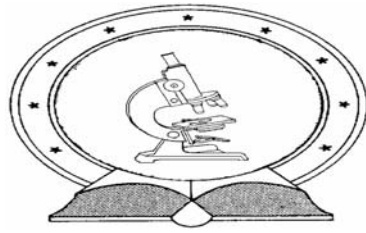


DE TTK



1949

Függvénytájak magfizikai problémákban

Egyetemi doktori (PhD) értekezés

Salamon József Péter

Témavezető: Dr. Vertse Tamás

DEBRECENI EGYETEM

Természettudományok Doktori Tanács

Matematika– és Számítástudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2011

Ezen értekezést a Debreceni Egyetem Matematika- és Számítástudományok Doktori Iskola Valószínűségelmélet, matematikai statisztika és alkalmazott matematika programja keretében készítettem 2004–2011 között és ezúton benyújtom a Debreceni Egyetem doktori PhD fokozatának elnyerése céljából. Kijelentem, hogy ezt a Doktori értekezést magam készítettem és abban csak a megadott forrásokat használtam fel.

Debrecen, 2011. május 2.

.....
Salamon József Péter
jelölt

Tanúsítom, hogy Salamon József Péter doktorjelölt 2004–2011 között a fent megnevezett Doktori Iskola Valószínűségelmélet, matematikai statisztika és alkalmazott matematika programja keretében irányításommal végezte munkáját. Az értekezésben foglaltak a jelölt önálló munkáján alapulnak, az eredményekhez önálló alkotó tevékenységével meghatározóan hozzájárult. Az értekezés elfogadását javaslom.

Debrecen, 2011. május 2.

.....
Dr. Vertse Tamás
témavezető

**Függvénytérképek
matematikai problémákban**

Értekezés a doktori (PhD) fokozat megszerzése érdekében
a matematika tudományágban

Írta: Salamon József Péter okleveles matematikus

Készült a Debreceni Egyetem Matematika- és Számítástudományok Doktori
Iskolája (Valószínűségelmélet, matematikai statisztika és
alkalmazott matematika programja) keretében

Témavezető: Dr. Vertse Tamás

A doktori szigorlati bizottság:

elnök: Dr. Nagy Péter

tagok: Dr. Pintér Ákos

Dr. Gát György

A doktori szigorlat időpontja: 2010. május 27.

Az értekezés bírálói:

Dr.

Dr.

Dr.

A bírálóbizottság:

elnök: Dr.

tagok: Dr.

Dr.

Dr.

Dr.

Az értekezés védésének időpontja: 20... ..

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm a támogatást mindazoknak, akik segítettek abban, hogy ez a Disszertáció elkészüljön.

Elsősorban témavezetőmnek és mentoromnak Vertse Tamásnak, aki az MTA doktora, az MTA Atommagkutató Intézete Elméleti Fizikai Osztályának munkatársa és Debreceni Egyetem professzora, aki idejét és energiáit nem kímélve támogatott mindenben.

Kruppa Andrásnak, aki az MTA doktora, az MTA Atommagkutató Intézete Elméleti Fizikai Osztályának vezetője, akinek a közös cikkeken túl, a szakmai beszélgetésekért és a Disszertációm folyamatos alakításában nyújtott támogatásáért is hálás vagyok.

Köszönöm, hogy az MTA Atommagkutató Intézete Elméleti Fizikai Osztályán olyan motiváló környezetben dolgozhattam, ami nagyban segítette munkámat.

Külön köszönet azon szakmai és privát olvasóknak akik építő javaslataikkal segítettek: Mezei Zsolt, Vértesi Tamás, Salamon Józsefné, Bene Imréné.

Köszönet illeti családtagjaimat és barátaimat, akik mellettem állnak.

Végül, de nem utolsó sorban feleségemnek Áginak és első gyermekünknek Leának, aki együtt fejlődött az anyaméhben ezzel a Disszertációval.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Az atommag modelljeiről	7
2.1. A mag folyadékcsépp modellje	8
2.2. Az egyrészcsekkés héjmodell	9
2.3. Az egyrészcsecke Hamilton-operátor kötött sajátértékeinek numerikus meghatározása	18
2.3.1. A radiális egyenlet megoldása direkt numerikus integrálással	18
2.3.2. Az egyrészcsecke Hamilton-operátor mátrixának diagonalizálása	19
3. A mag héjszerkezete, a mágikus számok	21
4. A mikroszkopikus-makroszkopikus modell	25
5. Héjkorrekció számítási módszerek	35
5.1. Hagyományos és általánosított Strutinsky-módszer alkalmazása folytonos tartományt is tartalmazó spektrumok esetére	35
5.2. Új simító eljárás a nívósűrűségre	39
5.3. Az új nívósűrűség-simító eljárás alkalmazása	43
5.4. Új görbületkorrekciós módszerek	49
5.4.1. Görbületkorrekció	50
5.4.2. Hagyományos görbületkorrekciós módszerek	50
5.4.3. Görbületkorrekció több szélességgel	51
5.4.4. Derivált görbületkorrekció	53

5.5. Az új görbületkorrekciós módszerek alkalmazásai	55
6. Egy új, fenomenologikus magpotenciál	63
6.1. További vizsgálatok	70
7. Összefoglalás	73

1. fejezet

Bevezetés

Munkámat az MTA Atommagkutató Intézetében, az Elméleti Fizikai Osztályon végeztem. Kutatásaim az ott folyó elméleti magfizikai vizsgálatokhoz kapcsolódó alkalmazott matematikai, valamint számítógép programozási kutatások, amelyekben az a közös, hogy különféle függvények simításának feladatát kell megoldani.

A távközlésben nagyon fontos feladat az átvinni kívánt jeleknek a ráarakódó 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. 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, amelyektől a függvényünket meg kívánjuk szabadítani, nem véletlen eredetűek, hanem jól meghatározott okból vannak jelen. Ez a tulajdonság segítségünkre lehet a megfelelő eljárás megtalálásában.

Vizsgálataim egyik része, az ún. héjkorrekció számítás. A dolgozatomban szereplő vizsgálatokban az egyszerű egyrészcskés héjmodellben fogok dolgozni, és az átlagpotenciálról fel fogjuk használni a magfizikában összegyűlt ismereteket. A $v_N(r)$ magpotenciálra egyszerű matematikai alakú, ún. *fenomenologikus* függvényformákat fogunk használni. Az egyrészcské Hamilton-operátor sajátérték-problémája megoldásaként a kötött állapotokra diszkrét energiaspektrumot kapunk. A héjkorrekció meghatározásához a diszkrét spektrumot megfelelő módon kell kisimítani. Dolgozatom első része a spektrum-

simítás részleteivel foglalkozik. Megmutatjuk, hogy a spektrum kisimítására az általunk bevezetett véges hatótávolságú súlyfüggvény sok szempontból előnyösebben használható, mint a korábban a Strutinsky-féle héjkorrekció számítására használt Gauss-függvény.

Vizsgálataim második része azzal foglalkozik, hogy hogyan lehet egy matematikai szempontból az eddig használtaknál kedvezőbb függvényformájú $v_N(r)$ egyrészecske-potenciált előállítani. Az általunk javasolt új egyrészecske-potenciál alakja ugyanabból a véges hatótávolságú súlyfüggvényből származik, amit az egyrészecske-spektrum alkalmas simítására használtunk. Az új fenomenologikus potenciálalak tehát az eddig használt, szakadással rendelkező (azaz nem folytonos) forma kisimításának tekinthető.

A felsorolt vizsgálatok időszerűsége a magfizikus olvasók számára nem szorul bővebb magyarázatra. Mivel azonban dolgozatom a *Matematika- és Számítástudományok* Doktori Iskolában kerül beadásra, egy szélesebb kitekintés úgy gondolom, hasznos lehet.

A stabilitási völgy aljától távol eső magokat kiterjedten tanulmányozzák különböző, radioaktív nyalábok előállítására képes laboratóriumokban. Ezen kutatások egyik eredménye az egzotikus könnyű magok előállítása. Ezek a magok a nukleonelhullatási vonal közelében helyezkednek el, és előállításukra a radioaktív nyalábok megjelenése nyújt lehetőséget. Az elhullatási vonalak pontos helyzete kijelöli azt a magtartományt, amelyre a kísérleti és elméleti kutatást érdemes összpontosítani. Az elhullatási vonalak elméleti meghatározása tömeg (kötési energia) számításokon alapul.

Az atommagok tömege, vagyis az energiája nagyon fontos alapmennyiség. Például az elhullatási vonalak mentén a héjszerkezet változása, vagy az eddig ismert legnagyobb magtömegén túli új mágikus számok létezése is tanulmányozható tömegmérés segítségével. Fontos alkalmazás lehet még egy adott rendszer bomlási módjainak, vagy egy reakció energiakibocsátásának a meghatározása. A tömegértékek az atomfizika, az asztrofizika és a részecskefizika számára is fontosak.

Az utóbbi években a tömegmérések pontossága drámai módon fejlődött és lehetővé vált rövid életű atommagok tömegének mérése is [1, 2]. Kísérletileg meghatározott, nagyon pontos tömegértékek mára már elérhetők a periódusos rendszer szinte minden elemére, ezért nagy a készletés a jó elméleti leírás megalkotására.

