

Egyetemi doktori (PhD) értekezés tézisei

**FÜGGVÉNYSIMÍTÁSOK MAGFIZIKAI
PROBLÉMÁKBAN**

**FUNCTION SMOOTHINGS IN
NUCLEAR PHYSICS PROBLEMS**

Salamon József Péter

Témavezető: Dr. Vertse Tamás



DEBRECENI EGYETEM

Matematika– és Számítástudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2011

Bevezetés

A távközlésben nagyon fontos feladat az átvinni kívánt jeleknek a ráakódó zajoktól való megszabadítása, amit megfelelő ún. aluláteresztő szűrők alkalmazásával lehet elérni. Matematikailag ez a függvény Fourier-sorfejtésével és a kapott spektrum nagyfrekvenciás részének az elhagyásával valósítható meg, és a függvény simításának tekinthető. A szűrők alkalmazásánál nem foglalkozunk azzal, hogy a zaj spektruma milyen eloszlást mutat, vajon véletlen eloszlású fehér zaj-e, vagy meghatározott eredetű, amelyben jól meghatározott komponensek dominálnak.

Az általunk vizsgált feladatokban az a közös, hogy a fluktuációk, amelyekről a függvényünket meg kívánjuk szabadítani, nem véletlen eredetűek, hanem jól meghatározott okból vannak jelen. Ez a tulajdonság segítségünkre volt a megfelelő függvénytisztító eljárás megtalálásában.

Vizsgálataim egyik része az ún. héjkorrekció számítás. A dolgozatomban szereplő vizsgálatokban az egyszerű egyrészecskes héjmodellben dolgoztam, és az átlagpotenciálról a magfizikában összegyűlt ismereteket használtam fel. A $v_N(r)$ magpotenciálra egyszerű alakú, ún. *fenomenologikus* függvényformákat alkalmaztam. Az egyrészecske Hamilton-operátor sajátérték-problémája megoldásaként az energiaspektrum diszkrét része adja az egyrészecske-energiákat. A héjkorrekció meghatározásához a diszkrét spektrumot megfelelő módon kell kisimítani. Vizsgálataim során először a spektrumsimítás részleteivel foglalkoztam.

Az atommagok tömege, vagyis az energiája nagyon fontos alapmennyiség. A stabilitási tartománytól távol, az ún. elhullatási vonalak mentén a héjszerkezet változása, vagy az eddig ismert legnagyobb magtömegeken túli új mágikus számok létezése is a magtömegektől függ.

A tömegszámításoknak több fontos elméleti megközelítése létezik. Az egyik első magmodell, a folyadékcsepp-modell elég jól visszaadja a mért magtömegek általános viselkedését annak ellenére, hogy a magot makroszkopikus testnek, folyadékcseppnek tekinti. A magmodellek döntő hányada azonban figyelembeveszi, hogy az atommag nukleonokból álló mikroszkopikus rendszer, aminek a helyes leírása a kvantummechanika keretében történik. Manapság kiterjedten használják a Monte-Carlo-héjmodellt, és egyre terjed a modellfüggetlen alakanalízis módszere (*pattern recognition*) is. A mikroszkopikus magmodellek közül itt csak az effektív sűrűségfüggő kölcsönhatásokat felhasználó, mikroszkopikus Hartree–Fock (HF) vagy Hartree–Fock–Bogoliubov (HFB) számításokat említem, amik nagyon hatékonynak bizonyulnak a globális tömegszámítások területén. Az eddigi legjobb HFB formula felhasználásával kapott RMS hiba (négyzetes középben vett eltérés) 674 keV-nek adódott.

A kötési energiák számításánál, egy jóval egyszerűbb alternatív eljárás is létezik, ami kombinálja a makroszkopikus és a mikroszkopikus magmodellek előnyös tulajdonságait. Ez az ún. mikroszkopikus-makroszkopikus (Mic-Mac) modell, ami pontosságban képes felvenni a versenyt a mikroszkopikus számítási módszerekkel annak ellenére, hogy számításigénye jóval szerényebb, mint a korábban említett HF vagy HFB módszereké. Mivel egy újabb Mic-Mac számítás RMS hibája 676 keV, ezért kijelenthetjük, hogy a mikroszkopikus és a Mic-Mac módszer pontosság tekintetében nagyjából egyenértékű. A majdnem azonos globális illeszkedés ellenére azonban a neutronelhullatási vonal közelében a két módszer számottevő eltérést mutat.

A Mic-Mac számítások legfontosabb mennyisége a héjkorrekció. A héjkorrekció bevezetése óta az eredeti módszert számos alkalommal finomították.

