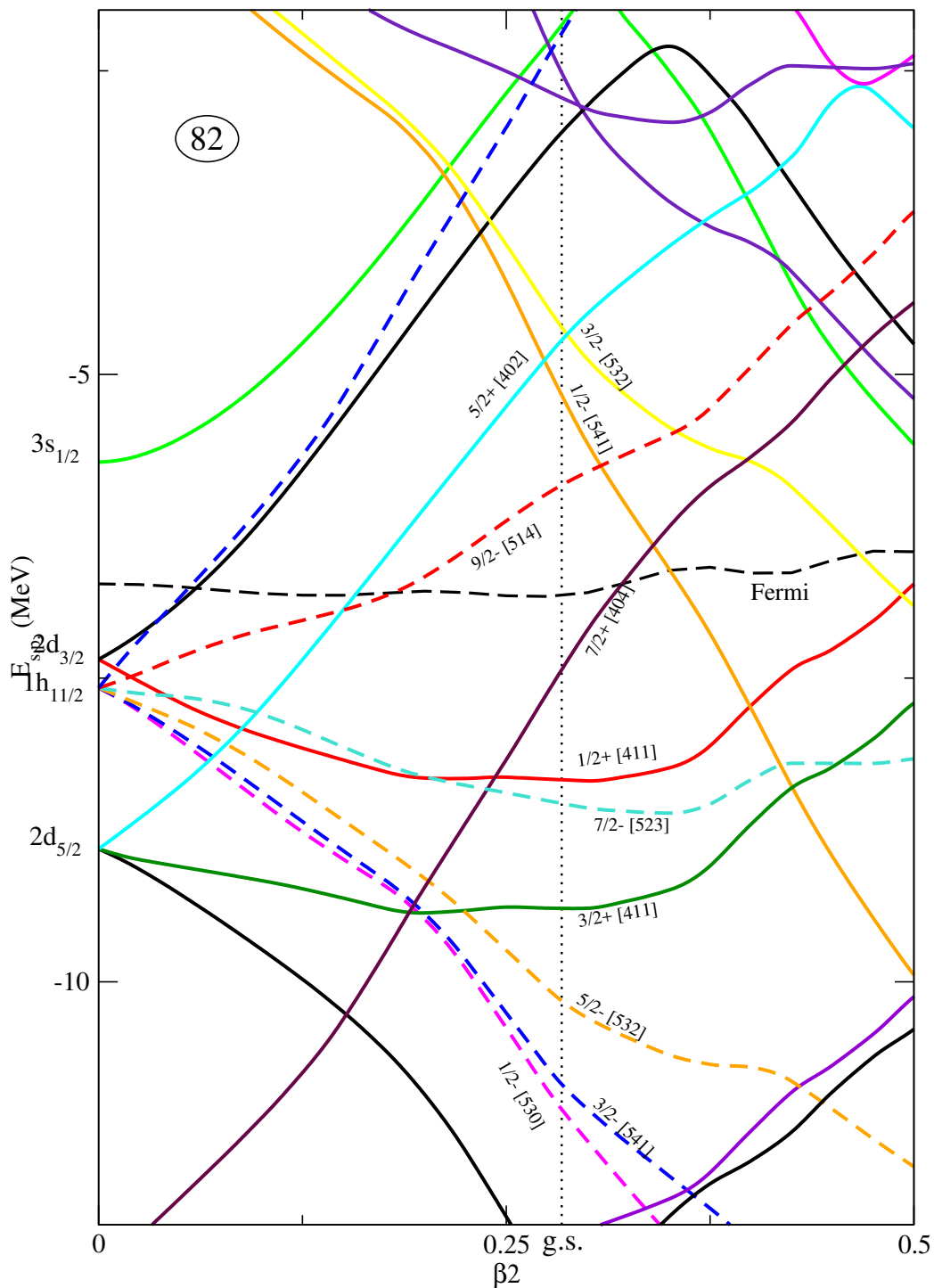
Σχήμα 5.6: Μεταβολή των ενεργειών των νετρονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{176}Hf .



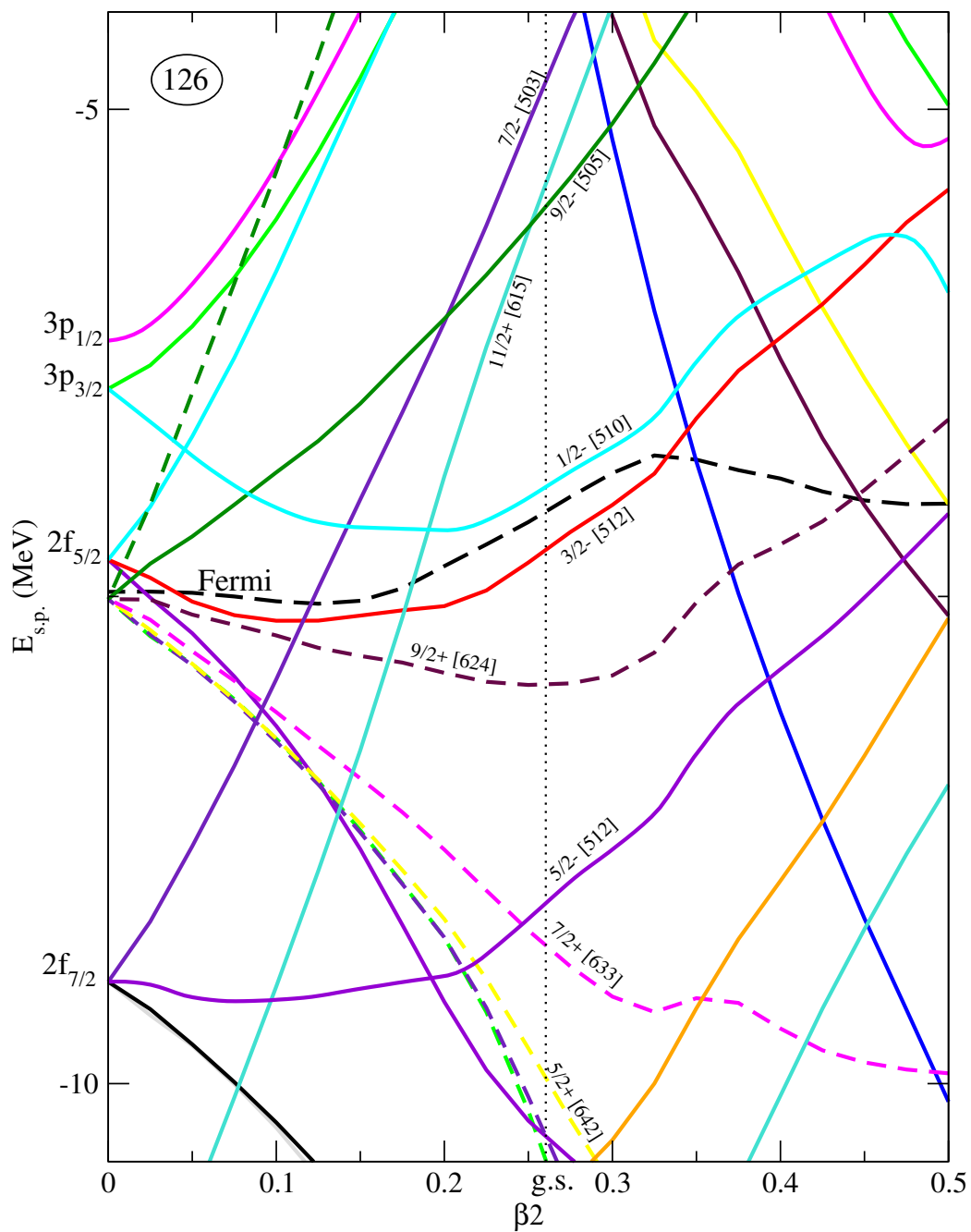
Σχήμα 5.7: Μεταβολή των ενεργειών των πρωτονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{176}Hf .



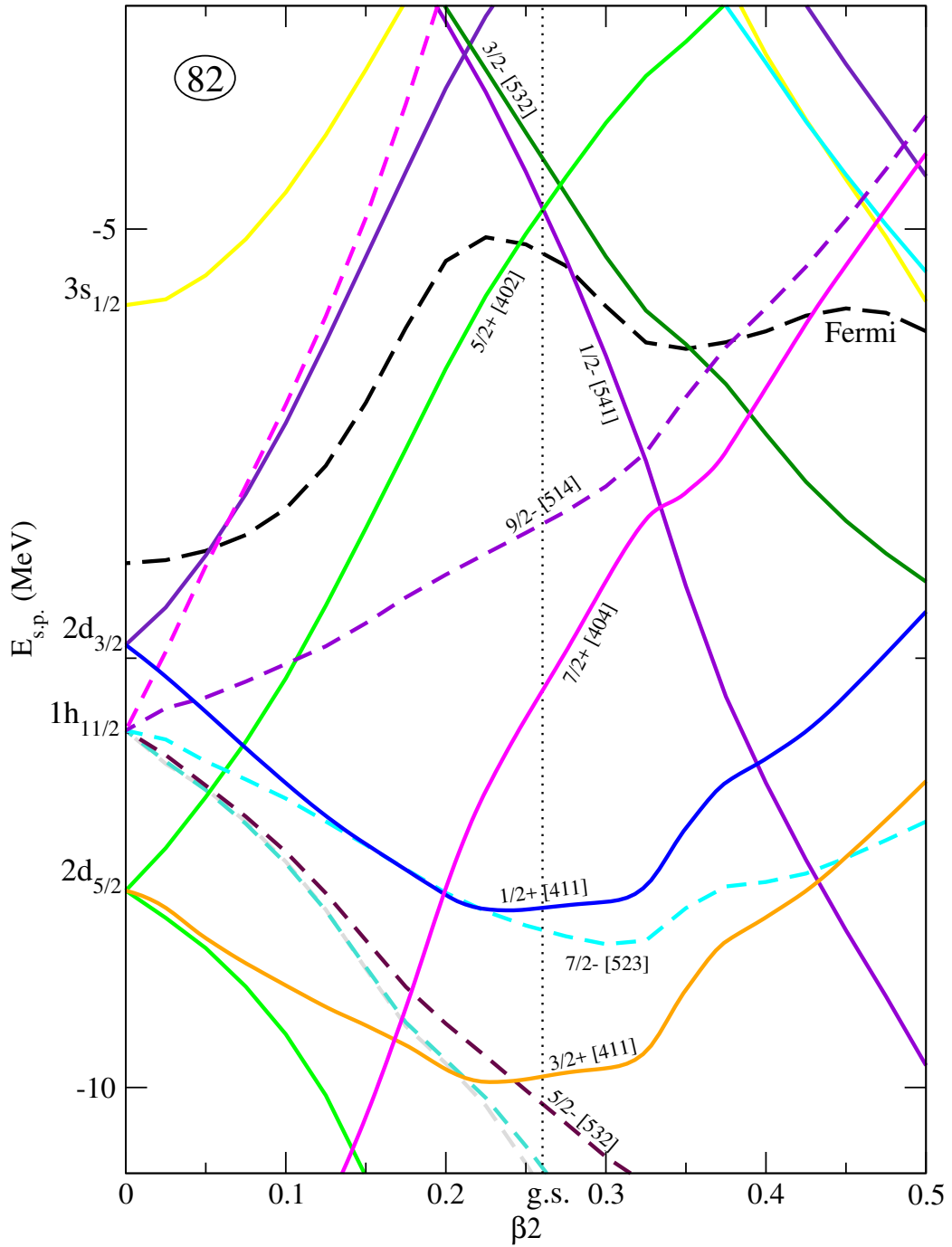
Σχήμα 5.8: Μεταβολή των ενεργειών των νετρονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{178}Hf .



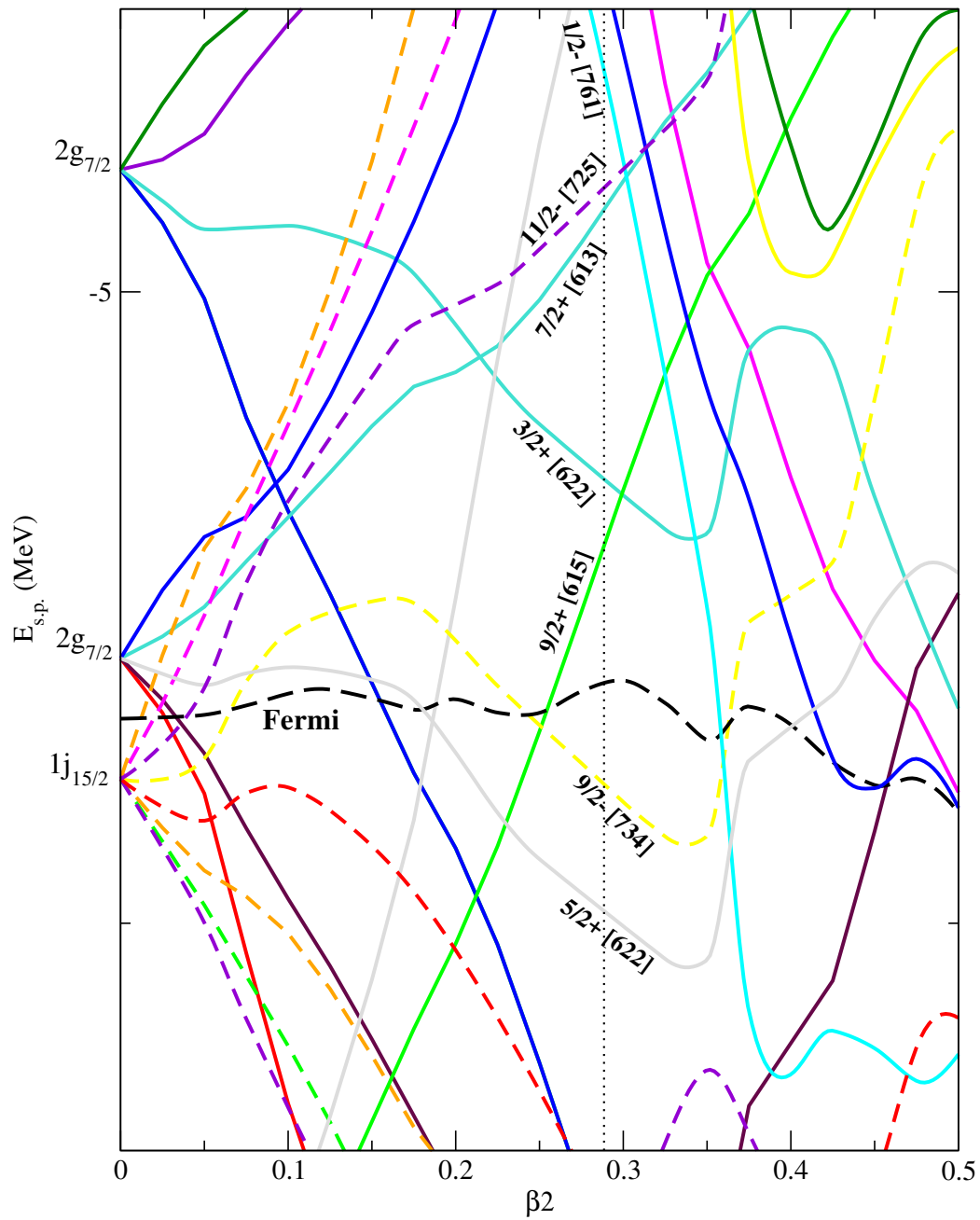
Σχήμα 5.9: Μεταβολή των ενεργειών των πρωτονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{178}Hf .



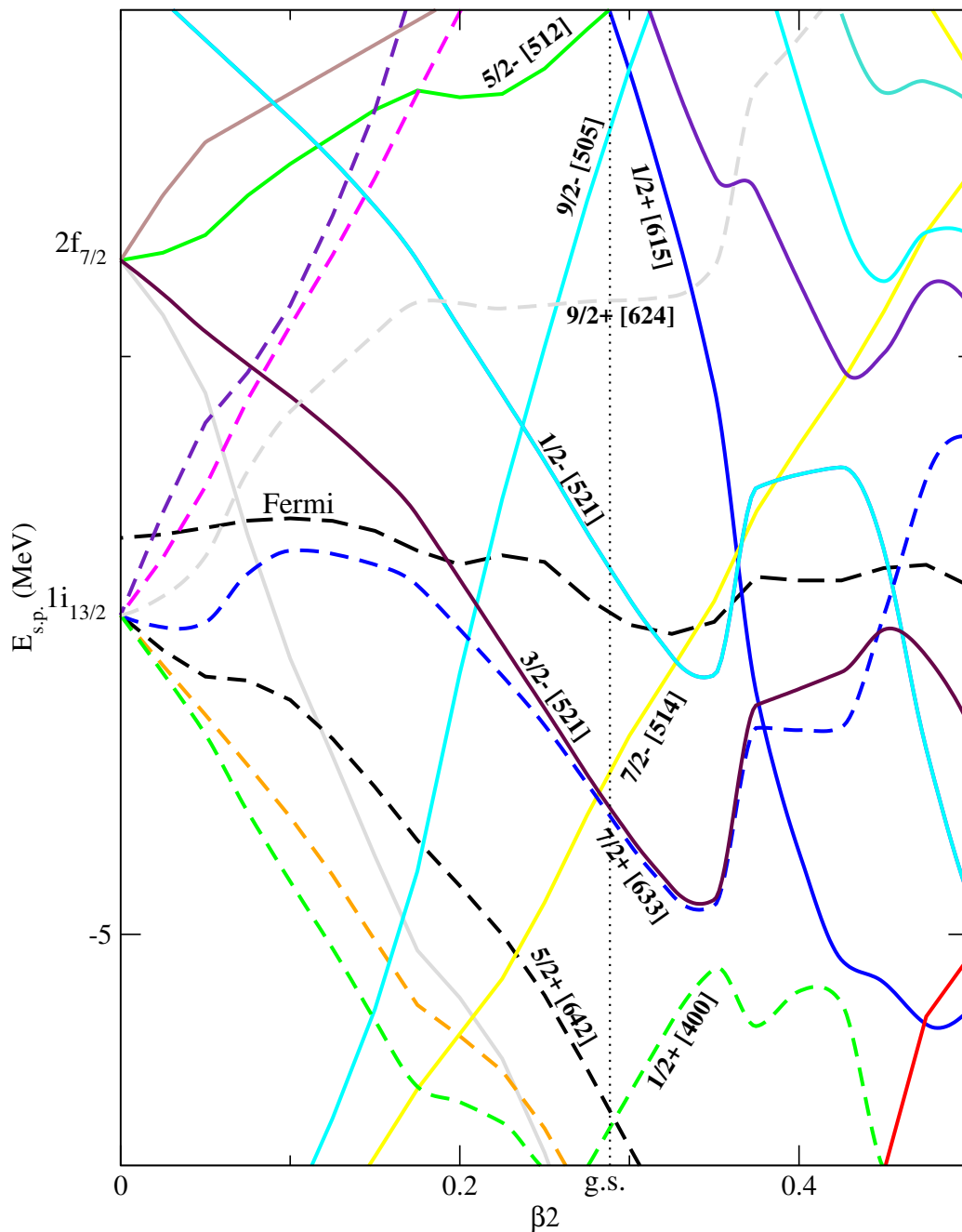
Σχήμα 5.10: Μεταβολή των ενεργειών των νετρονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{186}Os .