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 figyelembe-

veszi, hogy az atommag nukleonokból álló mikroszkopikus rendszer, aminek a helyes leírása a kvantummechanika keretében történik. Manapság kiterjedten használják a Monte-Carlo-héjmodellt [3], és egyre terjed a modellfüggetlen alak-analízis módszere (*pattern recognition*) is [4]. 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 [5] felhasználásával kapott RMS hiba (négyzetes középben vett eltérés) 674 keV-nek adódott [2].

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 [2], 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. Ezt a fogalmat Strutinsky vezette be a 60-as években [6,7], és a mai napig használják. Egy, a közelmúltban elvégzett globális tömegszámítás esetében [8] a héjkorrekcióhoz a simított nívósűrűséget (amely a számítás legfontosabb eleme) a szemiklasszikus Wigner–Kirkwood módszerrel számították ki, a Strutinsky-módszer más elemeit pedig változtatás nélkül alkalmazták.

A héjkorrekciós módszert úgy is általánosították, hogy bizonyos gerjesztett állapotokat is le tudjon írni, pl. a forgó atommagok magas spinű állapotait. A héjkorrekciós módszernek egy másik fontos alkalmazása a maghasadási határok kiszámítása [9–13], ami nagyon fontos számos jelenség, pl. a stabil szupernehéz elemek megértéséhez. A héjkorrekciós módszert nemcsak a magfizikában használják, hanem a mezoszkopikus rendszerek leírásainál is. A fémklasztereknek jellegzetes héjszerkezetük van, így ezek a rendszerek ideális terepei a héjkorrekciós módszer alkalmazásának [14–16].

A héjkorrekció bevezetése óta az eredeti módszeren számos alkalommal finomítottak. Az eredeti energiaátlagoláson kívül részecskeszám-tér fölötti átlagolást is bevezettek [17,18], illetve a két tér fölötti átlagolás kombinálásának lehetőségét is megvizsgálták [19]. A részecske-átlagteret leíró harmonikus oszcillátor potenciált, vagy a Nilsson-potenciált felváltotta egy realiztikusabb fenomenologikus potenciál, amelynek spektruma a diszkrét egyrészecske-energiák

mellett folytonos tartományt (kontinuumot) is tartalmaz. A spektrum kontinuum tartománya miatt a nívósűrűség kezelése régóta problémát jelentett [20, 21], ennek megoldására azonban Kruppának sikerült egy elegáns megoldást találnia [22].

Vertsének és munkatársainak az általánosított Strutinsky-módszer bevezetésével [23, 24] a simítási módszer technikai paramétereinek választásából adódó bizonytalanságot sikerült jórészt megszüntetnie. Ez lehetővé tette a héjkorrekció megbízható kiszámítását középnehéz és nehéz magok esetére, ahol a simított nívósűrűség energiafüggése hosszú intervallumon lineáris. Könnyebb magok esetén ez a lineáris régió rövidebb, mivel a betöltött héjak száma kevesebb, és a héjak közötti távolság nagyobb. Könnyű magok esetén az intervallum alsó és felső végei elrontják a linearitást, vagyis a módszer ilyen esetekben nem alkalmazható.

Jelen munka egyik célja egy olyan új módszer bemutatása, amely mentes ettől a korlátozástól, és a teljes neutron-proton síkon (N - Z síkon) alkalmazható, még az elhullatási vonalak közelében is. Ennek érdekében bevezetünk egy olyan simítási eljárást, amely az eddig a Strutinsky-módszerben alkalmazott Gauss-féle súlyfüggvénnyel ellentétben csak véges tartományon hat. Az új módszer leírása az 5.2. részben, annak alkalmazása pedig az 5.3. részben található.

Héjkorrekciós vizsgálatoknál az alapfogalmaink a kvantumozott egyrészecske-nívósűrűség (*single-particle level density*) (SPLD) és a simított SPLD. A kvantumozott SPLD az egyrészecske-energiákra centráltné Dirac-delta függvények összege. A simított SPLD pedig egy szingularitásmentes sima függvény. Ezt a függvényt akár szemiklasszikus módszerek segítségével is meg lehet határozni [25]. A [8, 21] munkákban pl. a héjkorrekciós számításokat a szemiklasszikus Wigner–Kirkwood módszerrel végezték. A simított SPLD-t meg lehet határozni úgy, hogy csak az egyrészecske-energiákat használjuk fel. Ezt a módszert Strutinsky-féle simításnak, vagy hagyományos átlagoló módszernek hívjuk [21]. A Strutinsky-féle [26] és a szemiklasszikus makroszkopikus-mikroszkopikus [8] modellek a simított SPLD számításának módjában térnek el.

A kvantumozott SPLD-nek 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 kvantumozott SPLD-t a súlyfüggvényt tartalmazó simítófüggvénnyel konvolválják [27, 28]. 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.

Ebben a dolgozatban két új, eddig nem használt görbületkorrekciós módszert vezetünk be. Ezek leírásai az 5.4.3., 5.4.4. részekben található, alkalmazásai pedig az 5.5. részben vannak.

Az általunk bevezetett fenomenologikus potenciál leírása és annak alkalmazása a 6. fejezetben található.

A 7. fejezetben összefoglalom dolgozatom legfontosabb eredményeit.

2. fejezet

Az atommag modelljeiről

A fizikában modellekre van szükség ahhoz, hogy a fizikai folyamatok lényegét megérthessük. A vizsgálni kívánt tárgy mérete szerint azonban a világot ketté kell osztanunk. A nagy, szemmel látható tárgyak, az ún. makroszkopikus tárgyak mozgását a klasszikus mechanika írja le, a nagyon kicsiny tárgyak mozgásának leírására a kvantummechanika alkalmas. A molekulák, atomok, atommagok a mikrovilág objektumai, tehát ezek megfelelő leírása a kvantummechanika segítségével történhet. Ez azonban nem jelenti azt, hogy a mikroszkopikus objektumoknak bizonyos tulajdonságait ne lehetne esetleg egyszerű makroszkopikus modellekkel leírni. A későbbiekben látni fogunk példát ilyen modell alkalmazására.

A leglényegesebb különbség a klasszikus mechanikai és a kvantummechanikai leírás között az, hogy míg a klasszikus mechanikában a fizikai mennyiségeket általában folytonos és differenciálható függvényekkel írjuk le, addig a kvantummechanikában a fizikai mennyiségekhez operátorokat rendelünk. A fizikai állapotokat pedig állapotfüggvények (hullámfüggvények) írják le. Az operátoros leírás módja következménye, hogy a fizikai mennyiségek sokszor csak diszkrét értékekkel rendelkeznek. A diszkrét állapotokat az illető operátor sajátértékei és a hozzájuk tartozó sajátfüggvények jellemzik.

A dolgozatomban szereplő munkákban az energiához tartozó operátornak, az ún. Hamilton-operátornak lesz kiemelt jelentősége. A klasszikus mechanikában a test teljes energiája általában a mozgási, vagyis kinetikus energiából és a testnek a helyzeti (potenciális) energiájából áll össze. A kvantummechanikában is hasonló a helyzet, a H Hamilton-operátor a K kinetikus energiaoperátor és

a V potenciális energiaoperátor (röviden potenciál) összege:

$$H = K + V . \quad (2.0.1)$$

Tekintsünk most egy atommagot, s legyen a (2.0.1) egyenletbeli Hamilton-operátor ennek az energiaoperátora, és a ψ függvény az állapotfüggvénye. Ha megmérjük a mag energiáját, akkor annak E energiája a

$$H\psi = E\psi \quad (2.0.2)$$

energiasajátérték-egyenlet sajátértéke, a ψ függvény pedig az ehhez a sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye lesz. Az atommag neutronokból és protonokból, közös néven nukleonokból álló kötött rendszer. Ha az atommag ún. kötött állapotban van, vagyis egyetlen nukleonja sem hagyhatja el a magot, akkor állapotának E energiája negatív, és a ψ állapotfüggvénye négyzetesen integrálható függvény. A kötött állapotú hullámfüggvényeket egyre normáljuk. Az atommagban lévő neutronok számát általában N -nel, a protonok számát pedig Z -vel jelöljük. Ez a Z az atommagból és a hozzátartozó elektronokból álló atom rendszáma, tehát Z -től függ, hogy milyen elemről van szó. A magot alkotó nukleonok száma, a mag tömegszáma:

$$A = N + Z . \quad (2.0.3)$$

Az atommag A darab nukleonból álló rendszer, aminek a teljes kvantummechanikai leírásához az A -test problémát kellene megoldanunk. Ez még ma is többnyire megoldhatatlan feladat, hiszen az A darab nukleonnak a többi $(A - 1)$ darab nukleonnal való, még nem minden részletében ismert kölcsönhatását kellene figyelembe venni.

2.1. A mag folyadékcsepp modellje

Tudjuk, hogy a mag neutronokból és protonokból álló rendszer, ezért elméletileg a kvantummechanika keretében kellene leírni. A mag bizonyos tulajdonságait azonban egy makroszkopikus modell, a folyadékcsepp modell is le tudja írni. A folyadékcsepp modell hasznos pl. a maghasadás leírásában, de a mag bizonyos gerjesztései is jól megérthetőek olyan analógiák alapján, amelyek a magot éles határvonallal és meghatározott alakkal rendelkező objektumnak tekintik.