Jelen munka egyik célja egy olyan új héjkorrekció számítási módszer kifejlesztése volt, amely mentes a korábban használt módszerek korlátozásaitól, és a teljes neutron-proton síkon alkalmazható [1].

Héjkorrekciós vizsgálatoknál az alapfogalmaink a kvantumos egyrészecske-nívósűrűség és a simított nívósűrűség. A kvantumos nívósűrűség az egyrészecske-energiákra centrált Dirac-delta függvények összege. A simított nívósűrűség pedig egy szingularitásmentes sima függvény. A kvantumos nívósűrűségnek a Strutinsky-féle simítása egy jól definiált eljárás.

Először egy normált, pozitív, páros súlyfüggvényt választanak ki. Ez lesz a kezdő simító függvény. A simítást pedig úgy végzik, hogy a kvantumos nívósűrűséget a súlyfüggvényt tartalmazó simítófüggvénnyel konvolválják. Ez az egyszerű eljárás azonban még nem megfelelő. Meg kell követelnünk a simítási folyamat önkonzisztenciáját is. Ha a simítást egy megfelelően sima függvényre (adott fokú polinomra) alkalmazzuk, akkor az eredménynek azonosnak kell lennie az eredeti függvénnyel. Ezt az eljárást görbületkorrekciós simításnak hívjuk.

Ilyen simítás javítására vezettünk be egy olyan eljárást, amely a Strutinsky-módszerben alkalmazott Gauss-féle súlyfüggvénnyel ellentétben csak véges tartományon hat.

Egy másik eljárásunk a héjkorrekció pontosítására megtartja a simításnál használt súlyfüggvény eredeti, végtelen hatótávolságú formáját, azonban simító függvény előállítására nem polinomiális formát használ [2].

Vizsgálataim második része azzal foglalkozik, hogy hogyan lehet egy matematikai szempontból az eddig használtaknál kedvezőbb függvény formájú $v_N(r)$ egyrészecske-potenciált előállítani [3].

Az általunk javasolt új egyrészecske-potenciál alakja ugyanabból a véges hatótávolságú súlyfüggvényből származik, amit az egyrészecske-spektrum alkalmas simítására használtunk. Az új fenomenologikus potenciál alak tehát az eddig használt szakadással rendelkező (azaz nem folytonos) forma kisimítésének tekinthető.

Eredmények

1. Bevezettem egy új súlyfüggvényen alapuló polinomiális görbületkorrekciós módszert, a héjkorrekció kiszámításra [1], [4]. Az új simító függvény véges hatótávolságú, tehát a Strutinsky-módszernél alkalmazott Gauss-féle súlyfüggvénnyel ellentétben csak véges energiatartományon hat, tehát lehetővé teszi, hogy egyetlen e_i energiájú egyrészecske állapot hatását egy véges intervallumra lokalizáljuk. Ez a lokalizáció teszi lehetővé, hogy a módszer alkalmazhatósági tartományát kitoljuk a spektrum határai felé. Ebben a módszerben a héjkorrekció értékét a lokális platófeltétel alkalmazásával határozzuk meg. Így a héjkorrekció pontosabban lesz számítható a neutronelhullatási vonal közelében elhelyezkedő gyengén kötött magok esetében, illetve a könnyű magok esetén is, ahol a korábban használt ún. általánosított Strutinsky-módszer nem alkalmazható. Az új módszer proton és neutron héjkorrekciók kiszámításánál egyaránt jól működik.
2. Megvizsgáltam, hogy lehetséges-e a héjkorrekció számítás pontosítása az eredetileg használt végtelen hatótávolságú súlyfüggvény, illetve a platófeltétel alkalmazásával [2], [5]. Bevezettem két új görbületkorrekciós módszert: *derivált görbületkorrekció* (DCC) és *több szélességű görbületkorrekció* (MWCC). Az általunk vizsgált módszerek közül az MWCC módszer bizonyult a jobbnak. Szórási állapotok nélküli potenciálokra minden eljárás hasonlóan viselkedik. A héjkorrekció a simítási szélesség függvényében egy széles tartományban gyakorlatilag állandó (platófeltétel). A platótartomány mérete azonban az MWCC módszernél sokkal nagyobb, mint a többi módszernél. A szórási állapotokkal is ren-

delkező potenciáloknál (realisztikus potenciálok) az MWCC módszer előnye szembetűnő. Az MWCC módszer kivételével a többi módszernél csak a lokális platófeltétel teljesül. Ha a számítást MWCC módszerrel végezzük, még realisztikus potenciálnál is létezik egy széles platótartomány, és a héjkorrekció eléggé stabil a görbületkorrekció fokának emelésével szemben is.