Σχήμα 5.11: Μεταβολή των ενεργειών των πρωτονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{186}Os .



Σχήμα 5.12: Μεταβολή των ενεργειών των νετρονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{254}No .



Σχήμα 5.13: Μεταβολή των ενεργειών των πρωτονιακών καταστάσεων με την παραμόρφωση, κοντά στην επιφάνεια Fermi για τον πυρήνα ^{254}No .

με 6^+ δημιουργείται από τις $\nu 5/2^- [512] \otimes \nu 7/2^- [514]$ καταστάσεις νετρονίων, ενώ στα $^{178,180}\text{Hf}$ ισότοπα δημιουργείται από τις $\pi 5/2^+ [402] \otimes \pi 7/2^+ [404]$ καταστάσεις πρωτονίων. Συνεπώς, για τη σύγκριση της θεωρητικής πρόβλεψης με τα πειραματικά δεδομένα εφαρμόσαμε τη διαδικασία του μπλοκαρίσματος στις συγκεκριμένες τροχιές για τους αντίστοιχους πυρήνες.

Ισότοπα του Hf

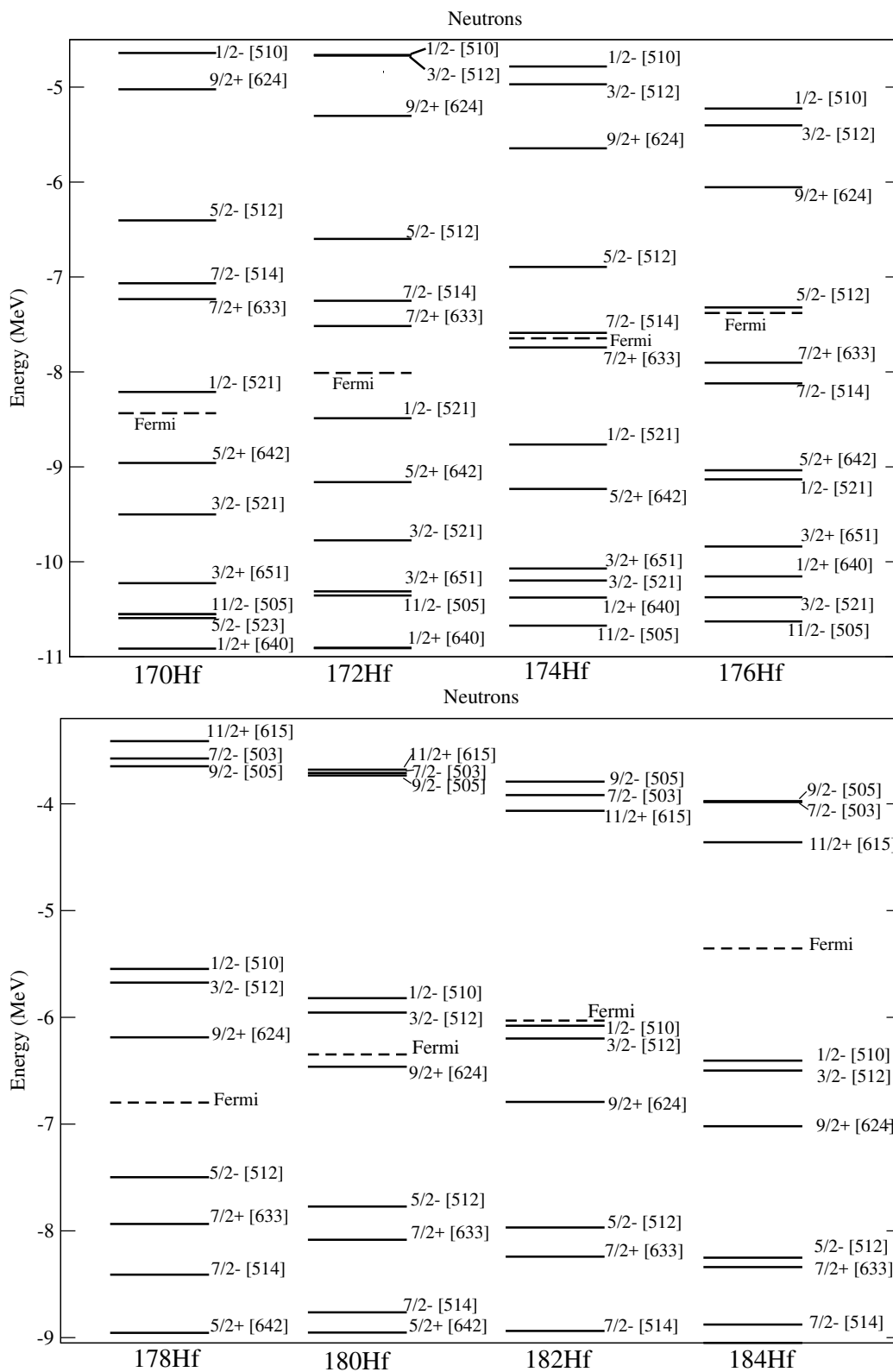
Για να κατανοήσουμε καλύτερα την εξέλιξη των ενεργειών των συγκεκριμένων ισομερών όπως προκύπτουν ως μονοσωματιδιακές διεγέρσεις, εξετάσαμε αρχικά το μονοσωματιδιακό φάσμα των καταστάσεων γύρω από την επιφάνεια Fermi για τη βασική κατάσταση σε κάθε ένα από τα ισότοπα του Hf. Σχηματικά παρουσιάζονται για τα νετρόνια στο Σχ. 5.14 και για τα πρωτόνια στο Σχ. 5.15. Όπως φαίνεται, τόσο οι δύο νετρονιακές καταστάσεις $\nu 5/2^- [512]$ $\nu 7/2^- [514]$ όσο και οι δύο πρωτονιακές καταστάσεις $\pi 5/2^+ [402]$ $\pi 7/2^+ [404]$, βρίσκονται στην περιοχή της επιφάνειας Fermi. Αυτό φυσικά είναι το ίδιο συμπέρασμα στο οποίο καταλήξαμε από τα διαγράμματα Nilsson.

Ένα πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό της θέσης που καταλαμβάνουν οι τροχιές από τις οποίες σχηματίζεται το εκάστοτε ισομερές, είναι η απόλυτη απόσταση από την ενέργεια Fermi. Όπως αναφέραμε στη θεωρητική εισαγωγή του παρόντος κεφαλαίου, χρησιμοποιούμε τη σχετικιστική εκδοχή της προσέγγισης Hartree-Bogoliubov για τη δημιουργία των Κ-ισομερών. Θεωρητικά, οι μονοσωματιδιακές διεγέρσεις με τη χαμηλότερη ενέργεια προκύπτουν από τη δημιουργία καταστάσεων δύο-ημισωματιδίων, μπλοκάροντας τις αντίστοιχες καταστάσεις με τη μικρότερη ημισωματιδιακή ενέργεια, όπως αυτή προκύπτει από την επίλυση των RHB εξισώσεων για την βασική κατάσταση. Οι μονοσωματιδιακές ενέργειες που απεικονίζουμε στα φάσματα σε αυτό το σημείο προκύπτουν από τον μετασχηματισμό στην κανονική βάση, όπως αναφέρεται και στην ενότητα 4.4.2 του προηγούμενου κεφαλαίου. Στη βάση αυτή η ημισωματιδιακή ενέργεια $E_{qp,k}$ και η μονοσωματιδιακή ενέργεια ϵ_k μιας δεδομένης τροχιάς k συνδέονται με τη σχέση

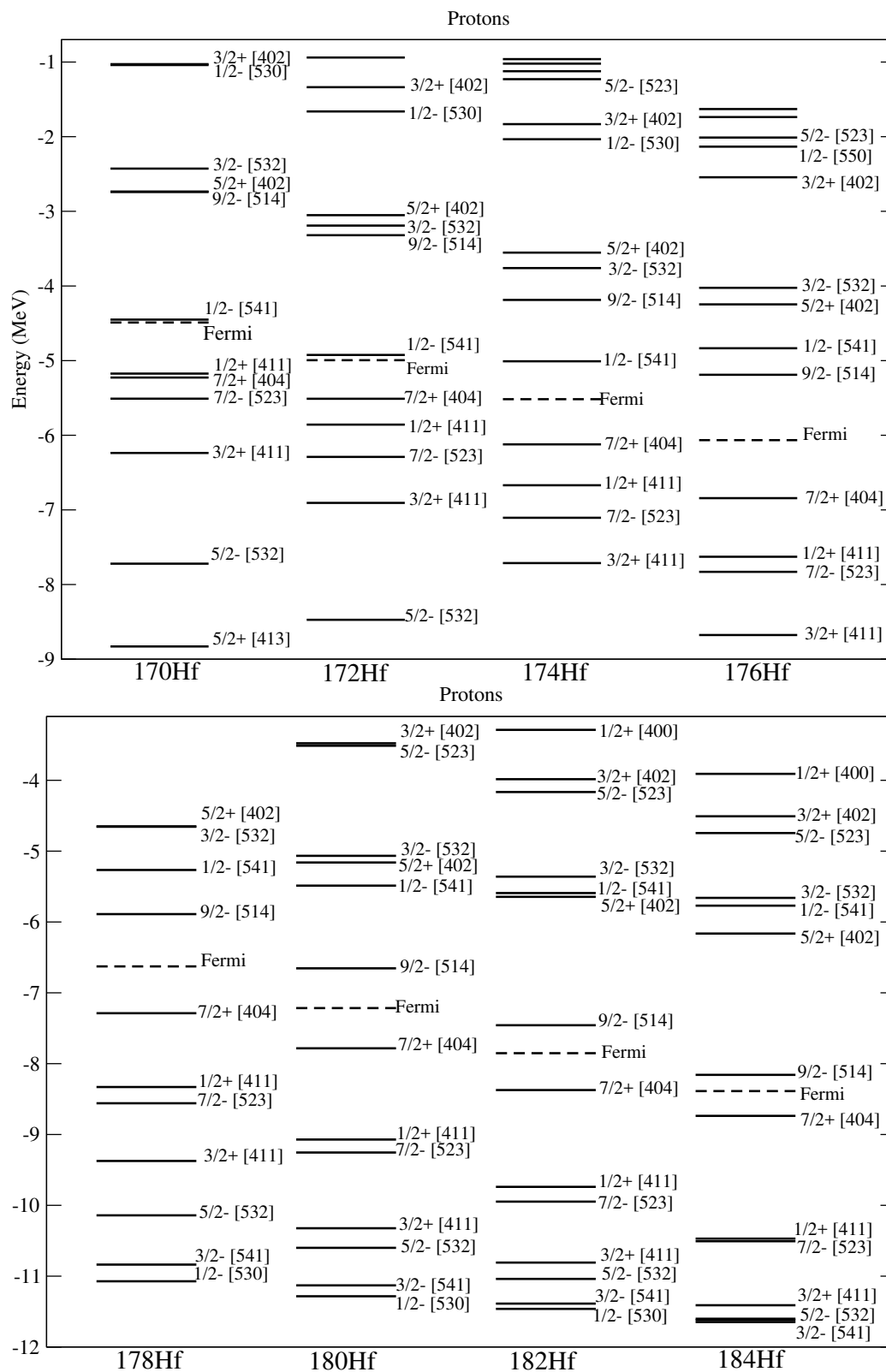
$$E_{qp} = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_k^2}, \quad (5.18)$$

όπου φυσικά το λ είναι η ενέργεια Fermi που καθορίζεται από τον αριθμό των πρωτονίων και των νετρονίων και Δ_k η παράμετρος του χάσματος ζευγαρώματος. Όπως γίνεται αμέσως αντιληπτό οι καταστάσεις που βρίσκονται εγγύτερα στην επιφάνεια Fermi έχουν αντίστοιχα και τις μικρότερες ημισωματιδιακές ενέργειες.

Παρατηρώντας λοιπόν με λεπτομέρεια τα φάσματα των ισότοπων του Hf, αρχικά βλέπουμε όπως είναι λογικό την επιφάνεια Fermi για τα νετρόνια να μετατοπίζεται σε υψηλότερη θέση πάνω από την επόμενη σε ενέργεια τροχιά. Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε ισότοπο, οι ημισωματιδιακές καταστάσεις των νετρονίων με



Σχήμα 5.14: Ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών καταστάσεων των νετρονίων γύρω από την επιφάνεια Fermi για τα άρτια άρτια ισότοπα του Hf με $N = 98 - 112$.



Σχήμα 5.15: Ίδιο με το Σχ. 5.14 αλλά για τα πρωτόνια.

τη μικρότερη απόσταση από την επιφάνεια Fermi είναι διαφορετικές. Αντιθέτως για τις καταστάσεις των πρωτονίων, η σχετική θέση της επιφάνειας Fermi παραμένει σταθερή. Φυσικά όσο αυξάνεται ο αριθμός των νετρονίων το σύνολο τόσο των νετρονιακών όσο και των πρωτονιακών καταστάσεων μετατοπίζεται σε χαμηλότερες ενέργειες, λόγω της μεγαλύτερης σύνδεσης που δημιουργούν τα επιπλέον σωματίδια.

Αν επικεντρωθούμε στις νετρονιακές καταστάσεις $\nu 5/2^-$ [512] $\nu 7/2^-$ [514], από τις οποίες σχηματίζεται ο ισομερής 6^+ , βλέπουμε ότι στον πρώτο πυρήνα ^{170}Hf δεν είναι οι κοντινότερες στην επιφάνεια Fermi, καθώς βρίσκονται πάνω από αυτήν. Όσο πηγαίνουμε σε βαρύτερα ισότοπα πλησιάζουν όλο και περισσότερο, μέχρι τον πυρήνα ^{176}Hf όπου έχουν την μικρότερη απόσταση, ενώ για βαρύτερους πυρήνες αρχίζουν πάλι να απομακρύνονται, βρισκόμενοι τώρα πιο χαμηλά. Συνεπώς, με βάση τη σχέση 5.18 και το γεγονός ότι σε πρώτη προσέγγιση η ενέργεια της διεγερμένης κατάστασης είναι περίπου ίση με το άθροισμα των ημισωματιδιακών ενεργειών, το φαινόμενο που περιγράψαμε επηρεάζει την ενέργεια του ισομερούς. Αυτό το ποιοτικό χαρακτηριστικό αποτυπώνεται όντως πειραματικά στη συστηματική μέτρηση της πειραματικής ενέργειας του συγκεκριμένου ισομερούς, όπως είδαμε στο Σχ. 5.3.