A folyadékcsepp modell, vagy cseppmodell arra a hasonlóságra épül, hogy a neutronokból és protonokból álló maganyag állandó sűrűségű, akárcsak egy folyadékcsepp. Ha a magban több nukleonunk van, akkor annak kiterjedése,

térfogata is nagyobb. Ha a mag gömb alakú, akkor az R sugara $A^{1/3}$ -nal arányos, a gömb térfogata pedig ($V = \frac{4\pi R^3}{3}$) A -val arányos.

A folyadékcepp modell talán legnagyobb sikere az ún. fél-empirikus tömegformula bevezetése volt Bethe és Weizsäcker által [29]. A kötési energia ebben a modellben:

$$B(N, Z) = a_V A + a_S A^{2/3} + a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_I \frac{(N - Z)^2}{A} - \delta(A) . \quad (2.1.1)$$

A fél-empirikus tömegformulában az első tag a térfogati tag, ami annak felel meg, hogy a mag térfogata az $A = N + Z$ összes nukleonszámmal arányos. A második tag a felületi tag, ez azt jelenti, hogy a mag felületén lévő nukleonok, mivel nincsenek teljesen körbevéve nukleonokkal, ezért kevésbé járulnak hozzá a mag kötéséhez.

A harmadik tag a protonoktól származó Coulomb-energia tag, ami a magban lévő protonpárok Z^2 számával arányos. A maradék két tag jelentésével itt nem foglalkozunk. A fél-empirikus formulában szereplő a_i , $i \in \{V, S, C, I\}$ együtthatók számértékeit a mért magtömegekhez való (legkisebb négyzetes) illesztésből határozták meg. Mivel az illesztésbe annak idején bevonták az abban az időben ismert valamennyi mag tömegadatát, a fél-empirikus tömegformula meglepően jól becsülte meg valamennyi mag tömegét. (Megjegyezzük, hogy a tömeg és a kötési energia az Einstein-féle tömeg-energia összefüggés $E = mc^2$ alapján könnyen átválthatók egymásba.)

2.2. Az egyrészecskés héjmodell

Az atommagnak egy viszonylag egyszerű mikroszkopikus (tehát kvantummechanikai) modellje az ún. egyrészecské-héjmodell. Ebben a modellben az A nukleonból álló atommagot olyan, meglehetősen durva képben próbáljuk leírni, amiben feltesszük, hogy a magbéli nukleon mozgása leírható egyetlen, a többi nukleon hatását közelítő átlagos $v(\vec{r})$ potenciállal, ahol \vec{r} a nukleon helyvektora. Ennek megfelelően a nukleon mozgását a

$$h = t + v(\vec{r}) \quad (2.2.1)$$

egyrészecské Hamilton-operátor szabja meg, és a mozgást ennek a

$$h\phi = \epsilon\phi \quad (2.2.2)$$

sajátérték-egyenlete szabályozza. Most a kisbetűk az egyrészecske-operátorokat és sajátértékeket jelölik, tehát t jelöli az egyrészecskés kinetikus energiaoperátort, ami a

$$t = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta \quad (2.2.3)$$

alakú differenciáloperátor a Δ Laplace-operátorral kifejezve. Az arányossági tényező a \hbar Plank-állandót és a részecske μ redukált tömegét tartalmazza.

Ha a nukleon töltött, tehát egy proton mozgását akarjuk meghatározni, akkor annak e töltése miatt hat rá a magban lévő többi proton Coulomb-taszítása is, ezért a proton egyrészecske Hamilton-operátora:

$$h = t + v(\vec{r}) = t + v_N(\vec{r}) + v_C(\vec{r}) , \quad (2.2.4)$$

ahol $v_N(\vec{r})$ a protonra ható nukleáris potenciált, $v_C(\vec{r})$ pedig a protonra ható Coulomb-potenciált jelöli. Mivel neutronra nincs Coulomb-taszítás, ezért a (2.2.4) egyenletben $v(\vec{r}) = v_N(\vec{r})$.

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy olyan magokkal foglalkozunk, amelyek jó közelítéssel gömbszimmetrikusnak tekinthetők. Ebben az esetben a $v(\vec{r})$ magpotenciál is gömbszimmetrikus, vagyis csak az \vec{r} vektor $r = |\vec{r}|$ hosszától függ, irányától nem. Ez lényegesen leegyszerűsíti az egyrészecskés Hamilton-operátor (2.2.2) egyenletbeli sajátérték-problémájának a megoldását, amennyiben közönséges differenciálegyenlet sajátérték-problémáját kell megoldanunk az eredeti parciális differenciálegyenleté helyett. A t kinetikus energia operátora a Laplace-operátorral fejezhető ki. Ennek formája az x, y, z Descartes-koordinátákban:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} . \quad (2.2.5)$$

A gömbszimmetrikus potenciál esetén célszerű áttérni az x, y, z Descartes-koordinátákról az r, θ, χ polárkoordinátákra az

$$x = r \sin(\theta) \cos(\chi), \quad y = r \sin(\theta) \sin(\chi), \quad z = r \cos(\theta) \quad (2.2.6)$$

transzformációval. Ekkor a Laplace-operátor

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \right) \quad (2.2.7)$$

polárkoordinátás alakja, a (2.2.2) egyenletbeli egyrészecskés Hamilton-operátor sajátérték-egyenlete pedig

$$\left[-\Delta + \frac{2\mu}{\hbar^2}(v(r) - \epsilon) \right] \psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.2.8)$$

alakban írható.

A (2.2.8) egyenlet megoldását parciális hullámokba való sorfejtéssel keressük. Tehát a megoldás

$$\psi(r, \theta, \chi) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \chi) \quad (2.2.9)$$

alakú lesz, ahol

$$Y_{lm}(\theta, \chi) = \sin^{|m|}(\theta) P_l^m(\cos(\theta)) e^{im\chi} \quad (2.2.10)$$

az ún. gömbfüggvényeket jelöli. Az $R_l(r)$ függvényre pedig a

$$\frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_l(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_l(r) + [k^2 - v(r)] R_l(r) = 0 \quad (2.2.11)$$

közönséges differenciálegyenlet vonatkozik, ahol

$$k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} \epsilon . \quad (2.2.12)$$

A (2.2.11) radiális egyenletet numerikus módszerrel kell megoldani, ha nincs olyan szerencsénk, hogy a választott $v(r)$ potenciál mellett létezik a differenciálegyenletnek analitikus megoldása.

A radiális egyenletből az

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} \quad (2.2.13)$$

helyettesítés után az első derivált eltűnik. Ekkor az $u_l(r)$ függvényre vonatkozó radiális egyenlet a következő lesz:

$$u_l''(r, k) = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - k^2 \right] u_l(r, k) , \quad (2.2.14)$$

ahol ' az r szerinti deriválást jelöli és $V(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} v(r)$ a potenciál k^2 egységben mérve. A differenciálegyenletből látszik, hogy a megoldás függ a k hullámszámtól is. Ezt explicit módon is jelöltük.

A magfizika kezdeti időszakában a számítógépek még lassúak voltak, ezért a magfizikusok előszeretettel használtak olyan magpotenciálokat, amelyekkel a radiális egyenletnek volt analitikus megoldása.

Ilyen potenciál, az ún. négyszögpotenciál, ami állandó a mag belsejében, és nullává válik az R magsugárnál:

$$v_N(r) = -V_0 \begin{cases} 1, & \text{ha } r < R \\ 0, & \text{ha } r \geq R . \end{cases} \quad (2.2.15)$$

Az adott potenciálban a kötött megoldásokat, azok kötési energiáját és hullámfüggvényét a radiális egyenlet megoldására kirótt határfeltételek határozzák meg. Ugyanez vonatkozik a nemkötött, vagyis szórás állapotokra is. Mind a kötött, mind a szórás megoldásoknak az origóban zérusnak, azaz regulárisnak kell lenniük:

$$u_l(0, k) = 0 . \quad (2.2.16)$$

Olyan nagy $r > R_{as}$ távolságoknál, ahol a magpotenciál már zérussá válik, és a radiális egyenletben legfeljebb a

$$v_C(r) = \frac{(Z-1)e^2}{r} \quad (2.2.17)$$

Coulomb-potenciál marad meg, a szórás megoldás $I_l(\eta, \rho)$ befutó és $O_l(\eta, \rho)$ kifutó Coulomb-hullámok lineáris kombinációjába megy át:

$$u_l(r, k) = x_l(k)O_l(\eta, kr) + y_l(k)I_l(\eta, kr) . \quad (2.2.18)$$

Itt $\eta = \frac{Ze^2\mu}{\hbar^2k}$ a Sommerfeld-paraméter (neutronra természetesen $\eta = 0$ veendő), a kifutó(befutó) megoldások pedig $O_l = G_l + iF_l$ ($I_l = G_l - iF_l$), ahol F_l a reguláris, G_l pedig az irreguláris Coulomb-függvény. A reguláris és irreguláris Coulomb-függvények, valamint az azokból képzett $y_l(\eta, \rho)$ lineárkombinációk, a Coulomb-differenciálegyenletnek tesznek eleget, ami a következő:

$$\frac{d^2}{d\rho^2}y_l(\eta, \rho) = \left[\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2\eta k}{\rho} - 1 \right] y_l(\eta, \rho) . \quad (2.2.19)$$