3. Bevezettem egy fenomenologikus, véges hatótávolságú magpotenciált, amely a népszerű Woods–Saxon-potenciál alternatívája lehet [3], [6]. Az új potenciál a Woods–Saxon-potenciállal ellentétben véges sugárnál azonosan nullává válik és minden deriváltja mindenütt folytonos. A Woods–Saxon-potenciálból realisztikus paraméterezéssel adódó egyrészezske-energiák nagyon jó közelítéssel visszakaphatóak az új potenciálból, valamint a széles rezonanciák pozíciói mentesek a levágási sugár okozta bizonytalanságtól.

Introduction

It is an important task in telecommunication to separate the transported signals from the noise. This can be carried out by using low pass filters. In the language of mathematics this corresponds to a smoothing of the signal function, and can be realized by discarding the high-frequency part of the Fourier expansion of the corresponding signal function. At this type of smoothing we do not care about the distribution of the noise, i. e. if it is a white noise with random (stochastic) distribution or it has a definite character with well determined components.

In the task investigated in the present thesis it is a common feature that the fluctuations we would like to get rid of have no stochastic origin but they are present due to character of the problem studied. This feature helped us to find the proper way of the smoothing for the physical quantities we deal with.

A considerable part of my theses deals with the accurate calculation of the shell correction. In these studies, I worked in the simple single-particle shell model. Here I used the knowledge accumulated in nuclear physics on the nuclear single-particle potential. I used simple *phenomenological* forms for the nuclear potential $v_N(r)$. The solution of the eigenvalue-problem of the single-particle Hamiltonian supplies us with the single-particle energies of the shell model. These energies correspond to the discrete part of the spectrum. In the calculation of the shell correction we have to smooth out this discrete spectrum. The first part of my investigations deals with details of spectrum smoothing procedure.

Masses or equivalently ground state energies of nuclei are very important quantities. For example, shell structure changes around drip lines and the

existence of new magic numbers beyond the heaviest known nuclei can be studied with the help of mass measurements.

There are several important theoretical methods for global mass calculations. One of the first nuclear model is the liquid drop model which describes relatively well the general trend of the measured nuclear masses in spite of that it treats the nucleus as a macroscopic object, namely a liquid drop. A large majority of the nuclear models however, takes into account that the proper description of the nucleus should be done in the framework of the quantum mechanics. For the description of this type of microsystems the Monte-Carlo shell model or the model of pattern recognition have growing importance. Microscopic mean-field calculations are also very successful in this field. They reproduce the measured nuclear masses with an RMS error of 674 keV.

There exists a more simple alternative approach which combines the advantages of the microscopic and macroscopic models. This is the so-called (Mic-Mac) formalism, which can compete in accuracy with the microscopic calculations in the calculation of the binding energies. The RMS error in the Mic-Mac calculation is 676 keV, therefore we may say that the quality of the microscopic and Mic-Mac methods are the same. In spite of the almost identical global fits the microscopic and Mic-Mac methods show considerable differences in the region of the neutron drip line.

The key quantity of the Mic-Mac calculations is the shell correction. Since the introduction of the shell correction there were several refinements of the original method.

One of the main goals of my work was to develop a new method for the calculation of the shell correction, which is free from the uncertainties of the methods used so far and is applicable for the whole nuclear chart, even in the vicinity of the two drip lines [1].

In calculating shell correction the basic concepts are the quantum single-particle level density and the smoothed level density. The quantum level density is simply a sum of Dirac-delta functions centered at the single-particle energies. The smooth level density is a smooth function which is free from singularities. The Strutinsky's smoothing of the quantum level density is a

well-defined procedure. First, we select a normalized, positive and even function, which we call as smoothing function. Smoothing means a convolution of the quantum level density with the smoothing function. This simple procedure, however, is insufficient. The self-consistency of the smoothing process is required. If the smoothing is applied to a sufficiently smooth function (polynomial) then the result of the smoothing has to be identical with the original function. This property is referred to as curvature corrected smoothing.

In order to improve the smoothing method, we introduced a smoothing function acting in a finite-range in contrast to the Gaussian function used by Strutinsky.

Another smoothing we introduced for the smoothing keeps the infinite-range of the weight function used before but it uses a non-polynomial form for the smoothing function [2].

The second part of my investigations deals with finding a new form for the single-particle potential $v_N(r)$ which is nicer from the mathematical point of view than the ones used so far [3].