Για τον υπολογισμό της ενέργειας του ισομερούς στη σχετικιστική προσέγγιση Hartree-Bogoliubov, χρησιμοποιήσαμε τα δύο συναρτησοειδή DD-ME2 και DD-PC1. Επίσης, πρέπει να αναφερθεί ότι ο παράγοντας διαβάθμισης γfac , της δύναμης TMR που καθορίζει τις συσχετίσεις ζεύγους προσαρμόστηκε με ανάλογο τρόπο, με την ενότητα 4.4.2. Επιπλέον, για να εξετάσουμε την επιρροή διαφορετικής ισχύος στη δύναμη ζευγαρώματος, ακολουθήσαμε δύο διαφορετικούς τύπους για την προσαρμογή των χασμάτων στις βασικές καταστάσεις. Για την περίπτωση του νετρονιακού χάσματος, ο πρώτος τύπος είναι ο κλασικός τύπος των τριών σημείων

$$\Delta^{(3)}(N) = \frac{1}{2}[B(N-1, Z) + B(N+1, Z) - 2B(N, Z)], \quad (5.19)$$

και ο δεύτερος είναι ο τύπος των πέντε σημείων

$$\Delta^{(5)}(N) = \frac{1}{8}[B(N+2, Z) - 4B(N+1, Z) \quad (5.20)$$

$$+ 6B(N+1, Z) - 4B(N-1, Z) + B(N-2, Z)], \quad (5.21)$$

με αντίστοιχη μορφή για την περίπτωση των πρωτονίων. Όπως και στην ενότητα 4.4.2 οι πειραματικές τιμές για τις ενέργειες σύνδεσης λαμβάνονται από τους πίνακες πυρηνικών δεδομένων [200]. Οι εμπειρικές τιμές των χασμάτων που υπολογίζονται με βάση αυτούς τους τύπους δίνονται στον πίνακα 5.2. Εν γένει, βλέπουμε ότι ο κλασικός τύπος τριών σημείων, δίνει πιο μεγάλα χάσματα, οπότε

Πίνακας 5.2: Τιμές των χασμάτων ζευγαρώματος για τα ισότοπα του Hf, με βάση του τύπους των τριών Εξ. (5.19) και πέντε σημείων Εξ. (5.20)

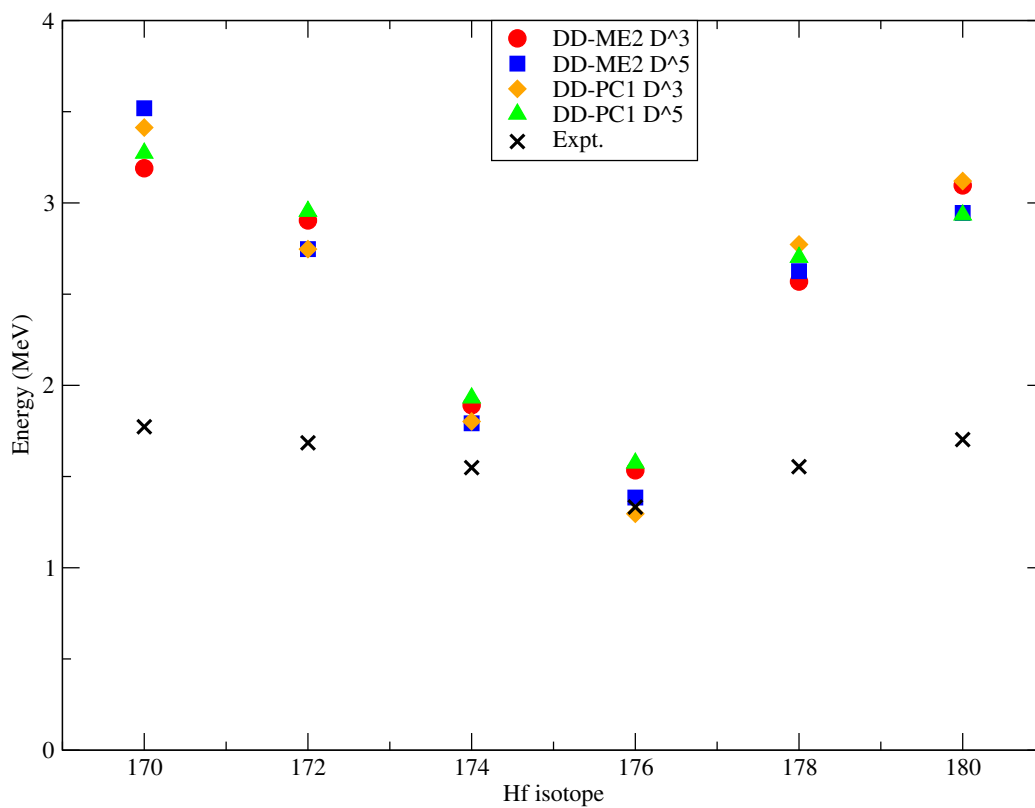
	Νετρόνια		Πρωτόνια	
	D^5	D^3	D^5	D^3
170 Hf(98,72)	1.087	1.180	1.123	1.352
172 Hf(100,72)	0.893	0.981	1.062	1.289
174 Hf(102,72)	0.810	0.899	0.976	1.201
176 Hf(104,72)	0.786	0.895	0.911	1.136
178 Hf(106,72)	0.699	0.763	0.847	1.065
180 Hf(108,72)	0.712	0.846	0.828	1.031
182 Hf(110,72)	0.604	0.706	0.784	1.005
184 Hf(112,72)	0.633	0.699	1.445	0.945

προσαρμόζοντας τη δύναμη ζεύγους σε αυτά έχουμε μία πιο ισχυρή αλληλεπίδραση ζευγαρώματος.

Προσαρμόζοντας λοιπόν τη δύναμη ζευγαρώματος με αυτόν τον τρόπο υπολογίσαμε την συνολική ενέργεια της βασικής κατάστασης κάθε ισότοπου. Στη συνέχεια, εφαρμόζοντας το μπλοκάρισμα των καταστάσεων $\nu 5/2^-$ [512] $\nu 7/2^-$ [514] στους πυρήνες $^{170-176}\text{Hf}$ και των $\pi 5/2^+$ [402] $\pi 7/2^+$ [404] στους πυρήνες $^{178,180}\text{Hf}$, σχηματίζουμε την κατάσταση των δύο ημισωματιδίων που αντιστοιχεί στον Κ-ισομερή με κβαντικούς αριθμούς 6^+ . Όπως αναφέρθηκε η ενέργεια της διεγερμένης κατάστασης βρίσκεται από την διαφορά ανάμεσα στη συνολική ενέργεια της βασικής κατάστασης και της κατάστασης των δύο ημισωματιδίων.

Τα αριθμητικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στον πίνακα 5.3, για κάθε συναρτησοειδές δίνουμε στην πρώτη στήλη τις ενέργειες με την προσαρμογή της δύναμης ζεύγους στον τύπο τριών σημείων Εξ. (5.19) και στη δεύτερη στήλη στον τύπο των πέντε σημείων Εξ. (5.20). Στην τελευταία στήλη δίνουμε τις πειραματικές ενέργειες όπως καταγράφονται στα άρθρα [211, 212]. Στο Σχ. 5.16, απεικονίζεται σχηματικά η εξέλιξη της ενέργειας στους διάφορους ισότοπους σε σχέση με πάλι την πειραματική εικόνα.

Αρχικά παρατηρούμε ότι η εξέλιξη της θεωρητικής πρόβλεψης για την ενέργεια του 6^+ , ακολουθεί παρόμοια διαδρομή με τα πειραματικά σημεία. Μειώνεται σταδιακά μέχρι την ελάχιστη τιμή στο ισότοπο ^{176}Hf και στη συνέχεια αυξάνεται



Σχήμα 5.16: Σχηματική απεικόνιση της μεταβολής της ενέργειας του 6^+ ισομερούς για τα δύο συναρτησοειδή DD-ME2, DD-PC1 συγκριτικά με την πειραματική τιμή.

Πίνακας 5.3: Η ενέργεια διέγερσης σε (MeV) του K -ισομερούς 6^+ στα ισότοπα με $Z = 72$ του Hf. Για κάθε συναρτησοειδές δίνουμε τα αποτελέσματα με την προσαρμογή της δύναμης ζεύγους στους δύο διαφορετικούς τύπους D^3 και D^5 .

	DD-ME2		DD-PC1		Expt.
	D^3	D^5	D^3	D^5	
170 Hf	3.190	3.519	3.413	3.273	1.773
172 Hf	2.904	2.747	2.747	2.954	1.685
174 Hf	1.891	1.792	1.802	1.931	1.549
176 Hf	1.534	1.385	1.296	1.574	1.333
178 Hf	2.569	2.626	2.772	2.702	1.554
180 Hf	3.096	2.945	3.120	2.934	1.703

πάλι. Παράλληλα σε αριθμητικό επίπεδο, η απόκλιση ανάμεσα στα πειραματικά δεδομένα και το θεωρητικό υπολογισμό της ενέργειας αυξομειώνεται με παρόμοιο τρόπο. Αρχικά στον πυρήνα ^{170}Hf έχουμε μία σχετικά μεγάλη απόκλιση κοντά στα 2MeV. Στους πυρήνες ^{174}Hf και ^{176}Hf , πλησιάζει σταδιακά στα πειραματικά σημεία με τον πυρήνα ^{176}Hf να παρουσιάζει τη μικρότερη απόκλιση, χαμηλότερη του 0.5 MeV. Όπως αναφέρθηκε, στους τέσσερις αυτούς πυρήνες, το ισομερές δημιουργείται από τις νετρονιακές καταστάσεις $\nu 5/2^- [512]$ $\nu 7/2^- [514]$. Όμως στο Σχ. 5.14 είδαμε ότι, όσο αυξάνουμε τον αριθμό των νετρονίων η σχετική απόσταση και η αντίστοιχη ημισωματιδιακή ενέργεια, ανάμεσα στην επιφάνεια Fermi και τις δύο αυτές καταστάσεις μειώνεται και ελαχιστοποιείται στο ^{176}Hf , εξηγώντας το αποτέλεσμα που μόλις περιγράψαμε. Από την άλλη στους δύο τελευταίους πυρήνες, το ισομερές δημιουργείται από δύο πρωτονιακές τροχιές, τις $\pi 5/2^+ [402]$ και $\pi 7/2^+ [404]$, οι οποίες όπως φαίνεται στα αντίστοιχα πρωτονιακά φάσματα, έχουν σταθερή θέση σχετικά με την επιφάνεια Fermi. Αυτό, αντικατοπτρίζεται και στην απόκλιση των θεωρητικών από τα πειραματικά σημεία στο Σχ. 5.16, με τη διαφορά να είναι στο 1 MeV.

Θα πρέπει να επισημανθεί ότι η διαδικασία του μπλοκαρίσματος επιφέρει σημαντική μείωση στην ενέργεια που οφείλεται στις συσχετίσεις ζεύγους. Αυτό είναι αναμενόμενο αφού μπλοκάροντας δυο ημισωματιδιακές καταστάσεις, αφαιρούμε ουσιαστικά τη συνεισφορά τους από το φαινόμενο του ζευγαρώματος. Από τη στιγμή που οι καταστάσεις που επιλέγουμε να μπλοκάρουμε είναι σχετικά κοντά στην επιφάνεια Fermi, η επίδραση του μπλοκαρίσματος θα είναι αρκετά σημαντική. Στον πίνακα 5.4 έχουμε υπολογίσει με βάση τη σχέση 2.72, την μείωση της

ενέργειας ζευγαρώματος, από τη βασική κατάσταση στην διεγερμένη κατάσταση του 6^+ ισομερούς. Αν συνυπολογιστεί το γεγονός ότι η τάξη μεγέθους της ενέργειας ζευγαρώματος στη βασική κατάσταση είναι σε όλους τους πυρήνες ≈ 10 MeV, γίνεται κατανοητό ότι η καταγεγραμμένη ενεργειακή απώλεια είναι σημαντική και αποτελεί σημαντικό μέρος της ενέργειας διέγερσης.

Πίνακας 5.4: Η μείωση σε MeV στην ενέργεια ζευγαρώματος λόγω του μπλοκαρίσματος για τη δημιουργία του ισομερούς 6^+ στα ισότοπα του Hf.

	DD-ME2		DD-PC1	
	D^3	D^5	D^3	D^5
170 Hf	4.60	5.06	4.55	4.82
172 Hf	4.60	4.60	2.06	4.80
174 Hf	5.36	4.35	3.43	3.95
176 Hf	3.76	5.28	3.22	5.50
178 Hf	5.38	5.60	4.08	2.20
180 Hf	5.29	5.48	3.60	2.95

Από την άλλη, παρά τις επιμέρους διαφορές στην ενεργειακή μείωση, βλέπουμε στο σχήμα 5.16 ότι οι προβλέψεις τόσο ανάμεσα στα δύο συναρτησοειδή αλλά και ανάμεσα στη διαφορετικής ισχύος δύναμη ζεύγους, δίνουν παραπλήσια αποτελέσματα. Δηλαδή, οι σχετικές διαφορές στις ενέργειες είναι πολύ μικρότερες από τη διαφορά τους συγκριτικά με την πειραματική τιμή. Εκτός φυσικά από τον πυρήνα ^{176}Hf , όπου η θεωρητική πρόβλεψη είναι αρκετά κοντά στην πειραματική. Αυτό σημαίνει, ότι το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό για την ακριβή πρόβλεψη της ενέργειας διέγερσης, είναι η αρχική θέση σχετικά με την επιφάνεια Fermi, των καταστάσεων που δημιουργούν τον ισομερή πυρήνα. Αν δηλαδή είναι όντως οι τροχιές με τις χαμηλότερες ημισωματιδιακές ενέργειες στη βασική κατάσταση, ή αν υπάρχουν στο θεωρητικά προερχόμενο φάσμα ενδιάμεσες καταστάσεις ή παραπλήσιες τροχιές, που βρίσκονται εγγύτερα στην επιφάνεια Fermi.

$N = 104$ ισότονοι

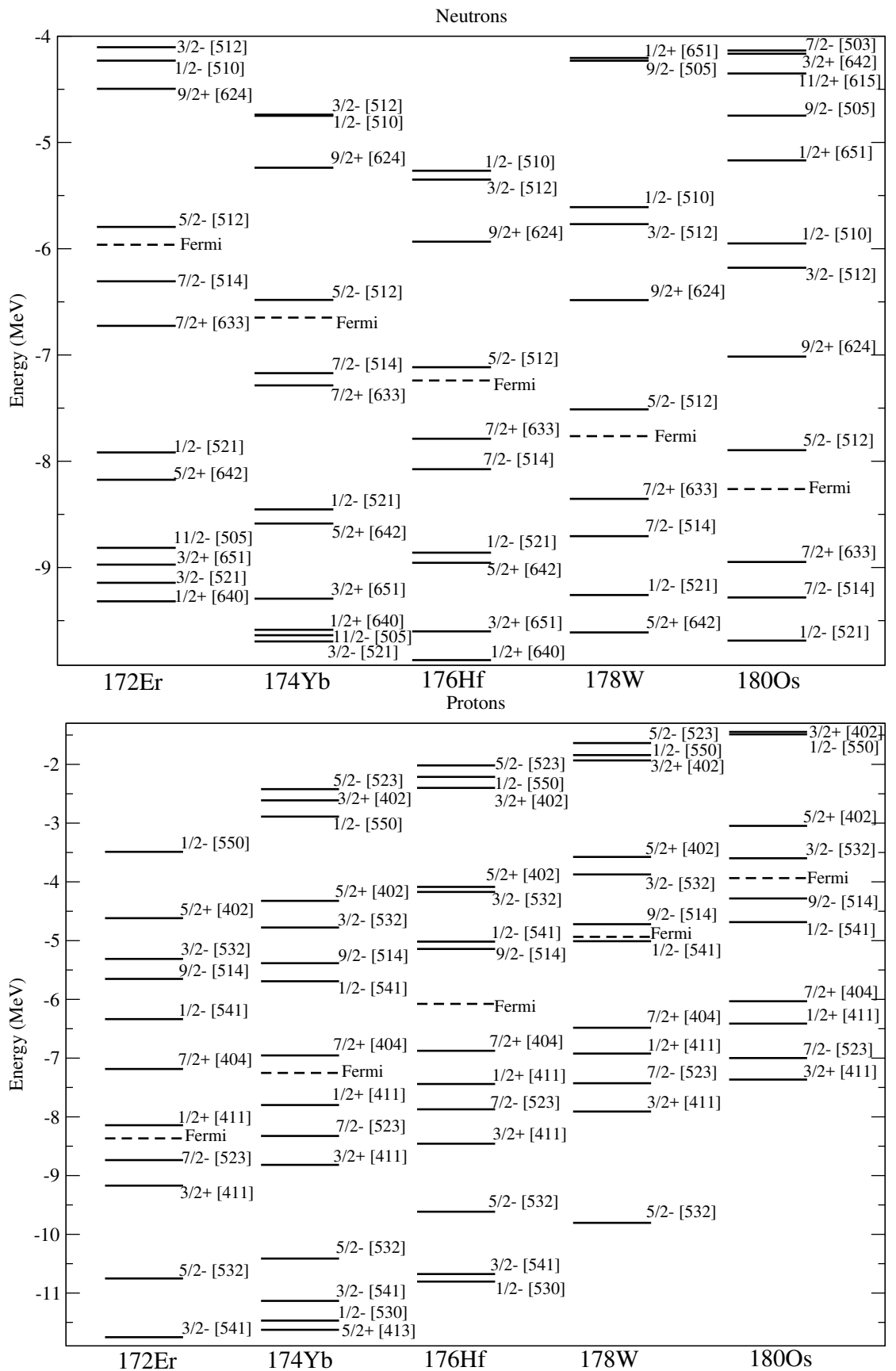
Η δεύτερη ακολουθία πυρήνων στους οποίους εμφανίζεται συστηματικά ο K -ισομερής 6^+ , είναι οι $N = 104$ ισότονοι, ^{172}Er , ^{174}Yb , ^{176}Hf (τον οποίον εξετάσαμε ήδη, ^{178}W και ^{180}Os . Και στους πέντε πυρήνες η πειραματική εμφάνιση του συγκεκριμένου ισομερούς προέρχεται από τις δύο νετρονιακές καταστάσεις $\nu 5/2^-$ [512]

$\nu 7/2^-$ [514]. Από τη στιγμή τώρα που ο αριθμός των νετρονίων παραμένει σταθερός, η σχετική θέση των καταστάσεων ως προς την επιφάνεια Fermi μένει επίσης σταθερή για τους διάφορους πυρήνες.

Αυτό γίνεται εμφανές στα μονοσωματιδικά φάσματα των νετρονίων που απεικονίζονται στο Σχ. 5.17. Συγκεκριμένα, βλέπουμε στην παρούσα περίπτωση την αντίστροφη εικόνα από αυτήν των ισοτόπων του Hf. Δηλαδή για όλους τους ισότονους, η ενέργεια Fermi για τα νετρόνια βρίσκεται στην ίδια θέση, κάτω από την τροχιά $\nu 5/2^-$ [512], καθώς το συνολικό φάσμα μετατοπίζεται σε χαμηλότερες ενέργειες με την αύξηση των πρωτονίων. Αντιστρόφως, η θέση της επιφάνειας Fermi των πρωτονίων, μετατοπίζεται σταδιακά σε υψηλότερη θέση σχετικά με τη δομή των υπόλοιπων μονοσωματιδικών τροχιών. Πιο ειδικά, οι καταστάσεις $\nu 5/2^-$ [512] και $\nu 7/2^-$ [514] στις οποίες εφαρμόζεται το φαινόμενο του μπλοκαρίσματος, είναι οι πιο κοντινές στην ενέργεια Fermi στους δύο πρώτους πυρήνες, έχοντας με βάση την σχέση (5.18) τις χαμηλότερες ημισωματιδικές ενέργειες. Ενώ στους υπόλοιπους πυρήνες παραμένουν αρκετά κοντά με την νετρονιακή τροχιά $\nu 7/2 + [633]$ να παρεμβάλλεται ενδιάμεσα στην $\nu 7/2^-$ [514] και την ενέργεια Fermi. Συνεπώς, αναμένουμε έναν ακριβέστερο υπολογισμό της ενέργειας του 6^+ σε σχέση με τα ισότοπα του Hf.

Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία υπολογίσαμε την ενέργεια του 6^+ ισομερούς, με τα τα συναρτησοειδή DD-ME2 και DD-PC1, με τη δύναμη ζευγαρώματος προσαρμοσμένη να αναπαράγει και εδώ τα χάσματα D^3 (Εξ.(5.19)) και D^5 (Εξ. (5.20)). Η θεωρητική πρόβλεψη της ενέργειας διέγερσης, δίνεται στον πίνακα 5.4, όπου στην τελευταία στήλη καταγράφονται οι πειραματικές τιμές από την ανασκόπηση [212]. Παράλληλα και σε αντιστοιχία με το Σχ. 5.16, παρουσιάζεται στο διάγραμμα του Σχ 5.18 η εξέλιξη της ενέργειας του ισομερούς 6^+ για αυτήν την ακολουθία των ισότονων πυρήνων, σε σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα.

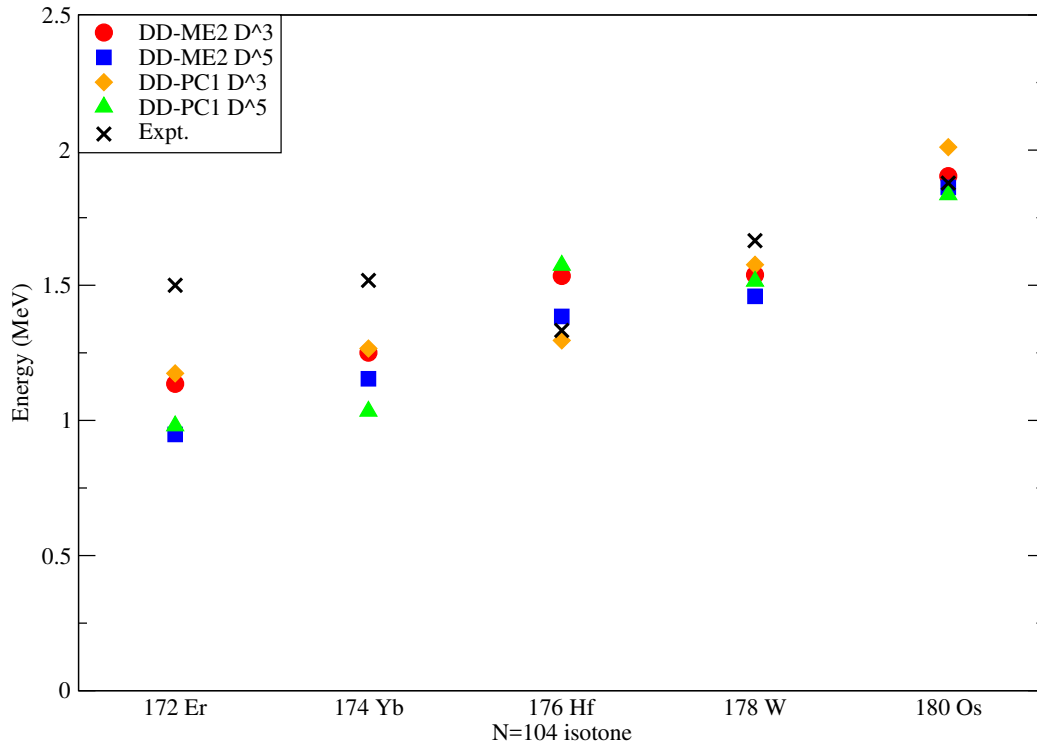
Καθώς αυξάνεται ο αριθμός των πρωτονίων η θεωρητική πρόβλεψη της ενέργειας διέγερσης αυξάνεται βαθμιαία και σταθερά από το ~ 1 MeV στα 2 MeV. Επίσης, τα αποτελέσματα ανάμεσα στις δύο διαφορετικές δυνάμεις και στην διαφορετική ισχύ του ζευγαρώματος, παρουσιάζουν και εδώ παρόμοια συμπεριφορά, δείχνοντας μία ανεξαρτησία των αποτελεσμάτων από το εκάστοτε συναρτησοειδές. Συγκριτικά με τις πειραματικές τιμές, βλέπουμε ότι η ποσοτική ακρίβεια της περιγραφής της εμφάνισης του 6^+ είναι πολύ καλύτερη, συγκριτικά με την προηγούμενη ακολουθία πυρήνων. Πιο συγκεκριμένα, η μεγαλύτερη διαφορά ανάμεσα στη θεωρητική πρόβλεψη και την πειραματική τιμή, βρίσκεται στον πυρήνα ^{172}Er , όπου είναι της τάξης του ~ 0.5 MeV, ενώ στον πυρήνα ^{174}Yb είναι ελαφρώς μικρότερη στα 250 keV. Στους υπόλοιπους τρεις πυρήνες οι θεωρητικές ενέργειες βρίσκονται σε αρκετά καλή συμφωνία με το πείραμα, με τις μεταξύ τους αποκλίσεις να είναι της τάξης των 100 keV.



Σχήμα 5.17: Ίδιο με τα Σχ. 5.14 και 5.15 αλλά για τους ισότονους με $N = 104$.

Πίνακας 5.5: Η ενέργεια διέγερσης σε (MeV) του K -ισομερούς 6^+ στους ισότονους με $N = 104$. Τα αποτελέσματα δίνονται όπως στον πίνακα 5.3.

	DD-ME2		DD-PC1		Expt.
	D^3	D^5	D^3	D^5	
172 Er	1.135	0.948	1.174	0.980	1.500
174 Yb	1.251	1.154	1.266	1.034	1.518
176 Hf	1.534	1.385	1.296	1.574	1.333
178 W	1.539	1.459	1.576	1.515	1.665
180 Os	1.904	1.862	2.011	1.835	1.878



Σχήμα 5.18: Απεικόνιση της εξέλιξης της ενέργειας του ισομερούς 6^+ για τους $N = 104$ ισότονους με βάση τα συναρτησοειδή DD-ME2 και DD-PC1.

5.5.4 Οι 8^- K -ισομερείς στους $N = 106$ ισότονους πυρήνες

Συνεχίζοντας την εφαρμογή της σχετικιστικής θεωρίας μέσου-πεδίου για τον υπολογισμό των ενεργειών διέγερσης K -ισομερών στην περιοχή μαζών $A \approx 160 - 190$, υπολογίσαμε την ενέργεια του ισομερούς 8^- , ο οποίος εμφανίζεται συστηματικά στους $N = 106$ ισότονους πυρήνες.

$N = 106$ ισότονου

Στην εισαγωγή αυτής της ενότητας παρουσιάσαμε στο Σχ. 5.3 τη συστηματική απεικόνιση της πειραματικής εμφάνισης του 8^- ισομερούς στους $N = 106$ ισότονους. Όπως σημειώθηκε το διάγραμμα του συγκεκριμένου σχήματος προέρχεται από την εργασία [238], στην οποία αναφερθήκαμε ήδη για τα αποτελέσματα του 6^+ ισομερούς στους $N = 102$ ισότονους πυρήνες. Όπως αναφέραμε στην εισαγωγή, οι $N = 106$ πυρήνες στους οποίους εμφανίζεται ο 8^- ισομερής, είναι αρχικά καλά παραμορφωμένοι με αξονική συμμετρία, από τον ^{174}Er μέχρι τον ^{182}Os . Στη συνέχεια, έχουμε τον μεταβατικό πυρήνα ^{184}Pt και τους δύο πυρήνες ^{186}Hg και ^{188}Pb που παρουσιάζουν συνύπαρξη prolate-oblate σχήματος. Στη συγκεκριμένη ανάλυση, σημειώνεται ότι οι δύο ημισωματιδιακές καταστάσεις που οδηγούν στην δημιουργία του 8^- , προέρχονται από το φάσμα των νετρονίων και είναι ο συνδυασμός: $\nu^2 7/2^- [514] \otimes 9/2^+ [624]$.

Στα διαγράμματα των Σχ. 5.19 και 5.20, παρουσιάζουμε το ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών καταστάσεων για τα νετρόνια και τα πρωτόνια αντίστοιχα, γύρω από την επιφάνεια Fermi, για τη βασική κατάσταση των $N = 106$ ισότονων που εμφανίζεται ο ισομερής 8^- , όπως προκύπτουν από τους υπολογισμούς με βάση το σχετικιστικό μέσο-πεδίο. Από τη στιγμή που εξετάζουμε μία σειρά ισότονων πυρήνων ισχύουν και εδώ τα συμπεράσματα από την περιγραφή των φασμάτων στο Σχ. 5.17. Σχετικά με τις νετρονιακές καταστάσεις που δημιουργούν τον ισομερή, βλέπουμε στο Σχ. 5.19, αρχικά για την $\nu 9/2^+ [624]$, ότι στο σύνολο των πυρήνων παραμένει σταθερά στην ίδια θέση ως προς την επιφάνεια Fermi, υφιστάμενη ως η πρώτη από τις κενές τροχιές του φάσματος. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η μετατόπιση της σχετικής θέσης της $\nu 7/2^- [514]$ τροχιάς. Στον πρώτο πυρήνα ^{174}Er , είναι η προτελευταία από τις κατειλημμένες τροχιές, με την $\nu 5/2^- [512]$ να βρίσκεται πάνω από αυτήν στο φάσμα. Ακολούθως, για τους υπόλοιπους αξονικά παραμορφωμένους πυρήνες, δηλαδή από τον ^{176}Yb μέχρι τον ^{182}Os , μετατοπίζεται όλο και πιο χαμηλά απομακρυνόμενη από την ενέργεια Fermi, με την τροχιά $\nu 7/2^+ [633]$ να είναι και αυτή σε υψηλότερη θέση στην κατανομή του φάσματος. Στους τελευταίους τρεις μεταβατικούς πυρήνες, βρίσκεται ακόμα πιο χαμηλά με τρεις καταστάσεις πλέον, τις δυο που αναφέραμε και την $\nu 1/2^- [521]$ να είναι πάνω από αυτήν και πλησιέστερα στην ενέργεια Fermi.

Με βάση την εικόνα που περιγράψαμε, έχει μεγάλο ενδιαφέρον να δούμε

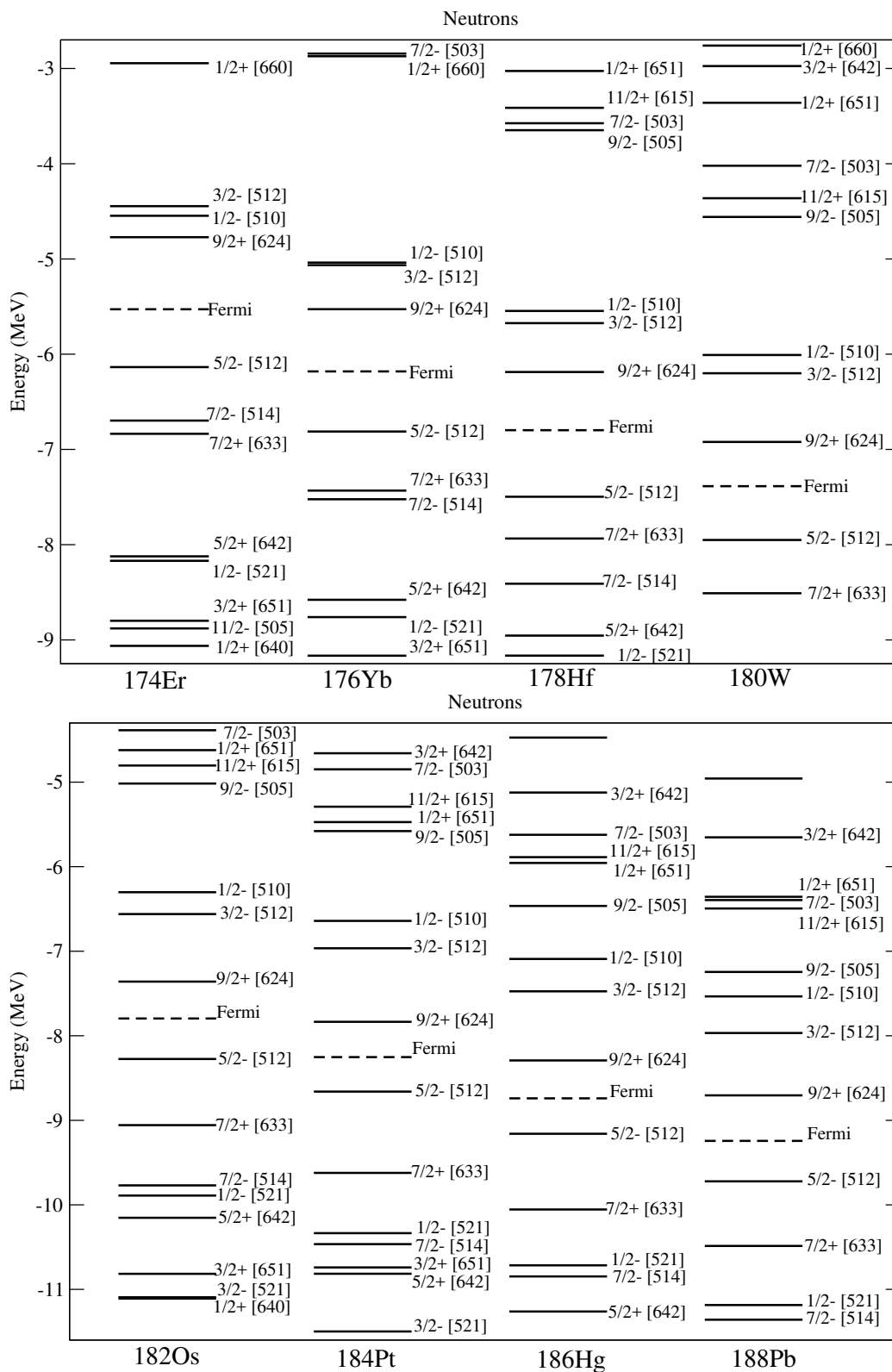
την αποτύπωση της συγκεκριμένης δομής κατά την εφαρμογή της θεωρητικής προσέγγισης υπολογισμούς του 8^- ισομερούς στο σχετικιστικό πλαίσιο Hartree-Bogoliubov. Ακολουθώντας τη γνωστή πλέον διαδικασία, δίνονται στον πίνακα 5.6, τα τελικά αποτελέσματα των υπολογισμών μαζί με τα πειραματικά δεδομένα από την εργασία [238]. Ταυτόχρονα, θέλοντας να εξετάσουμε την επίδραση της προαναφερθείσας μονοσωματιδιακής δομής, παρουσιάζουμε στο Σχ. 5.21 στο πάνω μέρος το συνηθισμένο διάγραμμα της εξέλιξης της ενέργειας του ισομερούς καθώς μεταβαίνουμε από τον ένα πυρήνα στον επόμενο και στο κάτω μέρος το φάσμα των ημισωματιδιακών καταστάσεων των νετρονίων, μετά την εφαρμογή του φαινομένου του μπλοκαρίσματος στην προσέγγιση της ίσης πλήρωσης. Με έντονα πλάγια σύμβολα αναγράφονται για κάθε πυρήνα οι κβαντικοί αριθμοί Nilsson των καταστάσεων που δημιουργούν τον 8^- ισομερή.

Αρχικά, παρατηρούμε ότι και σε αυτήν την περίπτωση τα αριθμητικά αποτελέσματα είναι ουσιαστικά ανεξάρτητα από την επιλογή του συναρτησοειδούς και της προσαρμογής της δύναμης ζευγαρώματος, αφού και για το DD-ME2 αλλά και το DD-PC1, τα σημεία που αντιστοιχούν στις διαφορετικές προσεγγίσεις βρίσκονται στο ίδιο ενεργειακό ύψος, με πολύ μικρές σχετικές διαφορές, μικρότερες από 0.3 MeV. Οι διαφορές αυτές είναι πολύ μικρότερες σε μέγεθος από την απόκλιση της θεωρητικής τιμής του 8^- από την πειραματική ενέργεια, στη συγκεκριμένη σειρά πυρήνων όπου είναι κοντά στο 1 MeV, σταθερά για το σύνολο των ισότονων.