Ennek a $\rho = 0$ pontban zérus megoldása az $F_l(\eta, \rho)$ reguláris Coulomb-függvény, a $G_l(\eta, \rho)$ irreguláris Coulomb-függvény olyan megoldás, aminek a Wronski-determinánsa:

$$W(F, G) = F_l'G_l - F_lG_l' = 1 . \quad (2.2.20)$$

Az $y_l(k)$, $x_l(k)$ lineáris kombinációs együtthatóknak, az ún. Jost-függvényeknek a hányadosa szolgáltatja a parciális szórás mátrixelemet (ami ebben az egyszerű esetben egy 1×1 -es mátrix):

$$S_l(k) = -\frac{x_l(k)}{y_l(k)} , \quad (2.2.21)$$

ami valós k érték mellett unitér:

$$|S_l(k)|^2 = 1 . \quad (2.2.22)$$

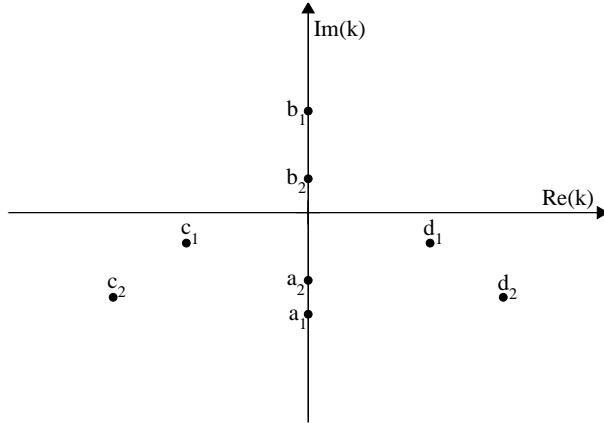
Tehát a szóró mag hatása egy l parciális hullámban aszimptotikusan egy valós $\delta_l(k)$ fáziseltolás megjelenésére redukálódik:

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}. \quad (2.2.23)$$

A kötött megoldást az jellemzi, hogy négyzetesen integrálható a radiális hullámfüggvénye, tehát aszimptotikusan nullához tart. Magreakciókban hasznosnak találták a (2.2.21) egyenletbeli S -mátrixot kiterjeszteni a komplex ϵ energiákra, illetve komplex k hullámszámokra. A komplex síkon az S -mátrixnak pólusai vannak. Ezekben a radiális egyenlet megoldása $y_l(k_n) = 0$ miatt tisztán kifutó. Tehát az $r \geq R_{as}$ tartományban

$$u_{nl}(r, k) = N_{nl} O_l(\eta_n, k_n r), \quad (2.2.24)$$

ahol mind $k_n = i\gamma_n$ ($\gamma_n > 0$), mind η_n tisztán képzetesek, hiszen $\frac{\hbar^2}{2\mu} k_n^2 = e_n < 0$ és $\eta_n = \frac{Ze^2\mu}{\hbar^2 k_n}$. A tisztán kifutó határfeltétel a (2.2.21) egyenletbeli S -mátrixnak a komplex k síkon vett pólusának felel meg, ahol $y_l(k_n) = 0$ és $x_l(k_n) \neq 0$. A kötött állapot (a Gamow-állapotokkal és az antikötött állapotokkal együtt) az S -mátrix pólus-megoldása. A 2.1. ábrán körökkel jeleztük az S -mátrix pólusainak elhelyezkedését egy tipikus esetben.



2.1. ábra. Az S -mátrix pólushelyei a k -síkon. A kötött állapotokat b_1 és b_2 , az antikötött állapotokat a_1 és a_2 , a rezonanciákat d_1 és d_2 , valamint a keletkező állapotokat c_1 és c_2 jelöli.

A radiális függvények aszimptotikus viselkedésének megvilágítására vegyük a legegyszerűbb $\eta = 0$ és $l = 0$ esetet, amikor $O_0(0, \rho) = e^{i\rho}$ és $I_0(0, \rho) = e^{-i\rho}$. Látható, hogy a kötött megoldás aszimptotikusan $e^{-\gamma_n r}$ -el arányos. Az N_{nl} normálási állandót úgy kell meghatározni, hogy a radiális függvény egyre normált legyen:

$$\int_0^\infty |u_{nl}(r, k_n)|^2 dr = 1. \quad (2.2.25)$$

Mivel az r távolság növekedtével az integrandus zérushoz tart, ezért elég egy nagy, véges r_h értékig integrálni, továbbá az abszolút érték jel elhagyható, mert az $u_{nl}(r, k_n)$ függvények valósak:

$$\int_0^{r_h} u_{nl}^2(r, k_n) dr = 1. \quad (2.2.26)$$

A szórás megoldás ezzel szemben aszimptotikusan egy állandó amplitúdójú oszcilláló függvény, hiszen lefutása a $\sin(kr + \delta_0(k))$ függvénnyel arányos. Ha nem szorítkozunk az $\eta = l = 0$ esetre, akkor a szórás megoldás aszimptotikus alakja [30]:

$$u_l(r, k) = -2iy_l(k)e^{i\delta_l} \sin \left[kr - \eta \ln(2kr) - l\frac{\pi}{2} + \delta_l \right]. \quad (2.2.27)$$

A szórás függvényt már nem tudjuk úgy egységre normálni a végtelen r tartományon, mint a kötött állapot megoldást. A szórás függvényekre a Dirac-deltára való normálás a szokásos normaelőírás:

$$\int_0^\infty u_l(r, k)u_l(r, k') dr = \delta(E - E'). \quad (2.2.28)$$

Ez a követelmény rögzíti a (2.2.27) egyenletben szereplő normálási faktor értékét, s ezzel a (2.2.28) egyenletbeli normált szórás függvény aszimptotikus alakja [30]:

$$u_l(r, k) = i \left(\frac{\mu}{2\pi k \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[e^{-i\delta_l} I_l(\eta, kr) - e^{i\delta_l} O_l(\eta, kr) \right]. \quad (2.2.29)$$

A fentiekből látható az egyrészecskés Hamilton-operátor energiaspektruma, ami két részből áll. Negatív energiákon $\epsilon_n < 0$ találjuk a diszkrét energiasajátértékeket, pozitív energiákon pedig az $\epsilon > 0$ kontinuumát a szórás állapotoknak. Ezek a fizikai energiasajátértékek valamennyien a valós energia-tengelyen helyezkednek el. Csak a kötött állapotok rendelkeznek négyzetesen

integrálható hullámfüggvénnyel. Az azonos egyrészecske-potenciált tartalmazó Hamilton-operátor sajátfüggvényei egymásra ortogonálisak, s mivel normálhatók, ortonormált rendszert alkotnak. A négyzögpotenciált tartalmazó egyrészecskes Hamilton-operátor abból a szempontból realiztikus, hogy spektruma diszkrét állapotokat és kontinuumot is tartalmaz. Abból a szempontból is realiztikus, hogy a magpotenciál véges hatótávolságú, tehát megadott távolságon túl nullává válik.

Egy másik, igen gyakran használt modell potenciál a harmonikus oszcillátor (h. o.) potenciál, ami

$$v_N(r) = v_{h.o.}(r) = -V_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] = \frac{\mu}{2} \Omega_0^2 (r^2 - R^2) \quad (2.2.30)$$

alakú. Itt V_0 és R a harmonikus oszcillátor potenciál mélysége és sugara. Ezeket szokás az Ω_0 oszcillátorfrekvenciával és az oszcillátor

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega_0}}, \quad (2.2.31)$$

méretparaméterével jellemezni. A harmonikus oszcillátor energiasajátértékei egymástól egyenlő Ω_0 távolságra vannak, és a következő egyszerű alakúak:

$$\epsilon_N = \hbar\Omega_0 \left(N + \frac{3}{2} \right) - V_0, \quad (2.2.32)$$

ahol $N = 0, 1, 2, \dots$ az oszcillátor kvantumok száma. Az $N = 0$ állapot energiája a legkisebb: $\epsilon_0 = \hbar\Omega_0 \frac{3}{2} - V_0$. A harmonikus oszcillátor spektruma végtelen sok diszkrét állapotot tartalmaz. Kontinuumra nincs, ezért jól használható, ha csak kötött állapotokat akarunk leírni, de nem alkalmas szórásfolyamatok leírására. Az N felírható

$$N = 2n + l \quad (2.2.33)$$

alakban, ahol $l = 0, 1, 2, \dots$ a pálya-impulzusmomentum kvantumszám, $n = 0, 1, 2, \dots$ pedig az ún. radiális kvantumszám, ami a radiális hullámfüggvény zérushelyeinek számát adja meg, az origót nem számítva. Mivel a sajátértékek csak az N értéktől függenek, különböző l értékű pályáknak lehet azonos energiasajátértéke, vagyis az energianívók degeneráltak. Pl. a (2.2.32) egyenletbeli energia $l = N, N - 2, \dots, 1$ vagy 0 értékekhez tartozhat aszerint, hogy N páratlan, vagy páros. A harmonikus oszcillátor sajátfüggvényei a következők:

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{b^3 \Gamma(n + l + 1/2)}} (r/b)^l e^{-\frac{r^2}{2b^2}} L_n^{l+1/2} \left(\frac{r^2}{b^2} \right), \quad (2.2.34)$$

ahol L_n az asszociált Laguerre-polinom [31], ami kifejezhető a H_n Hermite-polinomokkal [32] is, Γ pedig a Gamma-függvényt jelöli.