Our new potential form originates from the weight function used by us for the finite-range smoothing of the single-particle spectrum. Therefore, the new form factor can be considered as a smoothed form of the single-particle potential with discontinuity.

Results

1. I introduced a new method for the calculation of shell correction [1], [4]. The new method applies new weight function and curvature correction polynomials in the smoothing function. The new smoothing function has a finite-range in contrast to the Gaussian function used by Strutinsky. The new smoothing function localizes the effect of an e_i single-particle energy for a finite energy interval. This localization allows us to extend the range of applicability toward the ends of the spectrum. In the new method, the local plateau condition is used to fix the shell correction value. The new method works well for slightly bound nuclei in the region of the neutron drip line and for light nuclei as well, where the generalized Strutinsky method can not be applied. It works equally well for the calculation of proton and neutron shell corrections.
2. I investigated the possibility to increase the accuracy of the shell correction calculation [2], [5] by using infinite-range weight function and the plateau condition used before. For this purpose, I introduced two new methods for the curvature correction: the *derivative curvature correction* (DCC) and the *many-width curvature correction* (MWCC) methods. In these novel methods the self-consistency condition is satisfied with non-polynomial smoothing function. The MWCC method turned to be the better from the two methods studied. For potentials without scattering states the plateau condition could be satisfied for every methods we tried. However, the plateau was wider for the MWCC method than for the DCC method. For realistic potentials with scattering sta-

tes however, only the MWCC method produced plateau. For the other methods, we could use only the local plateau condition. With MWCC method we had relatively wide plateau region and the value of the shell correction inside this region is quite stable if we increase the order of the curvature correction function.

3. I introduced a new phenomenological nuclear potential which has a finite-range and which can be used instead of the well-known Woods–Saxon potential [3], [6]. In contrast to the Woods–Saxon potential, the new potential becomes zero at a finite distance, and the potential function and its derivatives are continuous everywhere. The single-particle energy spectrum of the Woods–Saxon potential with realistic parameters can be reproduced reasonably well by the spectrum of the new potential with parameters fitted to the Woods–Saxon potential. The positions of the wide resonances are free from uncertainties caused by the cut-off parameter of the Woods–Saxon potential.

A jelöltnek a témában megjelent publikációi (Publications of the author in this subject)

Referált publikációk (Refereed publications)

- [1] P. Salamon, A. T. Kruppa, T. Vertse, *New method for calculating shell correction*, Phys. Rev. **C81**, 067422 (2010). [IF:3.477²⁰⁰⁹]
- [2] P. Salamon, A. T. Kruppa, *Curvature correction in Strutinsky's method*, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **37** 105106 (2010). [IF:2.124²⁰⁰⁹]
- [3] P. Salamon, T. Vertse, *New simple form for a phenomenological nuclear potential*, Phys. Rev. **C77**, 037302 (2008). [IF:3.124²⁰⁰⁸]

Egyéb publikációk (Other publications)

- [4] P. Salamon, A. T. Kruppa, T. Vertse, *Shell correction with finite-range smoothing*, Atomki Annual Report (2008).
- [5] P. Salamon, A. T. Kruppa, *Shell correction and function approximation*, Atomki Annual Report (2007).
- [6] P. Salamon, T. Vertse, *New simple form for a phenomenological nuclear potential*, Atomki Annual Report (2007).

Előadások (Talks held by the author)

- Salamon P., *Függvénytérképek magfizikai problémákban*, MTA, Budapest, szeptember 15 (2010).
- Salamon P., *Függvénytérképek magfizikai problémákban*, Atomki, EFO, Debrecen, szeptember 10 (2010).
- Salamon P., *Véges hatótávolságú súlyfüggvény alkalmazása a héjkorrekció számításában*, Atomki, EFO, Debrecen, szeptember 15 (2009).
- Salamon P., *Héjkorrekció számítás véges hatótávolságú súlyfüggvénnyel*, Magfizikus Találkozó, Jávorkút, szeptember 3-4 (2009).
- Salamon P., *Függvénytérkép héjkorrekció számításra*, DE Alkalmazott Matematika és Valószínűségszámítás Tanszék, Debrecen, november 13 (2008).
- Salamon P., *Függvénytérkép*, DE Alkalmazott Matematika és Valószínűségszámítás Tanszék, Debrecen, május 11 (2006).

Előkészületben lévő munkák

(Works in progress)

- P. Salamon, A. T. Kruppa, T. Vertse, *Comparison of the new methods for calculating shell corrections*.
- A. Rácz, P. Salamon, T. Vertse, *Trajectories of poles of the S-matrix in the SV potential*.