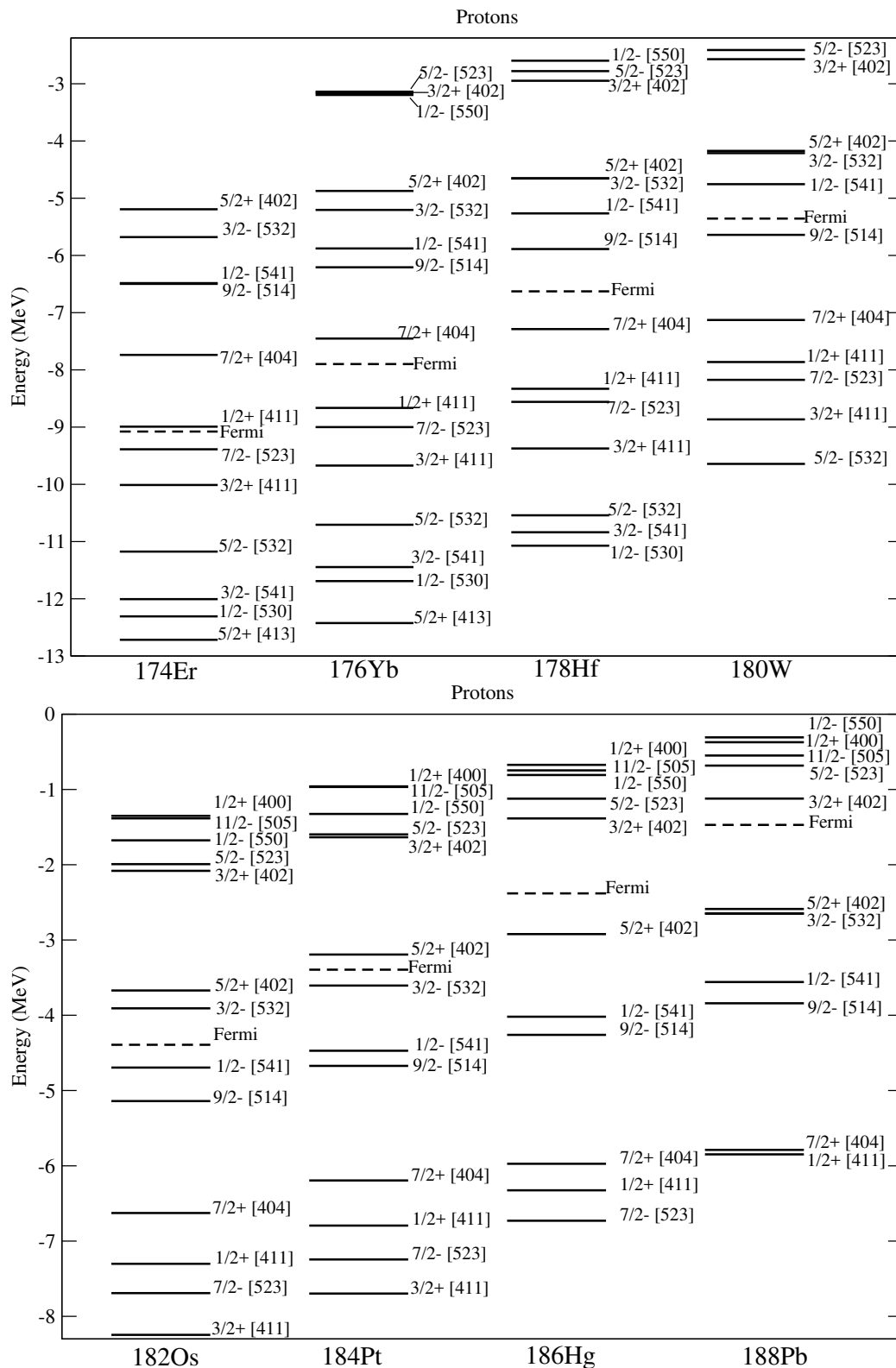
Πίνακας 5.6: Η ενέργεια διέγερσης σε (MeV) του K -ισομερούς 8^- στους ισότονους με $N = 106$. Τα αποτελέσματα δίνονται όπως στον πίνακα 5.3.

	DD-ME2		DD-PC1		Expt.[238]
	D^3	D^5	D^3	D^5	
174 Er	2.174	2.079	2.232	2.082	1.112
176 Yb	2.037	1.884	2.003	1.946	1.050
178 Hf	2.418	2.418	2.373	2.342	1.147
180 W	2.694	2.595	2.645	2.535	1.529
182 Os	2.894	2.871	2.887	2.818	1.831
184 Pt	3.052	3.071	2.971	2.972	1.839
186 Hg	3.595	3.505	3.665	3.518	2.217
188 Pb	3.525	3.459	3.675	3.584	2.578

Παρά την έλλειψη αριθμητικής ακρίβειας, είναι αξιοσημείωτη η ακριβής ανα-



Σχήμα 5.19: Ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών καταστάσεων για τα νετρόνια κοντά στην επιφάνεια Fermi για τους $N = 106$ ισότονους.



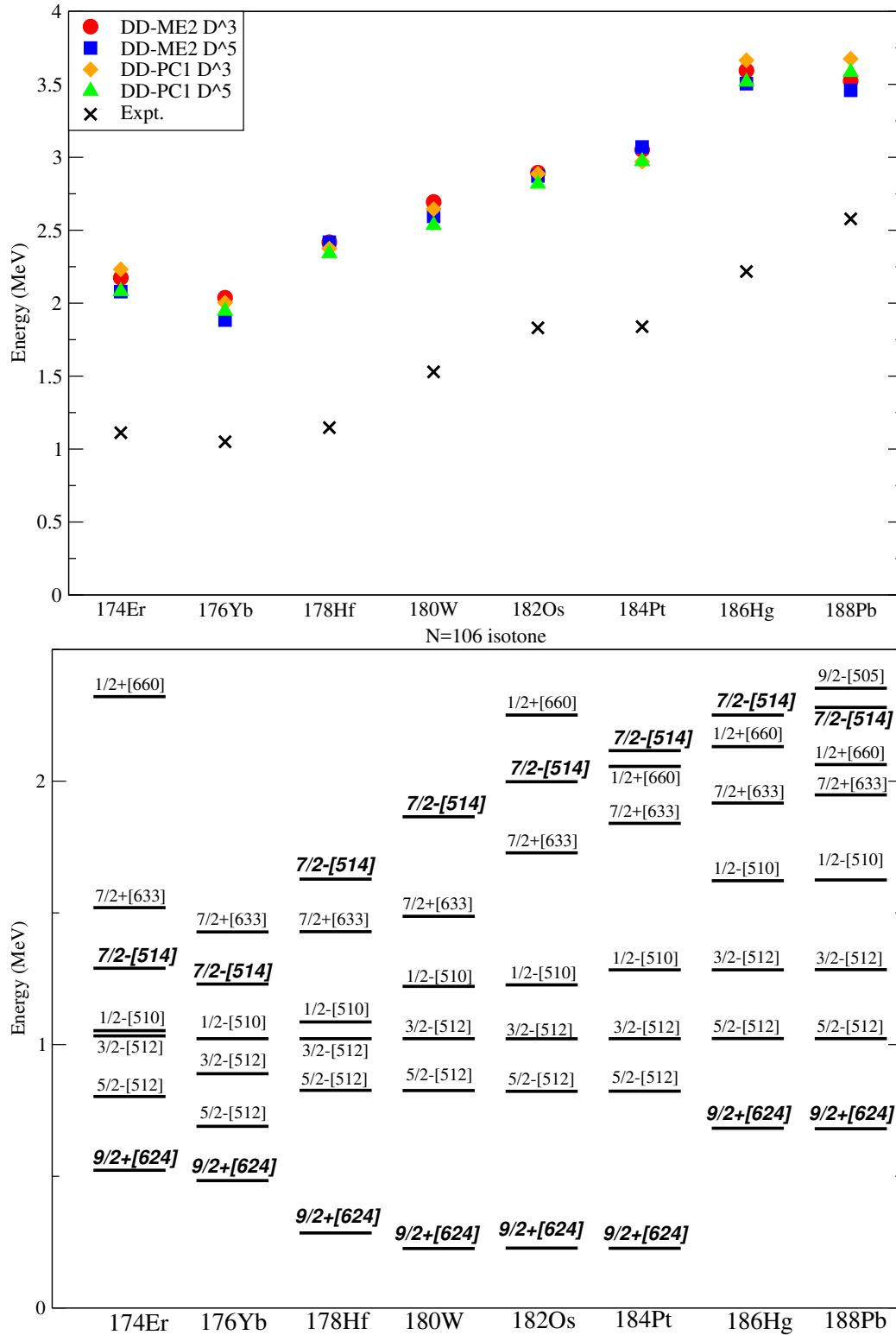
Σχήμα 5.20: Ίδιο με το Σχ. 5.19 αλλά για τα πρωτόνια.

παραγωγή της εξέλιξης της πειραματικής τιμής της ενέργειας από τα θεωρητικά σημεία, όπως φαίνεται στο πάνω διάγραμμα του Σχ. 5.21. Συγκεκριμένα, έχουμε μία μη ομαλή κατανομή των σημείων η οποία όμως ποιοτικά είναι ίδια ανάμεσα στα θεωρητικά και πειραματικά δεδομένα, με τα πρώτα να βρίσκονται μετατοπισμένα κατά περίπου 1 MeV ψηλότερα σε ενέργεια. Παραθέτοντας λοιπόν, μία διαφορετική οπτική πλευρά για την ερμηνεία των αποτελεσμάτων, παρατηρούμε στο φάσμα των ημισωματιδίων το εξής χαρακτηριστικό φαινόμενο. Η ιδιαίτερη μεταβολή της τροχιάς $\nu 7/2^-$ [514] που παρατηρήσαμε στο μονοσωματιδιακό φάσμα σε σχέση και με τη σταθερή θέση της $\nu 9/2^+$ [624], αποτυπώνεται μετά την εφαρμογή του μπλοκαρίσματος στην μετατόπιση της πρώτης, σε πιο υψηλές θέσεις με όλο και περισσότερες ημισωματιδιακές καταστάσεις να παρεμβάλλονται ανάμεσα τους. Η συγκεκριμένη μετατόπιση, όπως φαίνεται ξεκάθαρα, ταυτίζεται σε μεγάλο βαθμό με την εξέλιξη της ενέργειας του ισομερούς, ακολουθώντας μία ανάλογη πορεία από τον έναν πυρήνα στον άλλον. Συνυπολογίζοντας το γεγονός ότι σε πρώτη προσέγγιση η ενέργεια διέγερσης δίνεται από το άθροισμα των ημισωματιδιακών ενεργειών, και από τη στιγμή που η κατάσταση $\nu 9/2^+$ [624] παραμένει σχετικά στην ίδια θέση, έχουμε τελικά στη χαρακτηριστική μη ομαλή εξέλιξη της ενέργειας του 8^- ισομερούς στους $N = 106$ πυρήνες.

5.6 Υπερβαρείς παραμορφωμένοι πυρήνες με $A \approx 250$

Στην τελευταία ενότητα του κεφαλαίου σχετικά με τους K -ισομερείς, θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα της εφαρμογής της μεθόδου που αναλύσαμε προηγουμένως στην περιοχή των υπερβαρέων πυρήνων Fm, No, Rf και Sg, με μαζικό αριθμό $A \approx 250$. Συγκριτικά με ελαφρύτερες περιοχές του πυρηνικού χάρτη, η πειραματική μελέτη πυρήνων που είναι βαρύτεροι από το Ουράνιο είναι αρκετά πιο δύσκολη. Αυτό οφείλεται σε διάφορα φαινόμενα, το πιο βασικό είναι η μικρή πιθανότητα ύπαρξης του συνδυασμού κατάλληλων ακτίνων και στόχων για την ακριβή φασματοσκοπική μελέτη συγκεκριμένων πυρήνων. Όπως αναφέρεται και στα [211, 212] Αυτό συνεπάγεται την έλλειψη συστηματικών πειραματικών δεδομένων που αφορούν και στον καθορισμό διεγερμένων καταστάσεων που οφείλονται στη διατήρηση του K . Παρόλες τις δυσκολίες, έχουν παρατηρηθεί πειραματικά αρκετοί K -ισομερείς στη συγκεκριμένη περιοχή, με πρώτους τους πυρήνες ^{250}Fm και ^{254}No από τους Ghiorso κ.α. [239].

Η ταυτοποίηση και ο καθορισμός των χαρακτηριστικών ισομερών σε αυτήν την περιοχή πυρήνων παρουσιάζει τεράστιο ενδιαφέρον. Ιδιαίτερα σε μοντέλα του πυρηνικού μέσου-πεδίουμπορούν να χρησιμοποιηθούν για την προσαρμογή παραμέτρων βελτιώνοντας τις προβλέψεις, σε μία περιοχή όπου μικρά φαινόμενα



Σχήμα 5.21: Πάνω μέρος: Απεικόνιση της εξέλιξης της ενέργειας του ισομερούς 8^- για τους $N = 106$ ισότονους. Κάτω μέρος: Ενεργειακό φάσμα των ημισωματιδίων μετά το μπλοκάρισμα των $\nu 7/2^- [514]$ $\nu 9/2^+ [624]$ καταστάσεων.

φλοιών παίζουν σημαντικό ρόλο. Διαφορετικές θεωρίες μέσου-πεδίουδίνουν πολύ διαφορετικές κατανομές εσωτερικών μονοσωματιδιακών καταστάσεων κοντά στις επιφάνειες Fermi, τόσο για τα νετρόνια όσο για τα πρωτόνια. Συνεπώς, η εξέταση των θεωρητικών προβλέψεων σε συνδυασμό με μελλοντικά πειραματικά δεδομένα μπορεί να επιτρέψει στην περαιτέρω αξιολόγηση των διάφορων μοντέλων μέσου πεδίου.

Σε αυτό το πλαίσιο μπορεί να εφαρμοστεί με παρόμοιο τρόπο με την προηγούμενη ανάλυση, η μελέτη των K -ισομερών, με βάση τα συναλλοίωτα συναρτησοειδή πυκνότητας. Όπως αναφέρθηκε, έχει ήδη υπάρξει μία εμπεριστατωμένη εργασία από τους Prassa κ.α.[203], με τη χρήση του συναρτησοειδούς DD-PC1, όπου μελετήθηκε η ύπαρξη K -ισομερών στους πυρήνες κοντά στο $N = 162$ και συγκεκριμένα για τα ισότοπα των Rf, Sg, Hs, και Ds.

Έτσι, επεκτείνοντας τη συγκεκριμένη έρευνα στη βάση της προσέγγισης ίσης πλήρωσης, η οποία εφαρμόστηκε στην παρούσα διερεύνηση, υπολογίσαμε τις ενέργειες των σχηματισμών από το μπλοκάρισμα των καταστάσεων με τις χαμηλότερες ημισωματιδιακές ενέργειες στη βασική κατάσταση των πέντε πρώτων ισότοπων των πυρήνων Fm, No, Rf, Sg. Οι προβλεπόμενοι K -ισομερείς μαζί με τις ενέργειες διέγερσης και τους αντίστοιχους κβαντικούς αριθμούς παρουσιάζονται συνολικά στον πίνακα 5.7. Για τους συγκεκριμένους υπολογισμούς χρησιμοποιήθηκε μόνο το συναρτησοειδές DD-ME2, ενώ η δύναμη ζεύγους προσαρμόστηκε στην τιμή της Εξ. 5.20.

Πίνακας 5.7: Θεωρητική πρόβλεψη της ενέργειας των χαμηλότερων 2 ημισωματιδιακών K -ισομερών στους πυρήνες Fm, No, Rf και Sg.

Νετρόνια		Πρωτόνια				
Πυρήνας	Σχηματισμός	K^π	E (MeV)	Σχηματισμός	K^π	E (MeV)
Fm						
248Fm	5/2 ⁺ [622]7/2 ⁻ [743]	6 ⁻	1.49	3/2 ⁻ [521]7/2 ⁻ [514]	5 ⁺	1.66
	5/2 ⁺ [622]1/2 ⁺ [631]	3 ⁺	1.63	3/2 ⁻ [521]7/2 ⁺ [633]	5 ⁻	1.60
250Fm	5/2 ⁺ [622]9/2 ⁻ [734]	7 ⁻	0.89	7/2 ⁺ [633]7/2 ⁻ [514]	7 ⁻	1.71
	5/2 ⁺ [622]9/2 ⁺ [615]	7 ⁺	1.51	3/2 ⁻ [521]7/2 ⁺ [633]	5 ⁻	1.72
252Fm	5/2 ⁺ [622] + 9/2 ⁺ [615]	7 ⁺	1.58	7/2 ⁺ [633]7/2 ⁻ [514]	7 ⁻	1.76
	9/2 ⁻ [734]9/2 ⁺ [615]	9 ⁻	1.14	3/2 ⁻ [521]7/2 ⁺ [633]	5 ⁻	1.79

Πίνακας 5.7 συνέχεια

Πυρήνας	Νετρόνια		Πρωτόνια			
	Σχηματισμός	K^π	E (MeV)	Σχηματισμός	K^π	E (MeV)
254Fm	$3/2^+[622]9/2^+[615]$	6^+	1.21	$7/2^+[633]7/2^- [514]$	7^-	1.76
	$1/2^+[620]9/2^+[615]$	5^+	1.32	$3/2^- [521]7/2^+[633]$	5^-	1.78
256Fm	$1/2^+[620]3/2^+[622]$	4^+	1.17	$7/2^+[633]7/2^- [514]$	7^-	2.05
	$1/2^+[620]9/2^+[615]$	5^+	1.49	$3/2^- [521]7/2^+[633]$	5^-	2.11
No						
248No	$1/2^+[631]7/2^- [743]$	4^-	1.71	$1/2^- [521]3/2^- [521]$	2^+	1.98
	$7/2^+[624]7/2^- [743]$	7^-	2.00	$1/2^- [521]7/2^+[633]$	4^-	2.10
250No	$5/2^+[622]7/2^- [743]$	6^-	1.54	$1/2^- [521]3/2^- [521]$	2^+	1.38
	$5/2^+[622]9/2^- [734]$	7^-	2.46	$1/2^- [521]7/2^+[633]$	4^-	1.54
252No	$5/2^+[622]9/2^- [734]$	7^-	1.42	$1/2^- [521]3/2^- [521]$	2^+	1.38
	$9/2^+[615]9/2^- [734]$	9^-	1.83	$1/2^- [521]7/2^+[633]$	4^-	1.47
254No	$9/2^+[615]9/2^- [734]$	9^-	1.11	$1/2^- [521]3/2^- [521]$	2^+	1.41
	$5/2^+[622]9/2^- [734]$	7^-	1.98	$1/2^- [521]7/2^+[633]$	4^-	1.51
256No	$3/2^+[622]9/2^+[615]$	6^+	1.76	$1/2^- [521]7/2^+[633]$	4^-	1.5
	$9/2^+[615]9/2^- [734]$	9^-	1.8	$1/2^- [521]3/2^- [521]$	2^+	2.1
Rf						
250Rf	$1/2^+[631]7/2^- [743]$	4^-	1.27	$1/2^- [521]9/2^- [505]$	5^+	1.35
	$7/2^+[624]7/2^- [743]$	7^-	1.65	$1/2^- [521]9/2^+[624]$	5^-	1.46
252Rf	$5/2^+[622]7/2^- [743]$	6^-	1.59	$1/2^- [521]9/2^+[624]$	5^-	1.40
	$7/2^- [743]9/2^- [734]$	8^+	1.99	$1/2^- [521]9/2^- [505]$	5^+	1.48
254Rf	$5/2^+[622]9/2^- [734]$	7^-	0.87	$1/2^- [521]9/2^+[624]$	5^-	1.34
	$5/2^+[622]9/2^+[615]$	7^+	1.79	$1/2^- [521]9/2^- [505]$	5^+	1.74
256Rf	$9/2^+[615]9/2^- [734]$	9^-	1.94	$1/2^- [521]9/2^+[624]$	5^-	1.96
	$3/2^+[622]9/2^- [734]$	6^-	2.07			