A klasszikus mechanikában a forgómozgás egyik legfontosabb jellemzője az impulzus-momentum, ami a forgástengelytől a forgó tárgyig mutató \vec{r} vektornak és a forgó tárgy $\vec{p} = m\vec{v}$ impulzusának (lendületének) a vektoriális szorzata:

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] . \quad (2.2.35)$$

A kvantummechanikában ennek megfelelője a pálya-impulzusmomentum vektor operátor \vec{L} , aminek a konkrét formáját a koordináta és az impulzus operátoraiból szerkeszthetjük meg. A nukleonoknak (és más elemi részecskéknek) ezenkívül van ún. saját impulzusmomentumuk, spinjük is, aminek nem tulajdoníthatunk semmiféle klasszikus mozgást. A nukleonok spinjének nagysága $1/2$. A kvantummechanikában az impulzusmomentum sajátértéke kvantált, és a korábban említett Y_{lm} gömbfüggvények az L^2 operátor és annak z -tengelyre való L_z vetületének sajátértékei és sajátfüggvényei a következők:

$$(\vec{L})^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}, \quad \vec{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm} . \quad (2.2.36)$$

Ha nincs spinje a részecskének, akkor az energia sajátállapotot jellemezhetjük az $\epsilon_{n,l}$ energiasajátérték mellett az l és az m kvantumszámokkal is. Az m vetület értéke az $m = l, l-1, 0, -1, \dots, -l$ értékeket, összesen $(2l+1)$ darab értéket vehet fel. Mivel $\epsilon_{n,l}$ m -től nem függ, ezért az energianívó $(2l+1)$ -szeresen degenerált.

A nukleonoknak azonban \hbar egységben mérve $1/2$ nagyságú spinje van. A nukleon teljes impulzusmomentuma a két impulzusmomentum vektor eredője:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (2.2.37)$$

ezért a teljes impulzusmomentum négyzetének és z komponensének a sajátérték-egyenletei a következők:

$$(\vec{J})^2 \mathcal{Y}_{jm_j} = \hbar^2 j(j+1) \mathcal{Y}_{jm_j}, \quad \vec{J}_z \mathcal{Y}_{jm_j} = \hbar m_j \mathcal{Y}_{jm_j}, \quad (2.2.38)$$

ahol \mathcal{Y}_{jm_j} az Y_{lm} és a spin-függvények csatolásával áll elő. A teljes impulzusmomentum lehetséges értékei $j = l+1/2$, vagy $j = l-1/2$ lehet, ha $l \neq 0$. Az $l = 0$ esetben csak $j = 1/2$ lehetséges. Az $l > 0$ esetben a nukleon pályamozgása és a spinjének beállása hatással van annak energiasajátértékére is, ugyanis fellép egy ún. spin-pálya kölcsönhatás. Ez a kölcsönhatás vonzó típusú a $j = l+1/2$ esetben, és taszító a $j = l-1/2$ esetben, emiatt a korábban $\epsilon_{n,l}$ -nél levő energiaszint j értékétől függően lefelé vagy felfelé tolódik. Mivel a j értékei félegészek, vetületének m_j -nek az értékei szintén félegészek lehetnek.

A spin-pálya kölcsönhatás figyelembevétele tette lehetővé, hogy az atommagok héjszerkezetét helyesen sikerült leírni. A spin-pálya kölcsönhatás fenomenologikus alakjával később majd részletesen foglalkozunk. Egyelőre csak annyit mondunk, hogy helyfüggése a realiztikus $v_N(r)$ deriváltjával arányos.

A centrális magpotenciálra (a spin-pálya kölcsönhatás nélkülire) eddig felsorolt r -függés egyike sem kielégítő. A négyzög potenciál nem folytonos az $r = R$ pontban, a harmonikus oszcillátor pedig végtelenhez tart $r \rightarrow \infty$ esetén, s emiatt nincsenek szórási állapotai.

Realisztikus fenomenologikus magpotenciált úgy kaptak, hogy a négyzögpotenciált olyan módon alakították át, hogy ne hirtelen váljék zérussá a magsugárnál, hanem egy véges távolságon következzen be a magpotenciál erősségének lecsökkenése. A (2.2.15) egyenletbeli alak helyett az ún. Woods-Saxon alakot [33] vezették be:

$$v^{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \quad (2.2.39)$$

a centrális potenciálra, és a spin-pálya potenciált ennek a derivált formájával közelítették:

$$v_{so}^{WS}(r) = -\frac{V_{so}}{ra} 2(\vec{l} \cdot \vec{s}) \frac{e^{\frac{r-R}{a}}}{(1 + e^{\frac{r-R}{a}})^2}. \quad (2.2.40)$$

Ez a fenomenologikus magpotenciál mindeddig igen sikeres volt, ezt használták a legtöbb magszerkezet és magreakció számolásban. Van azonban egy szépséghibája, mégpedig az, hogy az átalakítással elrontották a magpotenciál véges hatótávolságát. A (2.2.39) és a (2.2.40) egyenletekben az exponenciális függvény csak $r = \infty$ -ben válik zérussá. Ezért ahhoz, hogy véges r távolságnál lehessen csatlakoztatni a differenciálegyenlet megoldását az aszimptotikus differenciálegyenlet megoldásához, és ezáltal meg lehessen határozni az S -mátrix elemeinek értékét, a fenti végtelen hatótávolságú formákat véges R_{max} távolságnál le kellett vágni. A tényleges magfizikai számolásokban nem a (2.2.39) és a (2.2.40) egyenletekben megadott potenciálokat, hanem azok lecsökkentett formáit

$$v_{tr}^{WS}(r) = \begin{cases} v^{WS}(r), & \text{ha } r < R_{max} \\ 0, & \text{ha } r \geq R_{max} \end{cases} \quad (2.2.41)$$

használgják. Az $r = R_{max}$ -nál bevezetett éles levágás miatt a $\frac{dv_{tr}^{WS}}{dr}(r)$ derivált nem létezik az $r = R_{max}$ pontban. Hasonló levágást kell bevezetni a $v_{so}^{tr}(r)$ spin-pálya potenciálra is azért, hogy a fenomenologikus magpotenciál

$r \geq R_{max}$ tartományban egzaktul zérus legyen, és a radiális egyenlet megoldását ebben a tartományban csatlakoztatni lehessen a (2.2.19) aszimptotikus differenciálegyenlet megoldásához.

A gyakorlati számításokban a magfizikusok elég nagy $R_{max} = 15 - 20$ fm értékeket használnak, ahol a magpotenciál már olyan kicsi, hogy úgy gondolják, nyugodtan nullának vehetik. Matematikai szempontból azonban ez nem elegáns megoldás. Később látni fogjuk, hogy a komplex síkon vett rezonanciák számolásánál az R_{max} pontos értékének nagy jelentősége is lehet. Egyelőre azonban megelégszünk a (2.2.41) egyenletbeli centrális potenciállal és az ehhez hasonló módon levágott spin-pálya potenciállal. A radiális egyenlet kötött sajátenergiáit ezek használatával számítjuk. A kötött egyrészecske-állapotok sajátértékeinek meghatározásával a következő részben foglalkozunk.

2.3. Az egyrészecske Hamilton-operátor kötött sajátértékeinek numerikus meghatározása

Mivel a realisztikus potenciált tartalmazó Hamilton-operátorokkal a radiális egyenlet általában nem oldható meg analitikusan, ezért numerikusan kell megoldani, ami gömbszimmetrikus potenciál esetén a (2.2.14) egyenletben adott közönséges differenciálegyenlet lesz. Egy ilyen differenciálegyenlet sajátérték-problémáját numerikusan is többféle módon oldhatjuk meg. Az egyik módszer a differenciálegyenlet direkt numerikus integrálásával való megoldás. Egy másik módszer az, hogy a Hamilton-operátor mátrixát számítjuk egy véges számú függvényrendszeren, majd a mátrix diagonalizálásával meghatározzuk annak sajátértékeit és sajátfüggvényeit sorfejtett formában. A direkt numerikus integrálással (DNI) az adott sajátértékeket és a hozzájuk tartozó sajátfüggvényeket egyenként határozzuk meg, és ekkor az $u_i(k, r)$ sajátfüggvények számértékeit az r változó valamilyen osztáspontjaiban közvetlenül megkapjuk. A mátrixdiagonalizálással való megoldásnál egyszerre kapjuk az egyrészecske Hamilton-operátornak az adott l, j parciális hullámban lévő valamennyi kötött sajátértékét, a sajátfüggvényeknek azonban csak az adott bázison való sorfejtési együtthatóit kapjuk, amiből a radiális hullámfüggvényt még további számolással lehet kiszámítani. A továbbiakban áttekintjük az említett módszereket.