Πίνακας 5.7 συνέχεια

Πυρήνας	Νετρόνια		Πρωτόνια			
	Σχηματισμός	K^π	E (MeV)	Σχηματισμός	K^π	E (MeV)
258Rf	$3/2^+[622]9/2^- [734]$	6^-	0.99	$1/2^- [521]9/2^+ [624]$	5^-	1.20
	$1/2^+[620]9/2^- [734]$	5^-	1.25	$1/2^- [521]9/2^- [505]$	5^+	2.03
Sg						
258Sg	$9/2^+[615]9/2^- [734]$	9^-	1.27	$9/2^- [505]9/2^+ [624]$	9^-	1.38
	$3/2^+[622]9/2^+ [615]$	6^+	1.57	$5/2^- [512]9/2^+ [624]$	7^-	1.78
260Sg	$3/2^+[622]9/2^+ [615]$	6^+	1.00	$n9/2^+ 11/2^- [651]$	10^-	1.82
	$1/2^+[620]9/2^+ [615]$	5^+	1.33	$9/2^- [505]9/2^+ [624]$	9^-	1.38
				$5/2^- [512]9/2^+ [624]$	7^-	1.7
262Sg	$1/2^+[620]3/2^+ [622]$	2^+	1.07	$5/2^- [512]9/2^+ [624]$	7^-	1.63
	$1/2^+[620]9/2^+ [615]$	5^+	1.36	$9/2^- [505]9/2^+ [624]$	9^-	1.80
	$3/2^+[622]9/2^+ [615]$	6^+	1.56			
264Sg	$1/2^+[620]11/2^- [725]$	6^-	1.00	$5/2^- [512]9/2^+ [624]$	7^-	1.63
	$3/2^+[622]11/2^- [725]$	7^-	1.29	$9/2^- [505]9/2^+ [624]$	9^-	1.80
	$9/2^+[615]11/2^- [725]$	10^-	1.58			
266Sg	$7/2^+[613]11/2^- [725]$	9^-	1.04	$5/2^- [512]9/2^+ [624]$	7^-	1.66
	$1/2^+[620]11/2^- [725]$	6^-	2.00	$9/2^- [505]9/2^+ [624]$	9^-	2.07

5.7 Σύνοψη και συμπεράσματα

Στο τελευταίο κεφάλαιο της διδακτορικής διατριβής μελετήθηκε το φαινόμενο της δημιουργίας K -ισομερών καταστάσεων, σε βαρείς και υπερβαρείς πυρήνες με αξονικά παραμορφωμένο σχήμα prolate τύπου. Οι K -ισομερείς αποτελούν μετασταθείς διεγερμένες καταστάσεις, οι οποίες οφείλουν την σχετικά μεγάλη διάρκεια ημιζωής στη διατήρηση της μεγάλης τιμής του Ω , δηλαδή της προβολής της ολικής στροφορμής στον άξονα συμμετρίας. Για τη θεωρητική μελέτη επεκτείναμε το γενικευμένο πλαίσιο της σχετικιστικής προσέγγισης Hartree-Bogoliubov, συμπεριλαμβάνοντας το φαινόμενο του μπλοκαρίσματος για την κατασκευή δύο

ημισωματιδιακών καταστάσεων στο πλαίσιο της προσέγγισης ίσης πλήρωσης. Με αυτόν τον τρόπο, πραγματοποιήθηκε για πρώτη φορά η σύγκριση θεωρητικών υπολογισμών των ενεργειών K -ισομερών, από μία αυτοσυνεπή θεωρία μέσου-πεδίου με αντίστοιχα γνωστά και ακριβή πειραματικά δεδομένα σε πυρήνες μεσαίου βάρους με $A \approx 160 - 190$.

Το αρχικό συμπέρασμα από την αξιολόγηση της συγκεκριμένης θεωρητικής μεθόδου, είναι ότι παρέχει τη δυνατότητα ερμηνείας των ποιοτικών χαρακτηριστικών της συστηματικής εμφάνισης συγκεκριμένων ισομερών στις σειρές πυρήνων που εξετάστηκαν. Η εξέταση της αντίστοιχης υποκείμενης μονοσωματιδιακής δομής κατέδειξε ότι σημαντικό ρόλο για τον ακριβή υπολογισμό της ενέργειας του ισομερούς έχουν τα εξής:

1. Η σχετική θέση των ημισωματιδιακών καταστάσεων από τους οποίους δημιουργείται ο K -ισομερής, ως προς την αντίστοιχη επιφάνεια Fermi.
2. Η ύπαρξη ενδιάμεσων καταστάσεων με χαμηλότερη ημισωματιδιακή ενέργεια.
3. Το απόλυτο μέγεθος της ημισωματιδιακής ενέργειας.

Όπως φάνηκε, η καλύτερη περιγραφή των πειραματικών δεδομένων υπάρχει στις περιπτώσεις των πυρήνων, όπου οι δύο ημισωματιδιακές καταστάσεις που σχηματίζουν το ισομερές, είναι οι πλησιέστερες στην ενέργεια Fermi. Στους υπόλοιπους πυρήνες υπάρχει σημαντική διαφορά ανάμεσα στη θεωρητική πρόβλεψη και την πειραματική τιμή. Ενδεχομένως, να είναι ενδεικτικό της γενικότερης πρόβλεψης σχετικά μεγάλων χασμάτων ανάμεσα στους νετρονιακούς και πρωτονιακούς φλοιούς, όπως αυτοί προκύπτουν στο πλαίσιο της σχετικιστικής θεωρίας μέσου-πεδίου. Γεγονός που συνεπάγεται την ανάγκη εισαγωγής επιπρόσθετων συσχετίσεων για την ακριβέστερη ποσοτική περιγραφή του φαινομένου. Μία τέτοια περίπτωση μπορεί να είναι η σύζευξη ημισωματιδίου-δονήσεων. Στην ενότητα 3.2 όπου αναλύθηκε η συγκεκριμένη σύζευξη πέρα από το στατικό πλαίσιο του μέσου-πεδίου, είδαμε ότι έχει ως αποτέλεσμα την μετατόπιση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων και την δημιουργία πιο πυκνού φάσματος κοντά στην περιοχή της επιφάνειας Fermi. Αποτέλεσμα που παρατηρήθηκε και στην εισαγωγή των συγκεκριμένων συσχετίσεων για τη μελέτη της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στην ενότητα 4.4.3. Με βάση την ουσιαστική επιρροή της δομής των καταστάσεων στον υπολογισμό της ενέργειας των K -ισομερών, αναμένεται η συγκεκριμένη σύζευξη να έχει σημαντική επίδραση στα θεωρητικά αποτελέσματα. Δυστυχώς, μέχρι στιγμής, η σύζευξη σωματιδίου-δόνησης έχει εφαρμοστεί μόνο στην περίπτωση πυρήνων με σφαιρική συμμετρία.

Φυσικά, είναι σημαντικό να αναφερθεί ξανά ότι η θεωρητική προσέγγιση που ακολουθήσαμε, διατηρεί την συμμετρία χρονικής αναστροφής η οποία κανονικά

αίρεται από τη διαδικασία του μπλοκαρίσματος. Στην πραγματικότητα τα ασύζευκτα νουκλεόνια που δημιουργούν την ισομερή κατάσταση, επιδρούν στο πυρηνικό πεδίο. Η συγκεκριμένη αλληλεπίδραση δεν έχει συμπεριληφθεί στον υπολογισμό των ενεργειών όπως παρουσιάστηκαν στις προηγούμενες ενότητες. Μία πρόταση είναι να χρησιμοποιηθεί η θεωρία διαταραχών για την προσομοίωση αυτών των συσχετίσεων. Αυτό μπορεί να είναι το αντικείμενο μελλοντικών ερευνητικών προσπαθειών, για την καλύτερη κατανόηση του φαινομένου των K -ισομερών στο πλαίσιο των συναλλοίωτων συναρτησοειδών πυκνότητας.

Βιβλιογραφία

1. Hohenberg, P. & Kohn, W. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* **136**, B864–B871 (3B 1964).
2. Kohn, W. & Sham, L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.* **140**, A1133–A1138 (4A 1965).
3. Kohn, W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253–1266 (5 1999).
4. Perdew, J. P. & Kurth, S. στο *A Primer in Density Functional Theory* (επιμελητές Fiolhais, C., Nogueira, F. & Marques, M. A. L.) 1–55 (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2003). ISBN: 978-3-540-37072-7. doi:10.1007/3-540-37072-2_1. http://dx.doi.org/10.1007/3-540-37072-2_1.
5. Rajagopal, A. K. Inhomogeneous relativistic electron gas. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **11**, L943 (1978).
6. MacDonald, A. H. & Vosko, S. H. A relativistic density functional formalism. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **12**, 2977 (1979).
7. Vautherin, D. & Brink, D. M. Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei. *Phys. Rev. C* **5**, 626–647 (3 1972).
8. Vautherin, D. Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. II. Axially Deformed Nuclei. *Phys. Rev. C* **7**, 296–316 (1 1973).
9. Bender, M., Heenen, P.-H. & Reinhard, P.-G. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.* **75**, 121–180 (1 2003).
10. Haxel, O., Jensen, J. H. D. & Suess, H. E. On the "Magic Numbers" in Nuclear Structure. *Phys. Rev.* **75**, 1766–1766 (11 1949).
11. Mayer, M. G. On Closed Shells in Nuclei. II. *Phys. Rev.* **75**, 1969–1970 (12 1949).
12. Brueckner, K. A., Levinson, C. A. & Mahmoud, H. M. Two-Body Forces and Nuclear Saturation. I. Central Forces. *Phys. Rev.* **95**, 217–228 (1 1954).

13. Skyrme, T. The effective nuclear potential. *Nuclear Physics* **9**, 615–634. ISSN: 0029-5582 (1958).
14. Köhler, H. S. Theory of Finite Nuclei. *Phys. Rev.* **137**, B1145–B1157 (5B 1965).
15. Müther, H., Faessler, A. & Goeke, K. Rearrangement in the Brueckner-Hartree-Fock approach. *Nuclear Physics A* **215**, 213–220. ISSN: 0375-9474 (1973).
16. Lenske, H. & Fuchs, C. Rearrangement in the density dependent relativistic field theory of nuclei. *Physics Letters B* **345**, 355–360. ISSN: 0370-2693 (1995).
17. Ring, P. & Schuck, P. *The Nuclear Many-Body Problem* ISBN: 978-3-540-21206-5. <http://www.springer.com/gp/book/9783540212065> (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1980).
18. Bardeen, J., Cooper, L. N. & Schrieffer, J. R. Theory of Superconductivity. *Phys. Rev.* **108**, 1175–1204 (5 1957).
19. Baranger, M. Self-Consistent Field Theory of Nuclear Shapes. *Phys. Rev.* **122**, 992–996 (3 1961).
20. Dechargé, J. & Gogny, D. Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the *D1* effective interaction on spherical nuclei. *Phys. Rev. C* **21**, 1568–1593 (4 1980).
21. Kucharek, H. & Ring, P. Relativistic field theory of superfluidity in nuclei. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **339**, 23–35. ISSN: 0939-7922 (1991).
22. Valatin, J. G. Generalized Hartree-Fock Method. *Phys. Rev.* **122**, 1012–1020 (4 1961).
23. Cohen, T. D., Furnstahl, R. J. & Griegel, D. K. From QCD sum rules to relativistic nuclear physics. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 961–964 (8 1991).
24. Furnstahl, R. J., Griegel, D. K. & Cohen, T. D. QCD sum rules for nucleons in nuclear matter. *Phys. Rev. C* **46**, 1507–1527 (4 1992).
25. Machleidt, R., Holinde, K. & Elster, C. The bonn meson-exchange model for the nucleon–nucleon interaction. *Physics Reports* **149**, 1–89. ISSN: 0370-1573 (1987).
26. Yukawa, H. On the interaction of elementary particles. *Proc. Phys. Math. Soc. Japan* (1935).
27. Erwin, A. R., March, R., Walker, W. D. & West, E. Evidence for a $\pi - \pi$ Resonance in the $I = 1, J = 1$ State. *Phys. Rev. Lett.* **6**, 628–630 (11 1961).

28. , Alvarez, L. W., Rosenfeld, A. H. & Stevenson, M. L. Evidence for a $T = 0$ Three-Pion Resonance. *Phys. Rev. Lett.* **7**, 178–182 (5 1961).
29. Bryan, R. A. & Scott, B. L. Nucleon-Nucleon Scattering from One-Boson-Exchange Potentials. *Phys. Rev.* **135**, B434–B450 (2B 1964).
30. Bryan, R. & Scott, B. L. Nucleon-Nucleon Scattering from One-Boson-Exchange Potentials. III. S Waves Included. *Phys. Rev.* **177**, 1435–1442 (4 1969).
31. Observation of a Resonancelike Structure in the $\pi^{+-}\psi'$ Mass Distribution in Exclusive $B \rightarrow K\pi^{+-}\psi'$ Decays. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 142001 (14 2008).
32. Observation of $J/\psi p$ Resonances Consistent with Pentaquark States in $\Xi_b^0 \rightarrow J/\psi K^- p$ Decays. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 072001 (7 2015).
33. Weinberg, S. Nuclear forces from chiral lagrangians. *Physics Letters B* **251**, 288–292. ISSN: 0370-2693 (1990).
34. Wiringa, R. B., Stoks, V. G. J. & Schiavilla, R. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking. *Phys. Rev. C* **51**, 38–51 (1 1995).
35. Machleidt, R. & Entem, D. R. Chiral effective field theory and nuclear forces. *Phys. Rept.* **503**, 1–75 (2011).
36. Aoki, S. Hadron interactions in lattice QCD. *Prog. Part. Nucl. Phys.* **66**, 687–726 (2011).
37. Machleidt, R. Nuclear forces and nuclear structure. *AIP Conf. Proc.* **381**, 3–17 (1999).
38. Brockmann, R. & Machleidt, R. Relativistic nuclear structure. I. Nuclear matter. *Phys. Rev. C* **42**, 1965–1980 (5 1990).
39. Coester, F., Cohen, S., Day, B. & Vincent, C. M. Variation in Nuclear-Matter Binding Energies with Phase-Shift-Equivalent Two-Body Potentials. *Phys. Rev. C* **1**, 769–776 (3 1970).
40. Fujita, J.-i. & Miyazawa, H. Pion Theory of Three-Body Forces. *Progress of Theoretical Physics* **17**, 360–365 (1957).
41. Zuo, W., Lejeune, A., Lombardo, U. & Mathiot, J. Interplay of three-body interactions in the EOS of nuclear matter. *Nuclear Physics A* **706**, 418–430. ISSN: 0375-9474 (2002).
42. Anastasio, M., Celenza, L., Pong, W. & Shakin, C. Relativistic nuclear structure physics. *Physics Reports* **100**, 327–392. ISSN: 0370-1573 (1983).

43. Brockmann, R. & Machleidt, R. Nuclear saturation in a relativistic Brueckner-Hartree-Fock approach. *Physics Letters B* **149**, 283–287. ISSN: 0370-2693 (1984).
44. Ter Haar, B. & Malfliet, R. Nucleons, mesons and deltas in nuclear matter a relativistic Dirac-Brueckner approach. *Physics Reports* **149**, 207–286. ISSN: 0370-1573 (1987).
45. Huber, H., Weber, F. & Weigel, M. K. Symmetric and asymmetric nuclear matter in the relativistic approach. *Phys. Rev. C* **51**, 1790–1799 (4 1995).
46. De Jong, F. & Lenske, H. Relativistic Brueckner-Hartree-Fock calculations with explicit intermediate negative energy states. *Phys. Rev. C* **58**, 890–899 (2 1998).
47. van Dalen, E. N. E., Fuchs, C., Fuchs, C & Fuchs, C. Dirac-Brueckner-Hartree-Fock calculations for isospin asymmetric nuclear matter based on improved approximation schemes. *Eur. Phys. J. A* **31**, 29–42 (2007).
48. Lalazissis, G. A., Konig, J. & Ring, P. A New parametrization for the Lagrangian density of relativistic mean field theory. *Phys. Rev.* **C55**, 540–543 (1997).
49. Zhao, P. W., Li, Z. P., Yao, J. M. & Meng, J. New parametrization for the nuclear covariant energy density functional with a point-coupling interaction. *Phys. Rev. C* **82**, 054319 (5 2010).
50. Lalazissis, G. A., Vretenar, D. & Ring, P. New relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon couplings. *Phys. Rev. C* **71**, 024312 (2 2005).
51. , Vretenar, D. & Ring, P. Relativistic nuclear energy density functionals: Adjusting parameters to binding energies. *Phys. Rev. C* **78**, 034318 (3 2008).
52. Otsuka, T., Suzuki, T., Fujimoto, R., Grawe, H. & Akaishi, Y. Evolution of Nuclear Shells due to the Tensor Force. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 232502 (23 2005).
53. Stancu, F., Brink, D. & Flocard, H. The tensor part of Skyrme's interaction. *Physics Letters B* **68**, 108–112. ISSN: 0370-2693 (1977).
54. Long, W., Sagawa, H., Giai, N. V. & Meng, J. Shell structure and ρ -tensor correlations in density dependent relativistic Hartree-Fock theory. *Phys. Rev. C* **76**, 034314 (3 2007).
55. Jiang, L. J., Yang, S., Dong, J. M. & Long, W. H. Self-consistent tensor effects on nuclear matter systems within a relativistic Hartree-Fock approach. *Phys. Rev. C* **91**, 025802 (2 2015).