2.3.1. A radiális egyenlet megoldása direkt numerikus integrálással

A radiális egyenletnek az origóban reguláris, tehát a (2.2.16) egyenletbeli határfeltételt kielégítő megoldásait kell megkeresnünk a DNI módszerével. Említettük, hogy a kötött állapotok azok, amelyeknél aszimptotikusan, tehát a magpotenciál véges hatótávolságán kívül a megoldásfüggvény a (2.2.24) egyenletet kielégítő, tehát tisztán kifutó aszimptotikájú, négyzetesen integrálható függvény. Mivel a számítás elkezdésekor nem ismerjük a keresett ϵ_i sajátértéket, ezért valamilyen kezdőértékből kiindulva iterációkkal közelítünk a keresett sajátértékhez. Mivel egyetlen sajátértéket keresünk az l, j parciális hullámban, ezért az $u_{nlj} = u_i$ állapot alsó indexeit egyelőre elhagyjuk. Az egyes iterációk során egy u_B belső és egy u_K külső megoldását állítjuk elő a (2.2.14) differenciálegyenletnek. A belső megoldást az $r \in [0, r_{match}]$ intervallumban számoljuk és ez egy olyan kezdetiérték-probléma megoldása, ami az origóbeli kezdeti feltételt elégíti ki, ami $r \rightarrow 0$ esetén megközelítőleg

$$u_B(r, k) = r^{l+1}, \quad u'_B(r, k) = (l+1)r^l \quad (2.3.1)$$

alakú. Az r_{match} illesztési sugár valahol a $[0, R_{as}]$ intervallum belsejében van, itt R_{as} az a távolság, ahol már a differenciálegyenlet aszimptotikus formája teljesül, tehát a magpotenciálok nullák. Egy másik kezdetiérték-probléma az, ami a radiális egyenletet az R_{as} távolságtól indulva befelé való integrálással oldja meg. Tudjuk, hogy R_{as} -ban a megoldás a (2.2.24) egyenletbeli megoldás, és ennek deriváltja is megadható. Az $u_K(r, k)$ külső megoldást az $r \in [r_{match}, R_{as}]$ intervallumon számoljuk. A $k_i = i\gamma_i$ saját hullámszám, aminek négyzete az energiasajátérték lesz, az ún. logaritmikus deriváltak különbségeként adódó függvénynek

$$L(k) = \frac{u'_B(r_{match}, k)}{u_B(r_{match}, k)} - \frac{u'_K(r_{match}, k)}{u_K(r_{match}, k)} \quad (2.3.2)$$

a zérushelye, tehát az a k_i , aminél

$$L(k_i) = 0. \quad (2.3.3)$$

A Vertse és munkatársai által írt GAMOW program [34] a vázolt módszer alapján határozza meg a sajátérték-probléma DNI-val való megoldását.

2.3.2. Az egyrészecske Hamilton-operátor mátrixának diagonalizálása

Vegyünk m darab φ_i lineárisan független bázisfüggvényt, amelyek külön-külön is eleget tesznek a határfeltételeknek. (Ha $m \rightarrow \infty$, a Ritz-módszer [35] ekvivalens a Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásával.) A keresett hullámfüggvény felírható, mint ezen bázisfüggvények lineáris kombinációja:

$$\Psi = \sum_{i=1}^m c_i \varphi_i . \quad (2.3.4)$$

A c_i együtthatókat úgy határozzuk meg, hogy az

$$E = \frac{\int \Psi^* h \Psi dv}{\int \Psi^* \Psi dv} \quad (2.3.5)$$

Rayleigh-hányados minimális legyen. Ebből a feltételből azt kapjuk, hogy

$$\sum_{j=1}^m (H_{ij} - ES_{ij})c_j = 0 , \quad (2.3.6)$$

ahol

$$H_{ij} = \int \varphi_i^* h \varphi_j dv, \quad S_{ij} = \int \varphi_i^* \varphi_j dv . \quad (2.3.7)$$

Láthatjuk, hogy a (2.3.6) egyenlet általánosított sajátérték-probléma. Ha a φ_i függvényeknek a (2.2.34) egyenletbeli $R_{n,l}$ harmonikus oszcillátor függvényeket választjuk, akkor

$$S_{ij} = \delta_{ij} . \quad (2.3.8)$$

A H_{ij} mátrixelemek kiszámítása numerikusan a Gauss–Laguerre kvadratúra segítségével történik [36].

3. fejezet

A mag héjszerkezete, a mágikus számok

Térjünk most vissza az egyrészecskes héjmodellre és tegyük fel, hogy meghatároztuk és nagyság szerint sorbarendeztük a sajátértékként kapott e_{nlj} egyrészecske-energiákat. A legmélyebben fekvő ezek közül az $n = 1, l = 0, j = 1/2$ megoldás lesz, amit a magfizikusok $1s_{1/2}$ pályának jelölnek. Történeti okokból az $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ pályákat rendre az $s, p, d, f, g, h, i, j, k, l$ betűkkel jelölik. A pálya megadásához az n, l, j kvantumszámokat rendelik. Az n csomópont számolása $n = 1$ -től kezdődik, mivel az origót is csomópontnak számoljuk.

A gömbszimmetrikus potenciálban az egyes nívók $(2j + 1)$ -szeresen degeneráltak, mivel az energia független a j m_j vetületétől ($m_j = -j, -j + 1, \dots, j$). Egy adott e_{nlj} energianívóra $(2j + 1)$ darab neutron vagy ugyanannyi protont helyezhetünk el attól függően, hogy az energiasajátérték számolásánál figyelembe vettük-e a Coulomb-potenciált. Deformált héjmodellben az egyrészecske-energiák nem az l és j kvantumszámoktól függenek és a degeneráció foka is megváltozik. Az általánosság kedvéért a továbbiakban jelöljük az egyrészecske-energiát e_i -vel és a degeneráció fokát d_i -vel.

Az energianívók betöltését alulról felfelé végezzük, mert alapállapotban a rendszer a legmélyebben kötött formát keresi. Tegyük fel, hogy a neutronok esetével foglalkozunk, tehát nincs Coulomb-potenciál az egyrészecske Hamilton-operátorban.

Az e_i egyrészecske-energiák ismeretében az N neutronot tartalmazó atommag

teljes energiájának azt a részét, ami a neutronoktól származik, a következő formulával kaphatjuk meg:

$$E_{sp} = \sum_{i=1}^N e'_i . \quad (3.0.1)$$

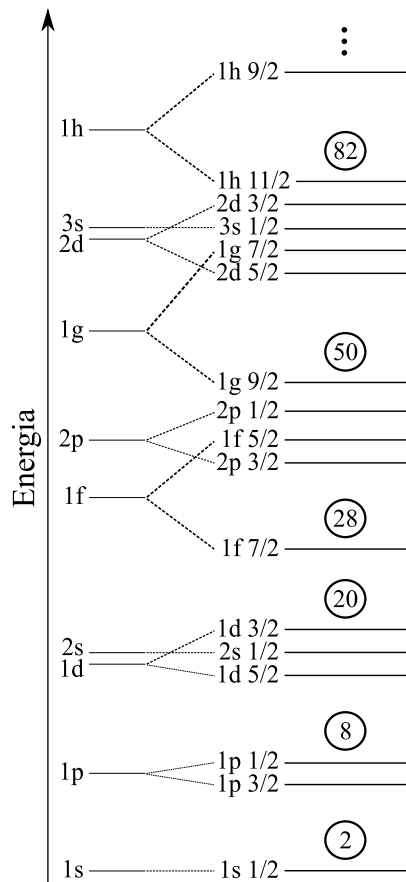
Az új $\{e'_i\}$ energiasorozat, ami az i -edik neutron energiáját jelöli az $\{e_i\}$ nívóenergia-sorozatból származik oly módon, hogy az e_i sajátértékeket d_i -szer megismételjük. Az E_{sp} energiát a későbbiekben teljes egyrészecske-energiának fogjuk nevezni. A legutolsó betöltött egyrészecske-nívó energiája a λ Fermi-szint definíciójának is tekinthető. Az e_i egyrészecske-nívók tipikus elhelyezkedését a 3.1. ábra jobb oldalán mutatjuk be. Az ábra bal oldali nívói, a spin-pálya kölcsönhatás nélküli esetnek felelnek meg.

Ha meghatároztuk a protonokhoz tartozó egyrészecske-energiákat, akkor ezeket sorbarendezve megkaphatjuk az utolsó betöltött proton nívót, a protonokra vonatkozó Fermi-szintet az előzőekhez hasonlóan kaphatjuk meg, azzal a különbséggel, hogy N helyett a Z protonszámot kell használnunk. Ezután a mag teljes kötési energiáját úgy kapjuk meg, hogy összeadjuk a neutronoktól és a protonoktól származó kötési energia komponenseket:

$$B_{shell}(N, Z) = \sum_{i=1}^N e'_{i,\nu} + \sum_{i=1}^Z e'_{i,\pi} , \quad (3.0.2)$$

ahol $e'_{i,\nu}$ a neutron, $e'_{i,\pi}$ a proton egyrészecske-energiákat jelöli. Sajnos az a tapasztalat, hogy az így számolt kötési energia általában eltér a magok kísérletileg mért kötési energiáitól.

Az atommag e_i energianívói ún. héjakba rendeződnek, ami alatt azt értjük, hogy néhány nívó egész közel van egymáshoz, ezek alkotnak egy héjat, majd egy nagyobb hézag után (*shell gap*) következik a következő nívócsoporthoz, azaz a következő héj. Ha egy adott nukleonhéjat teljesen betöltünk nukleonokkal (neutronokkal és protonokkal), akkor az ennek megfelelő atommag gömbszerű és különösen stabil. Ez abban jelentkezik, hogy ha a $B_{shell}(N, Z)$ függvényt akár az N függvényében, akár a Z függvényében ábrázoljuk, a héjlezárási pontoknál kifejezett minimumokat kapunk (általában az egy nukleonra eső $\frac{B_{shell}(N, Z)}{A}$ kötési energiát szokták ábrázolni). A héjlezárási pontokhoz tartozó nukleonszámok az ún. mágikus számok, melyek a következők: 2, 8, 20, 28, 50, 82 és a 126. Ezek a mágikus számok láthatók bekarikázva a 3.1. ábra jobb oldalán. Az ezeknek megfelelő ún. mágikus atommagok, amelyeknél mind az N , mind a Z mágikusak, a következők: ${}^4\text{He}$ ($N = Z = 2$), ${}^{16}\text{O}$ ($N = Z = 8$), ${}^{40}\text{Ca}$ ($N = Z = 20$), ${}^{48}\text{Ca}$ ($Z = 20, N = 28$), ${}^{100}\text{Sn}$ ($N = Z = 50$), ${}^{132}\text{Sn}$ ($Z = 50, N = 82$),



3.1. ábra. Az atommagok nukleonjainak egyrészesecske-energia nívói a baloldalon csak a pálya-impulzusmomentumot, a jobboldalon pedig a spin-pálya kölcsönhatást is tartalmazó potenciálvölgyben. Jól látható a nívók héjakba rendeződése.

^{208}Pb ($Z = 82, N = 126$). Az egyes pályák (alhéjak) lezáródásakor is jelentkezik hasonló, bár nem annyira szembeötlő tulajdonság, pl. a gömbszimmetria általában ezekre is teljesül. A mágikus számok és a héjszerkezet természetesen a kísérletileg mért kötési energiákban megfigyelt tulajdonság, amit a számolás alkalmasan választott potenciál paraméter értékek mellett ad vissza.

4. fejezet

A mikroszkopikus- makroszkopikus modell

Strutinsky javaslata szerint, a magok alapállapotú kötési energiáját pontosabban lehet meghatározni a mikroszkopikus héjmodell és a makroszkopikus folyadéksepp modell megfelelő összekombinálásával. A cseppmodell jól adja meg a magok átlagos kötési energiáit, azonban nem tud számot adni azokról a héjszerkezettel kapcsolatos változásokról, amit viszont a héjmodell tud megfelelő módon leírni. Kézenfekvőnek látszott tehát összekombinálni a kétféle modellt. Ha a két modell által adott kötési energiákat egyszerűen összeadnánk, akkor nagy hibát követnénk el, mert a kötési energiát nagyrészt duplán számolnánk. A cseppmodell által adott makroszkopikus energiataghoz tehát csak a héjmodellbeli energiának a héjfluktuációk miatti részét, az ún. héjkorrekciót kell hozzáadnunk.

$$B(N, Z) = E_{macr}(N, Z) + \delta E(N, Z) , \quad (4.0.1)$$

ahol $E_{macr}(N, Z)$ a folyadéksepp modellben számolt kötési energia és $\delta E(N, Z)$ a héjkorrekció. Míg $E_{macr}(N, Z)$ sima függvénye az N és Z neutron, illetve protonszámoknak, a $\delta E(N, Z)$ héjkorrekció figyelembe veszi a kötési energiának a héjfluktuációk miatti változását. Strutinsky azt javasolta, hogy a héjkorrekciót a héjmodellben úgy számítsuk ki, hogy a (3.0.2) egyenletben adott teljes kötési energiából vonjuk le annak azt a részét, ami sima függvénye az N és Z neutron,

illetve protonszámoknak, hiszen ez a sima rész már benne van a cseppmodellben számított $E_{macr}(N, Z)$ mennyiségben. Mivel az egyrészecskes héjmodellben a mag teljes kötési energiája a protonokra és a neutronokra külön-külön számított tagok összege, ez a héjkorrekcióra is igaz lesz, tehát a héjkorrekció a protonokra és a neutronokra külön-külön számított héjkorrekciók összegeként írható fel:

$$\delta E(N, Z) = \delta E(N) + \delta E(Z) , \quad (4.0.2)$$

ahol $\delta E(N)$ a neutronokra, $\delta E(Z)$ a protonokra számított héjkorrekció.

Vizsgáljuk meg, hogy hogyan számíthatjuk ki a héjkorrekciókat. Mivel a számítás módja a neutronokra és a protonokra azonos, csupán az egyrészecske-energiák és a részecskék száma lesz esetleg más, ezért a továbbiakban nem fogjuk megkülönböztetni a neutronokat és a protonokat, hanem innentől az N nukleonszám egységesen az N neutronszámot vagy a Z protonszámot fogja jelenteni. A héjkorrekciókat tehát a héjmodellbeli teljes egyrészecske-energia E_{sp} (lásd a (3.0.1) egyenletet) és annak simított megfelelője \tilde{E} különbségeként számíthatjuk:

$$\delta E = E_{sp} - \tilde{E} . \quad (4.0.3)$$

Megjegyezzük, hogy a héjkorrekciónak a (4.0.3) egyenletbeli felírása nem feltétlenül jelenti azt, hogy az egyrészecske-energiákat az egyrészecskes héjmodellben számoltuk, hanem igaz akkor is, ha azok önkonzisztens HF számítás eredményei, amiben természetesen figyelembe van véve a különböző nukleonok közötti kölcsönhatás is. A héjfluktuációk minden mikroszkopikus modellben jelen vannak. A héjkorrekció megkapható például az önkonzisztens HF számítások, vagy a relativisztikus átlagtér számítások egyrészecske-energiáiból [37, 38] is. A [38] munkában pl. relativisztikus modelltől számolt egyrészecske-energiákon alapuló héjkorrekciót használtak fel arra, hogy ezen mikroszkopikus számítások eredményeiből sima kötési energiát kapjanak, és ebből a mikroszkopikusan számított makroszkopikus energiatagok tipikus fenomenologikus parametrizálására javaslatokat adjanak.

Jelen munkában a fenomenologikus magpotenciálbeli egyrészecske-energiák kiszámítására a legegyszerűbb héjmodellt, a független egyrészecske-héjmodellt használjuk. Ezt azért tehetjük meg, mert a simító eljárás helyes működése ennek az egyszerű modellnek az eredményeivel is megfelelően ellenőrizhető.

A héjkorrekció számításánál az \tilde{E} simított energia kulcsfontosságú, ezért ennek kiszámítására egyértelmű meghatározást kell adni. Egyik lehetőség erre az, ha az egyrészecske-nívósűrűséget simítjuk ki. Egy olyan Hamilton-operátornál, aminek csak kötött állapotai vannak, mint pl. a harmonikus oszcillátor, ez a következő módon történhet. Láttuk, hogy gömbszimmetrikus potenciálnál az e_i

nívó degenerációja $d_i = 2j_i + 1$. Megemlítjük, hogy a tengelyszimmetrikusan deformált potenciálban $d_i = 2$. Általánosan a nívók sűrűsége, ami az egységnyi energiaintervallumba eső diszkrét energianívók száma:

$$g(E) = g_d(E) = \sum_i d_i \delta(E - e_i) . \quad (4.0.4)$$

A nívósűrűséget általában $g(E)$ -vel fogjuk jelölni, ha azonban hangsúlyozni akarjuk, hogy ez a sűrűség csak diszkrét nívóktól származik, akkor azt $g_d(E)$ -vel jelöljük.

A nívósűrűség energia szerinti integrálja adja az E energia alatti összes nívók számát:

$$N_d(E) = \int_{-\infty}^E g_d(e) de = \sum_i d_i \Theta(E - e_i) , \quad (4.0.5)$$

ahol $\Theta(x)$ a Heaviside-függvény:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x \leq 0 \\ 1, & \text{ha } x > 0 . \end{cases} \quad (4.0.6)$$

A λ Fermi-szintet az $N_d(\lambda) = N$ implicit egyenletből lehet meghatározni.

A nívósűrűség (4.0.4) egyenletbeli alakjából úgy számíthatjuk ki a $\tilde{g}(E)$ simított nívósűrűséget, ha konvolváljuk azt egy megfelelő módon választott $f(x)$ simító függvénnyel, ami az egyes e_i diszkrét nívók hatását egy bizonyos γ szélességű energiaintervallumra keni szét:

$$\tilde{g}(E) = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\epsilon') f\left(\frac{\epsilon' - E}{\gamma}\right) d\epsilon' . \quad (4.0.7)$$

A (4.0.7) egyenletbeli simított nívósűrűség felhasználásával számítjuk ki az

$$\tilde{E} = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} \epsilon \tilde{g}(\epsilon) d\epsilon \quad (4.0.8)$$

simított energiát. Itt a $\tilde{\lambda}$ simított Fermi-szint abból a feltételből számítható ki, hogy az N részecskeszám (vagyis a protonok, vagy a neutronok száma) az atommagban adott:

$$N = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} \tilde{g}(\epsilon) d\epsilon . \quad (4.0.9)$$

A simított Fermi-szint nem egyezik meg pontosan a simítatlan Fermi-szinttel, mivel a Fermi-szintet a simítási eljárás megváltoztatja. A simított Fermi-szint

a héjmodellbeli λ Fermi-szint közelébe esik. Fontos azonban, hogy értékét pontosan határozzuk meg a (4.0.9) egyenletből, mert a simított energia erősen függ a $\tilde{\lambda}$ pontos értékétől.