56. Lalazissis, G. A., Karatzikos, S., Serra, M., Otsuka, T. & Ring, P. Covariant density functional theory: The Role of the pion. *Phys. Rev.* **C80**, 041301 (2009).
57. Fayans, S. A. Towards a universal nuclear density functional. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* **68**, 169–174. ISSN: 1090-6487 (1998).
58. FAYANS, S. A. & ZAWISCHA, D. LOCAL ENERGY-DENSITY FUNCTIONAL APPROACH TO MANY-BODY NUCLEAR SYSTEMS WITH S-WAVE PAIRING. *International Journal of Modern Physics B* **15**, 1684–1702 (2001).
59. Baldo, M., Schuck, P. & Viñas, X. Kohn–Sham density functional inspired approach to nuclear binding. *Physics Letters B* **663**, 390–394. ISSN: 0370-2693 (2008).
60. Roca-Maza, X., Viñas, X., Centelles, M., Ring, P. & Schuck, P. Relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon vertices based on microscopical calculations. *Phys. Rev. C* **84**, 054309 (5 2011).
61. Mayer, M. G. Nuclear Configurations in the Spin-Orbit Coupling Model. I. Empirical Evidence. *Phys. Rev.* **78**, 16–21 (1 1950).
62. Engel, J. Intrinsic-density functionals. *Phys. Rev. C* **75**, 014306 (1 2007).
63. Giraud, B. G. Density functionals in the laboratory frame. *Phys. Rev. C* **77**, 014311 (1 2008).
64. Nakatsukasa, T. Density functional approaches to collective phenomena in nuclei: Time-dependent density-functional theory for perturbative and non-perturbative nuclear dynamics. *PTEP* **2012**, 01A207 (2012).
65. Ring, P., Hayashi, A., Hara, K., Emling, H. & Grosse, E. Electromagnetic moments and transition rates from cranking model wavefunctions. *Physics Letters B* **110**, 423–427. ISSN: 0370-2693 (1982).
66. Nikšić, T., Vretenar, D. & Ring, P. Relativistic nuclear energy density functionals: Mean-field and beyond. *Progress in Particle and Nuclear Physics* **66**, 519–548. ISSN: 0146-6410 (2011).
67. Runge, E. & Gross, E. K. U. Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997–1000 (12 1984).
68. Marques, M. A. L. *Time-Dependent Density Functional Theory*. (2006).
69. Ring, P. κ.ά. The Time dependent relativistic mean field theory and the random phase approximation. *Nucl. Phys.* **A694**, 249–268 (2001).
70. Vretenar, D., Afanasjev, A., Lalazissis, G. & Ring, P. Relativistic Hartree–Bogoliubov theory: static and dynamic aspects of exotic nuclear structure. *Physics Reports* **409**, 101–259. ISSN: 0370-1573 (2005).

71. Walecka, J. A theory of highly condensed matter. *Annals of Physics* **83**, 491–529. ISSN: 0003-4916 (1974).
72. Serot, B. D. & Walecka, J. D. The Relativistic Nuclear Many Body Problem. *Adv. Nucl. Phys.* **16**, 1–327 (1986).
73. Chin, S. A. A relativistic many-body theory of high density matter. *Ann. Phys.* **108**, 301–367. ISSN: 0003-4916 (1977).
74. Furnstahl, R. J., Perry, R. J. & Serot, B. D. Two-loop corrections for nuclear matter in the Walecka model. *Phys. Rev. C* **40**, 321–353 (1 1989).
75. Zhu, Z., Mang, H. & Ring, P. Vacuum polarization in a relativistic description of open shell nuclei. *Physics Letters B* **254**, 325–331. ISSN: 0370-2693 (1991).
76. Boguta, J. & Bodmer, A. Relativistic calculation of nuclear matter and the nuclear surface. *Nuclear Physics A* **292**, 413–428. ISSN: 0375-9474 (1977).
77. Reinhard, P. G., Rufa, M., Maruhn, J., Greiner, W. & Friedrich, J. Nuclear ground-state properties in a relativistic Meson-Field theory. *Zeitschrift für Physik A Atomic Nuclei* **323**, 13–25. ISSN: 0939-7922 (1986).
78. Gambhir, Y. K., Ring, P. & Thimet, A. Relativistic mean field theory for finite nuclei. *Annals of Physics* **198**, 132–179 (Φεβ. 1990).
79. Long, W., Meng, J., Giai, N. V. & Zhou, S.-G. New effective interactions in relativistic mean field theory with nonlinear terms and density-dependent meson-nucleon coupling. *Phys. Rev. C* **69**, 034319 (3 2004).
80. Machleidt, R. στο *Advances in Nuclear Physics* (επιμελητές Negele, J. W. & Vogt, E.) 189–376 (Springer US, Boston, MA, 1989). ISBN: 978-1-4613-9907-0. doi:10.1007/978-1-4613-9907-0_2. http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4613-9907-0_2.
81. Entem, D. R. & Machleidt, R. Accurate charge-dependent nucleon-nucleon potential at fourth order of chiral perturbation theory. *Phys. Rev. C* **68**, 041001 (4 2003).
82. Liu, B., Greco, V., Baran, V., Colonna, M. & Di Toro, M. Asymmetric nuclear matter: The role of the isovector scalar channel. *Phys. Rev. C* **65**, 045201 (4 2002).
83. Brockmann, R. & Toki, H. Relativistic density-dependent Hartree approach for finite nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3408–3411 (23 1992).
84. Sugahara, Y. & Toki, H. Relativistic mean-field theory for unstable nuclei with non-linear σ and ω terms. *Nuclear Physics A* **579**, 557–572. ISSN: 0375-9474 (1994).

85. Todd-Rutel, B. G. & Piekarewicz, J. Neutron-Rich Nuclei and Neutron Stars: A New Accurately Calibrated Interaction for the Study of Neutron-Rich Matter. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 122501 (12 2005).
86. Typel, S. & Wolter, H. Relativistic mean field calculations with density-dependent meson-nucleon coupling. *Nuclear Physics A* **656**, 331–364. ISSN: 0375-9474 (1999).
87. , Vretenar, D., Finelli, P. & Ring, P. Relativistic Hartree-Bogoliubov model with density-dependent meson-nucleon couplings. *Phys. Rev. C* **66**, 024306 (2 2002).
88. Bender, M., Rutz, K., Reinhard, P.-G. & Maruhn, J. Consequences of the center-of-mass correction in nuclear mean-field models. *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei* **7**, 467–478. ISSN: 1434-601X (2000).
89. Peng-Wei, Z., Bao-Yuan, S. & Jie, M. Deformation Effect on the Center-of-Mass Correction Energy in Nuclei Ranging from Oxygen to Calcium. *Chinese Physics Letters* **26**, 112102 (2009).
90. Nikolaus, B. A., Hoch, T. & Madland, D. G. Nuclear ground state properties in a relativistic point coupling model. *Phys. Rev. C* **46**, 1757–1781 (5 1992).
91. Bürvenich, T., Madland, D. G., Maruhn, J. A. & Reinhard, P.-G. Nuclear ground state observables and QCD scaling in a refined relativistic point coupling model. *Phys. Rev. C* **65**, 044308 (4 2002).
92. Litvinova, E. & Ring, P. Covariant theory of particle-vibrational coupling and its effect on the single-particle spectrum. *Phys. Rev. C* **73**, 044328 (4 2006).
93. Yao, J. M., Meng, J., Ring, P. & Arteaga, D. P. Three-dimensional angular momentum projection in relativistic mean-field theory. *Phys. Rev. C* **79**, 044312 (4 2009).
94. Ring, P. & Litvinova, E. Particle-vibrational coupling in covariant density functional theory, *Phys. At. Nucl.* **72**, 1285–1304 (2009).
95. Friar, J. L., Madland, D. G. & Lynn, B. W. QCD scales in finite nuclei. *Phys. Rev. C* **53**, 3085–3087 (6 1996).
96. Manohar, A. & Georgi, H. Chiral Quarks and the Nonrelativistic Quark Model. *Nucl. Phys.* **B234**, 189–212 (1984).
97. Liang, H., Zhao, P., Ring, P., Roca-Maza, X. & Meng, J. Localized form of Fock terms in nuclear covariant density functional theory. *Phys. Rev. C* **86**, 021302 (2 2012).

98. Sulaksono, A., Burvenich, T., Maruhn, J. A., Reinhard, P. G. & Greiner, W. Mapping exchange in relativistic Hartree-Fock. *Annals Phys.* **306**, 36–57 (2003).
99. Nilsson, S. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **29**. eprint: nucl-th/0301072 (16 1955).
100. Bohr, A., Mottelson, B. R. & Pines, D. Possible Analogy between the Excitation Spectra of Nuclei and Those of the Superconducting Metallic State. *Phys. Rev.* **110**, 936–938 (4 1958).
101. Gonzalez-Llarena, T., Egido, J., Lalazissis, G. & Ring, P. Relativistic Hartree-Bogoliubov calculations with finite range pairing forces. *Physics Letters B* **379**, 13–19. ISSN: 0370-2693 (1996).
102. Ring, P. Relativistic mean field theory in finite nuclei. *Progress in Particle and Nuclear Physics* **37**, 193–263. ISSN: 0146-6410 (1996).
103. Serra, M. & Ring, P. Relativistic Hartree-Bogoliubov theory for finite nuclei. *Phys. Rev. C* **65**, 064324 (6 2002).
104. Niksic, T., Paar, N., Vretenar, D. & Ring, P. DIRHB - A relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei. *Comput. Phys. Commun.* **185**, 1808–1821 (2014).
105. Zhou, S.-G., Meng, J. & Ring, P. Spherical relativistic Hartree theory in a Woods-Saxon basis. *Phys. Rev. C* **68**, 034323 (3 2003).
106. Long, W. H., Ring, P., Giai, N. V. & Meng, J. Relativistic Hartree-Fock-Bogoliubov theory with density dependent meson-nucleon couplings. *Phys. Rev. C* **81**, 024308 (2 2010).
107. Li, L., Meng, J., Ring, P., Zhao, E.-G. & Zhou, S.-G. Deformed relativistic Hartree-Bogoliubov theory in continuum. *Phys. Rev. C* **85**, 024312 (2 2012).
108. Meng, J. & Ring, P. Relativistic Hartree-Bogoliubov Description of the Neutron Halo in ^{11}Li . *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3963–3966 (19 1996).
109. Meng, J., Pöschl, W. & Ring, P. Relativistic Hartree-Bogoliubov description of the lithium isotopes. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **358**, 123–124. ISSN: 1431-5831 (1997).
110. Meng, J. Relativistic continuum Hartree-Bogoliubov theory with both zero range and finite range Gogny force and their application. *Nuclear Physics A* **635**, 3–42. ISSN: 0375-9474 (1998).
111. Kerman, A. Pairing forces and nuclear collective motion. *Annals of Physics* **12**, 300–329. ISSN: 0003-4916 (1961).

112. Dobaczewski, J., Flocard, H. & Treiner, J. Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line. *Nuclear Physics A* **422**, 103–139. ISSN: 0375-9474 (1984).
113. Yao, J. M., Hagino, K., Li, Z. P., Meng, J. & Ring, P. Microscopic benchmark study of triaxiality in low-lying states of ^{76}Kr . *Phys. Rev. C* **89**, 054306 (5 2014).
114. Berger, J., Girod, M. & Gogny, D. Time-dependent quantum collective dynamics applied to nuclear fission. *Computer Physics Communications* **63**, 365–374. ISSN: 0010-4655 (1991).
115. Afanasjev, A. V., König, J. & Ring, P. Cranked relativistic Hartree-Bogoliubov theory: Superdeformed bands in the $A \sim 190$ region. *Phys. Rev. C* **60**, 051303 (5 1999).
116. Tian, Y., Ma, Z. & Ring, P. A finite range pairing force for density functional theory in superfluid nuclei. *Physics Letters B* **676**, 44–50. ISSN: 0370-2693 (2009).
117. Tian, Y., Ma, Z.-y. & Ring, P. Axially deformed relativistic Hartree Bogoliubov theory with a separable pairing force. *Phys. Rev. C* **80**, 024313 (2 2009).
118. , Ring, P., Vretenar, D., Tian, Y. & Ma, Z.-y. 3D relativistic Hartree-Bogoliubov model with a separable pairing interaction: Triaxial ground-state shapes. *Phys. Rev. C* **81**, 054318 (5 2010).
119. Ring, P., Gambhir, Y. & Lalazissis, G. Computer program for the relativistic mean field description of the ground state properties of even-even axially deformed nuclei. *Computer Physics Communications* **105**, 77–97. ISSN: 0010-4655 (1997).
120. Abramowitz, M. & Stegun, I. A. *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, 1965).
121. Kellogg, J. M. B., Rabi, I. I., Ramsey, N. F. & Zacharias, J. R. An Electrical Quadrupole Moment of the Deuteron. *Phys. Rev.* **55**, 318–319 (3 1939).
122. Otsuka, T., Matsuo, T. & Abe, D. Mean Field with Tensor Force and Shell Structure of Exotic Nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 162501 (16 2006).
123. Jiang, L. J., Yang, S., Sun, B. Y., Long, W. H. & Gu, H. Q. Nuclear tensor interaction in a covariant energy density functional. *Phys. Rev. C* **91**, 034326 (3 2015).
124. Schiffer, J. P. κ.ά. Is the Nuclear Spin-Orbit Interaction Changing with Neutron Excess? *Phys. Rev. Lett.* **92**, 162501 (16 2004).
125. Brown, B. A., Duguet, T., Otsuka, T., Abe, D. & Suzuki, T. Tensor interaction contributions to single-particle energies. *Phys. Rev. C* **74**, 061303 (6 2006).

126. Brink, D. M. & Stancu, F. Evolution of nuclear shells with the Skyrme density dependent interaction. *Phys. Rev. C* **75**, 064311 (6 2007).
127. Colò, G., Sagawa, H., Fracasso, S. & Bortignon, P. Spin-orbit splitting and the tensor component of the Skyrme interaction. *Physics Letters B* **646**, 227–231. ISSN: 0370-2693 (2007).
128. Lesinski, T., Bender, M., Bennaceur, K., Duguet, T. & Meyer, J. Tensor part of the Skyrme energy density functional: Spherical nuclei. *Phys. Rev. C* **76**, 014312 (1 2007).
129. Zalewski, M., Dobaczewski, J., Satuła, W. & Werner, T. R. Spin-orbit and tensor mean-field effects on spin-orbit splitting including self-consistent core polarizations. *Phys. Rev. C* **77**, 024316 (2 2008).
130. Satuła, W. κ.ά. Global nuclear structure aspects of tensor interaction. *Int. J. Mod. Phys. E* **18**, 808–815 (2009).
131. Maruhn, J., Bürvenich, T. & Madland, D. Calculating the Fierz Transformation for Higher Orders. *Journal of Computational Physics* **169**, 238–245. ISSN: 0021-9991 (2001).
132. Horowitz, C. & Serot, B. D. Relativistic Hartree theory of finite nuclei: The role of the quantum vacuum. *Physics Letters B* **140**, 181–186. ISSN: 0370-2693 (1984).
133. Bouyssy, A., Marcos, S., Mathiot, J. F. & Van Giai, N. Isovector-meson contributions in the Dirac-Hartree-Fock approach to nuclear matter. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1731–1733 (17 1985).
134. Bouyssy, A., Mathiot, J.-F., Van Giai, N. & Marcos, S. Relativistic description of nuclear systems in the Hartree-Fock approximation. *Phys. Rev. C* **36**, 380–401 (1 1987).
135. Marcos, S., Niembro, R., Quelle, M. & Navarro, J. Magnetic susceptibility of neutron matter in a relativistic $\sigma+\omega+\pi+\rho$ Hartree-Fock approach. *Physics Letters B* **271**, 277–280. ISSN: 0370-2693 (1991).
136. Bernardos, P. κ.ά. Relativistic Hartree-Fock approximation in a nonlinear model for nuclear matter and finite nuclei. *Phys. Rev. C* **48**, 2665–2672 (6 1993).
137. Marcos, S, Savushkin, L. N., Fomenko, V. N., López-Quelle, M & Niembro, R. Description of nuclear systems within the relativistic Hartree-Fock method with zero-range self-interactions of the scalar field. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* **30**, 703 (2004).
138. Long, W.-H., Giai, N. V. & Meng, J. Density-dependent relativistic Hartree-Fock approach. *Physics Letters B* **640**, 150–154. ISSN: 0370-2693 (2006).

139. Long, W., Sagawa, H., Giai, N. V. & Meng, J. Shell structure and ρ -tensor correlations in density dependent relativistic Hartree-Fock theory. *Phys. Rev. C* **76**, 034314 (3 2007).
140. Serra, M. *Field Theoretical Description of Exchange Terms and Pairing Correlations in Nuclear Systems* Διδακτορική διατρ. (Institut für Theoretische Physik T30 , Physik-Department, Technische Universität München).
141. Bohr, A. & Mottelson, B. R. *Nuclear Structure Volume II: Nuclear Deformation* (World Scientific Publishing Company, 1975).
142. Soloviev, V., Stoyanov, C. & Voronov, V. Nuclear properties in the lead region within the quasiparticle-phonon nuclear model. *Nuclear Physics A* **399**, 141 –162. ISSN: 0375-9474 (1983).
143. Galès, S, Stoyanov, C. & Vdovin, A. Damping of high-lying single-particle modes in heavy nuclei. *Physics Reports* **166**, 125 –193. ISSN: 0370-1573 (1988).
144. Soloviev, V. *Theory of Atomic Nuclei, Quasi-particle and Phonons* (CRC Press, 1992).
145. Bortignon, P., Broglia, R., Bes, D. & Liotta, R. Nuclear field theory. *Physics Reports* **30**, 305 –360. ISSN: 0370-1573 (1977).
146. Bertsch, G. F., Bortignon, P. F. & Broglia, R. A. Damping of nuclear excitations. *Rev. Mod. Phys.* **55**, 287–314 (1 1983).
147. Mahaux, C, Bortignon, P., Broglia, R. & Dasso, C. Dynamics of the shell model. *Physics Reports* **120**, 1 –274. ISSN: 0370-1573 (1985).
148. Bortignon, P. & Broglia, R. Role of the nuclear surface in a unified description of the damping of single-particle states and giant resonances. *Nuclear Physics A* **371**, 405 –429. ISSN: 0375-9474 (1981).
149. Colò, G., Bortignon, P. F., Giai, N. V., Bracco, A. & Broglia, R. A. Damping properties of the breathing mode in 208Pb. *Physics Letters B* **276**, 279 –284. ISSN: 0370-2693 (1992).
150. Bernard, V. & Giai, N. V. Effects of collective modes on the single-particle states and the effective mass in 208Pb. *Nuclear Physics A* **348**, 75 –92. ISSN: 0375-9474 (1980).
151. Avdeenkov, A. & Kamerzhiev, S. The role of ground state correlations in the single-particle strength of odd nuclei with pairing. *Physics Letters B* **459**, 423 –430. ISSN: 0370-2693 (1999).
152. Barranco, F. κ.ά. Surface Vibrations and the Pairing Interaction in Nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2147–2150 (11 1999).

153. Barbieri, C. Role of Long-Range Correlations in the Quenching of Spectroscopic Factors. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 202502 (20 2009).
154. Colò, G., Sagawa, H. & Bortignon, P. F. Effect of particle-vibration coupling on single-particle states: A consistent study within the Skyrme framework. *Phys. Rev. C* **82**, 064307 (6 2010).
155. Kamerdzhev, S., Speth, J. & Tertychny, G. Extended theory of finite Fermi systems: collective vibrations in closed shell nuclei. *Physics Reports* **393**, 1–86. ISSN: 0370-1573 (2004).
156. Litvinova, E. V. & Tselyaev, V. I. Quasiparticle time blocking approximation in coordinate space as a model for the damping of the giant dipole resonance. *Phys. Rev. C* **75**, 054318 (5 2007).
157. Drożdż, S., Nishizaki, S., Speth, J. & Wambach, J. The nuclear response within extended RPA theories. *Physics Reports* **197**, 1–65. ISSN: 0370-1573 (1990).
158. Litvinova, E. V. & Afanasjev, A. V. Dynamics of nuclear single-particle structure in covariant theory of particle-vibration coupling: From light to superheavy nuclei. *Phys. Rev. C* **84**, 014305 (1 2011).
159. Litvinova, E. Quasiparticle-vibration coupling in a relativistic framework: Shell structure of $Z = 120$ isotopes. *Phys. Rev. C* **85**, 021303 (2 2012).
160. Litvinova, E., Ring, P. & Tselyaev, V. Particle-vibration coupling within covariant density functional theory. *Phys. Rev. C* **75**, 064308 (6 2007).
161. Litvinova, E., Ring, P. & Tselyaev, V. Relativistic quasiparticle time blocking approximation: Dipole response of open-shell nuclei. *Phys. Rev. C* **78**, 014312 (1 2008).
162. Litvinova, E., Ring, P. & Tselyaev, V. Mode Coupling and the Pygmy Dipole Resonance in a Relativistic Two-Phonon Model. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 022502 (2 2010).
163. Litvinova, E., Ring, P. & Tselyaev, V. Relativistic two-phonon model for the low-energy nuclear response. *Phys. Rev. C* **88**, 044320 (4 2013).
164. Paar, N., Ring, P. & Vretenar, D. Quasiparticle random phase approximation based on the relativistic Hartree-Bogoliubov model. *Phys. Rev. C* **67**, 034312 (3 2003).
165. Arteaga, D. P. & Ring, P. Relativistic random-phase approximation in axial symmetry. *Phys. Rev. C* **77**, 034317 (3 2008).
166. Daoutidis, J. & Ring, P. Continuum random-phase approximation for relativistic point coupling models. *Phys. Rev. C* **80**, 024309 (2 2009).

167. Itzykson, C. & Zuber, J.-B. *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, 1980).
168. Grawe, H, Langanke, K & Martínez-Pinedo, G. Nuclear structure and astrophysics. *Reports on Progress in Physics* **70**, 1525 (2007).
169. Otsuka, T. κ.ά. Novel Features of Nuclear Forces and Shell Evolution in Exotic Nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 012501 (1 2010).
170. Sorlin, O. & Porquet, M.-G. Nuclear magic numbers: New features far from stability. *Progress in Particle and Nuclear Physics* **61**, 602 –673. ISSN: 0146-6410 (2008).
171. Bender, M., Rutz, K., Reinhard, P.-G., Maruhn, J. A. & Greiner, W. Shell structure of superheavy nuclei in self-consistent mean-field models. *Phys. Rev. C* **60**, 034304 (3 1999).
172. Sobiczewski, A. & Pomorski, K. Description of structure and properties of superheavy nuclei. *Progress in Particle and Nuclear Physics* **58**, 292 –349. ISSN: 0146-6410 (2007).
173. Zhang, W., Meng, J., Zhang, S., Geng, L. & Toki, H. Magic numbers for superheavy nuclei in relativistic continuum Hartree–Bogoliubov theory. *Nuclear Physics A* **753**, 106 –135. ISSN: 0375-9474 (2005).
174. Afanasjev, A. V. & Frauendorf, S. Central depression in nuclear density and its consequences for the shell structure of superheavy nuclei. *Phys. Rev. C* **71**, 024308 (2 2005).
175. Migdal, A. Theory of finite fermi systems and application to atomic nuclei. *Wilson Interscience* (1967).
176. Serra, M. & Ring, P. Relativistic Hartree-Bogoliubov theory for finite nuclei. *Phys. Rev. C* **65**, 064324 (6 2002).
177. Jolos, R. V., Molina, J. L. & Soloviev, V. G. Effect of the Pauli principle on the excited states of doubly-even deformed nuclei. *Zeitschrift für Physik A Atoms and Nuclei* **295**, 147–152 (1980).
178. Mishev, S. & Voronov, V. V. Effects of ground state correlations on the structure of odd-mass spherical nuclei. *Phys. Rev. C* **78**, 024310 (2 2008).
179. Sharma, M., Lalazissis, G. & Ring, P. Anomaly in the charge radii of Pb isotopes. *Physics Letters B* **317**, 9 –13. ISSN: 0370-2693 (1993).
180. Duerr, H.-P. Relativistic Effects in Nuclear Forces. *Phys. Rev.* **103**, 469–480 (2 1956).
181. Miller, L. D. & Green, A. E. S. Relativistic Self-Consistent Meson Field Theory of Spherical Nuclei. *Phys. Rev. C* **5**, 241–252 (1 1972).

182. Roca-Maza, X., Viñas, X., Centelles, M., Ring, P. & Schuck, P. Relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon vertices based on microscopical calculations. *Phys. Rev. C* **84**, 054309 (5 2011).
183. Sharma, M. M., Lalazissis, G. A., Hillebrandt, W. & Ring, P. Shell effects in nuclei near the neutron-drip line. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1431–1434 (10 1994).
184. Reinhard, P.-G. & Flocard, H. Nuclear effective forces and isotope shifts. *Nuclear Physics A* **584**, 467–488. ISSN: 0375-9474 (1995).
185. Lalazissis, G. A., Vretenar, D., Poeschl, W. & Ring, P. Reduction of the spin orbit potential in light dripline nuclei. *Phys. Lett.* **B418**, 7–12 (1998).
186. Burgunder, G. κ.ά. Experimental Study of the Two-Body Spin-Orbit Force in Nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **112**, 042502 (4 2014).
187. Mutschler, A κ.ά. A proton density bubble in the doubly magic ^{34}Si nucleus. *Nat Phys advance on*. ISSN: 1745-2481. <http://dx.doi.org/10.1038/nphys3916><http://10.1038/nphys3916> (2016).
188. Grasso, M. κ.ά. Nuclear “bubble” structure in ^{34}Si . *Phys. Rev. C* **79**, 034318 (3 2009).
189. Eckle, G. κ.ά. A $^{36}\text{S}(d,p)$ study with high energy resolution. *Nuclear Physics A* **491**, 205–226. ISSN: 0375-9474 (1989).
190. Grasso, M. & Anguiano, M. Neutron $2p$ and $1f$ spin-orbit splittings in ^{40}Ca , ^{36}S , and ^{34}Si $N = 20$ isotones: Tensor-induced and pure spin-orbit effects. *Phys. Rev. C* **92**, 054316 (5 2015).
191. Koepf, W. & Ring, P. The spin-orbit field in superdeformed nuclei: a relativistic investigation. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **339**, 81–90. ISSN: 0939-7922 (1991).
192. Reinhard, P. G. The relativistic mean-field description of nuclei and nuclear dynamics. *Reports on Progress in Physics* **52**, 439 (1989).
193. Sharma, M. M., Lalazissis, G., König, J. & Ring, P. Isospin Dependence of the Spin-Orbit Force and Effective Nuclear Potentials. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3744–3747 (19 1995).
194. Lalazissis, G. κ.ά. The effective force {NL3} revisited. *Physics Letters B* **671**, 36–41. ISSN: 0370-2693 (2009).
195. Uozumi, Y. κ.ά. Shell-model study of ^{40}Ca with the 56-MeV ($d \rightarrow, p$) reaction. *Phys. Rev. C* **50**, 263–274 (1 1994).
196. Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J. & Schaeffer, R. A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities. *Nuclear Physics A* **635**, 231–256. ISSN: 0375-9474 (1998).

197. Todd-Rutel, B. G., Piekarewicz, J. & Cottle, P. D. Spin-orbit splitting in low- j neutron orbits and proton densities in the nuclear interior. *Phys. Rev. C* **69**, 021301 (2 2004).
198. Ebran, J.-P., Mutschler, A., Khan, E. & Vretenar, D. Spin-orbit interaction in relativistic nuclear structure models. *Phys. Rev. C* **94**, 024304 (2 2016).
199. Changizi, S., Qi, C. & Wyss, R. Empirical pairing gaps, shell effects, and di-neutron spatial correlation in neutron-rich nuclei. *Nuclear Physics A* **940**, 210–226. ISSN: 03759474 (2015).
200. Wapstra, A., Audi, G. & Thibault, C. The Ame2003 atomic mass evaluation: (I). Evaluation of input data, adjustment procedures. *Nuclear Physics A* **729**. The 2003 {NUBASE} and Atomic Mass Evaluations, 129–336. ISSN: 0375-9474 (2003).
201. Afanasjev, A. V. & Abdurazakov, O. Pairing and rotational properties of actinides and superheavy nuclei in covariant density functional theory. *Phys. Rev. C* **88**, 014320 (1 2013).
202. Litvinova, E. Pion–nucleon correlations in finite nuclei in a relativistic framework: Effects on the shell structure. *Physics Letters B* **755**, 138–144. ISSN: 0370-2693 (2016).
203. Prassa, V., Lu, B.-N., Ackermann, D. & Vretenar, D. High- K isomers in transactinide nuclei close to $N = 162$. *Phys. Rev. C* **91**, 034324 (3 2015).
204. De Voigt, M. J. A., Dudek, J. High-spin phenomena in atomic nuclei. *Rev. Mod. Phys.* **55**, 949–1046 (4 1983).
205. Walker, P. M. & Dracoulis, G. D. Exotic Isomers in Deformed Atomic Nuclei. *Hyperfine Interactions* **135**, 83–107 (2001).
206. Philip, W. & George, D. Energy traps in atomic nuclei. *Nature* **399**. <http://dx.doi.org/10.1038/19911> (1999).
207. Philip, W. & Carroll, J. J. Ups and Downs of Nuclear Isomers. *Physics Today* **58**, 39 (6 2005).
208. Aprahamian, A. & Sun, Y. Nuclear physics: Long live isomer research. *Nat Phys* **1**, 81–82. ISSN: 1745-2473 (2005).
209. Walker, P. M. & Carroll, J. J. Feature Article: Nuclear Isomers: Recipes from the Past and Ingredients for the Future. *Nuclear Physics News* **17**, 11–15 (2007).
210. Carroll, J. J. Nuclear structure and the search for induced energy release from isomers. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **261**, 960–964 (2007).

211. Dracoulis, G. D., Walker, P. M. & Kondev, F. G. Review of metastable states in heavy nuclei. *Reports on Progress in Physics* **79**, 076301 (2016).
212. Kondev, F., Dracoulis, G. & Kibédi, T. Configurations and hindered decays of isomers in deformed nuclei with. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **103–104**, 50–105. ISSN: 0092-640X (2015).
213. *Evaluated Nuclear Structure Data File (ENSDF) and Unevaluated Nuclear Data List (XUNDL)* <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>.
214. Hahn, O. Über eine neue radioaktive Substanz im Uran. *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft (A and B Series)* **54**, 1131–1142. ISSN: 1099-0682 (1921).
215. Soddy, F. The complexity of chemical elements. *Nature* **99**, 244–245 (1917).
216. Segrè, E. & Helmholz, A. C. Nuclear Isomerism. *Rev. Mod. Phys.* **21**, 271–304 (2 1949).
217. Bohr, A. & Mottelson, B. R. Rotational States in Even-Even Nuclei. *Phys. Rev.* **90**, 717–719 (4 1953).
218. Burson, S. B., Blair, K. W., Keller, H. B. & Wexler, S. The Radiations from Hafnium. *Phys. Rev.* **83**, 62–68 (1 1951).
219. Bohr, A. Rotational motion in nuclei. *Rev. Mod. Phys.* **48**, 365–374 (3 1976).
220. Bohr, A. & Mottelson, B. R. Single-Particle and Collective Aspects of Nuclear Rotation. *Physica Scripta* **24**, 71 (1981).
221. Becker, J. A. Atomic–Nuclear Coupling Experiments. *AIP Conference Proceedings* **819**, 396–401 (2006).
222. Matinyan, S. Lasers as a bridge between atomic and nuclear physics. *Physics Reports* **298**, 199–249. ISSN: 0370-1573 (1998).
223. Gobet, F. κ.ά. Nuclear physics studies using high energy lasers. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **653**. Superstrong 2010, 80–83. ISSN: 0168-9002 (2011).
224. Pálffy, A., Evers, J. & Keitel, C. H. Isomer Triggering via Nuclear Excitation by Electron Capture. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 172502 (17 2007).
225. Langanke, K & Wiescher, M. Nuclear reactions and stellar processes. *Reports on Progress in Physics* **64**, 1657 (2001).
226. Arnould, M., Goriely, S. & Takahashi, K. The r-process of stellar nucleosynthesis: Astrophysics and nuclear physics achievements and mysteries. *Physics Reports* **450**, 97–213. ISSN: 0370-1573 (2007).

227. The p-process of stellar nucleosynthesis: astrophysics and nuclear physics status. *Physics Reports* **384**, 1 –84. ISSN: 0370-1573 (2003).
228. Collins, C., Eberhard, C., Glesener, J. & Anderson, J. *Phys. Rev. C* **37**, 2267 (1988).
229. Bikit, I., Lakosi, L., Safar, J. & Conkic, L. *Astrophys. J.* **522**, 419 (1999).
230. Carroll, J. J. An experimental perspective on triggered gamma emission from nuclear isomers. *Laser Physics Letters* **1**, 275 (2004).
231. Dracoulis, G. κ.ά. Identification of yrast high-K isomers in ^{177}Lu and characterisation of ^{177m}Lu . *Physics Letters B* **584**, 22 –30. ISSN: 0370-2693 (2004).
232. Baldwin, G. C., Neissel, J. P. & Tonks, L. *Proc. IEEE* **51**, 1247 (1963).
233. Rivlin, L. A. *Soviet Inventor's Certificate No.621265* (1961).
234. Kondev, F., Dracoulis, G., Byrne, A. & Kibédi, T. Intrinsic states and rotational bands in ^{176}Ta and ^{178}Ta . *Nuclear Physics A* **632**, 473 –539. ISSN: 0375-9474 (1998).
235. Lu-Lu, L., Jie, M., Ring, P., En-Guang, Z. & Shan-Gui, Z. Odd Systems in Deformed Relativistic Hartree Bogoliubov Theory in Continuum. *Chinese Physics Letters* **29**, 042101 (2012).
236. Perez-Martin, S. & Robledo, L. M. Microscopic justification of the equal filling approximation. *Phys. Rev. C* **78**, 014304 (1 2008).
237. Schunck, N. κ.ά. One-quasiparticle states in the nuclear energy density functional theory. *Phys. Rev. C* **81**, 024316 (2 2010).
238. Dracoulis, G. κ.ά. Two-quasiparticle K-isomers and pairing strengths in the neutron-rich isotopes ^{174}Er and ^{172}Er . *Physics Letters B* **635**, 200 –206. ISSN: 0370-2693 (2006).
239. Ghiorso, A., Eskola, P. & Nurmi, M. Isomeric states in ^{250}Fm and ^{254}No . *Phys. Rev. C* **7**, 2032 (1973).