A simított nívósűrűség a (4.0.7) egyenletbeli kijelölt konvolúció elvégzése után a

$$\tilde{g}_d(E) = \frac{1}{\gamma} \sum_{i=1}^{N_b} d_i f\left(\frac{E - e_i}{\gamma}\right) \quad (4.0.10)$$

formába írható, ahol N_b a kötött e_i nívók száma. A részecskeszám egyenlet alakja

$$N = \sum_{i=1}^{N_b} d_i \int_{-\infty}^{\nu_i} f(x) dx \quad (4.0.11)$$

lesz, a simított teljes energia pedig a (4.0.8) egyenletbeli kifejezés átalakítása után

$$\tilde{E} = \sum_{i=1}^{N_b} d_i \left(\gamma \int_{-\infty}^{\nu_i} x f(x) dx + e_i \int_{-\infty}^{\nu_i} f(x) dx \right) \quad (4.0.12)$$

lesz, ahol $\nu_i = (\tilde{\lambda} - e_i)/\gamma$.

Strutinsky simítófüggvényként egy

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (4.0.13)$$

Gauss-függvényt használt súlyfüggvénynek, amit megszorozott egy $p > 0$ fokszámú $h_p(x)$ görbületkorrigáló polinommal:

$$f(x) = f_p(x) = w(x) h_p(x) . \quad (4.0.14)$$

A görbületkorrigáló polinom együtthatóit abból a feltételből határozta meg, hogy a simítás nem változtathatja meg a már eleve sima függvényt, tehát ha a simítandó függvény már eleve egy $n \leq p + 1$ fokú $g_n(x)$ polinom, akkor azt a simítás után vissza kell kapnunk. Tehát a simítással teljesülnie kell a

$$g_n(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_n(x') f_p(x - x') dx' , \quad (4.0.15)$$

ún. önkonzisztencia-feltételnek. Megmutatható, hogy Gauss-függvény alakú súlyfüggvényre a (4.0.15) feltételt kielégítő görbületkorrigáló polinomok az asszociált Laguerre-polinomok:

$$h_p(x) = L_{p/2}^{1/2}(x^2) . \quad (4.0.16)$$

A simító függvény ebben az esetben:

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} L_{p/2}^{1/2}(x^2) . \quad (4.0.17)$$

Mivel a Gauss-függvény páros, ezért páros simító függvényt páros p fokszámú görbületkorrigáló polinommal kapunk. Az f simító függvény p indexe a görbületkorrigáló polinom fokszámára utal.

Strutinsky korában a héjkorrekciós módszert általában erősen kötött atommagok kötési energiáinak meghatározására használták, ahol $\lambda \ll 0$ állt fenn. Ezek azok az atommagok, amik a stabilitási völgy fenekének közelében helyezkednek el. Ezen magokra a $v_N(r)$ egyrészezske-potenciál, legalábbis annak belső tartománya kielégítően közelíthető a $v_{h.o.}(r)$ harmonikus oszcillátor potenciállal. Ebben a potenciálban a héjak közötti távolság a következő:

$$\hbar\Omega_0 \approx 41 A^{-1/3} \text{ [MeV]} . \quad (4.0.18)$$

Természetesen az egyszerű harmonikus oszcillátor potenciál héjszerkezetét a spin-pálya kölcsönhatás befolyásolja, azonban a (4.0.18) egyenletbeli becslés még így is elég jó mértéke a héjak távolságának.

Vonzó tulajdonsága ennek a potenciálnak, hogy ha ezt használjuk, akkor az \tilde{E} simított energia és a (4.0.3) egyenletbeli héjkorrekció a γ simítási paraméter meglehetősen széles tartományában kielégíti a *platófeltételt*, azaz széles tartományon teljesül, hogy

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \gamma} \approx 0 , \quad (4.0.19)$$

vagyis az, hogy az \tilde{E} széles γ tartományon független a γ értékétől. Emellett a kisimított energiának a platóhoz tartozó értéke gyakorlatilag független a p fokszámtól, ha $p \geq 6$ értékeket használunk. Mivel a *platófeltétel* teljesül a h. o. potenciálra, a héjkorrekció független a számításához használt γ és p technikai paraméterektől. Ez a vonzó tulajdonsága a h. o. potenciálnak azzal kapcsolatos, hogy a potenciált tartalmazó Hamilton-operátornak csak kötött állapotai vannak. Az olyan potenciálokban, amelyek aszimptotikusan végtelenhez tartanak, mint a h. o. potenciál, vagy a deformált Nilsson-potenciál, mindig találhatunk olyan γ tartományt, amiben a platófeltétel teljesül [20, 28]. Ez azért van, mert ezeknek nincs kontinuumuk csak végtelen sok kötött állapotuk van, és a kötött spektrum végének hatása nem rontja el a simítást.

Egy realisztikusabb magpotenciálnak azonban a negatív energiájú kötött állapotok mellett pozitív energiájú kontinuumuk is van. A kötött állapotok N_b

száma pedig véges. A nívósűrűség ebben az esetben a $g_d(E)$ diszkrét és a $g_c(E)$ kontinuum nívósűrűségek összege:

$$g(E) = g_d(E) + g_c(E) . \quad (4.0.20)$$

Ebből a simított nívósűrűséget a (4.0.7) egyenletben leírt konvolúcióval kell meghatározni.

Köztudott, hogy a kontinuum állapotok jelenléte és a kötött állapotok számának végeessége problémákat okoz a héjkorrekciós módszernél [20, 21]. A (4.0.4) egyenlet a kvantumos SPLD-re csak a kötött állapotok esetét mutatja. A kontinuumot tartalmazó SPLD egzakt formája ismert [20] és alkalmazásra is került a [20, 23] munkákban. A kontinuumot tartalmazó SPLD-t a szórási fázistolás deriváltja segítségével fejezzük ki:

$$g_c(E) = \frac{1}{\pi} \sum_{l,j} (2j+1) \frac{d\delta_{lj}(E)}{dE} , \quad (4.0.21)$$

ahol $\delta_{lj}(E)$ az E energián számolt szórási fáziseltolódás.

A 2.3.2. részben láttuk, hogy a kötött állapotok energiáit általában úgy kapjuk meg, hogy diagonalizáljuk a Hamilton-operátor mátrixát egy megfelelő, négyzetesen integrálható bázison, pl. a h. o. bázison. Egy ilyen bázison azonban nehéz kiszámítani a kontinuum SPLD-t. A probléma megoldására kifejlesztettek egy elegáns módszert [22], majd héjkorrekció számítására is felhasználták [24]. Ebben a módszerben két mátrixdiagonalizálást kell elvégeznünk. Az első a hagyományos diagonalizálás (a Hamilton-operátor mátrixa a szokásos). A második diagonalizálásban a mátrixból kihagyjuk a magköölcsönhatás mátrixelemeit, vagyis csak a kinetikus energia mátrixát diagonalizáljuk ugyanazon a bázison, amin az elsőt diagonalizáltuk. A második diagonalizálás eredményeit $e_i^{(0)}$ -vel jelöljük, a hozzá kapcsolódó degenerációkat pedig $d_i^{(0)}$ -vel. A kontinuumot tartalmazó simított SPLD ekkor

$$\tilde{g}(E) = \frac{1}{\gamma} \sum_i \left(d_i f\left(\frac{E - e_i}{\gamma}\right) - d_i^{(0)} f\left(\frac{E - e_i^{(0)}}{\gamma}\right) \right) , \quad (4.0.22)$$

ahol az i -re vett összegzés minden állapotra kiterjed, amit a diagonalizálásból kaptunk.

Vertse és munkatársai [23] egy *módosított platófeltételt* vezettek be. Ez a *módosított platófeltétel* akkor is jól definiált simított energiát adott, ha a platófeltétel nem teljesült, s emellett ugyanazt a simított energiát

szolgáltatta, mint amit a platófeltétel teljesülésekor lehetett kapni. Ezért a módszert a szerzők *általánosított Strutinsky-módszernek* nevezték. A módosított platófeltétellel kapott simított energia, ha a Fermi-szint a potenciálgát csúcsa alatt maradt, nem tért el nagyon attól az értéktől, amit a Wigner–Kirkwood sorfejtésen alapuló szemiklasszikus átlagolás [28] adott. A Strutinsky-módszer a [23] munkában bevezetett általánosításával úgy látszott, hogy alkalmassá teszi a héjkorrekció meghatározást az újonnan felfedezett gyengén kötött magokra is. Mivel munkánk fontos része az általánosított Strutinsky-módszer kritikája, először összefoglaljuk annak menetét.

Az általánosított Strutinsky-módszerben először meg kell adnunk egy $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ energiatartományt valahol a kötött spektrum közepén, lehetőleg távol annak alsó és felső végétől. A simítás kezdetén kiindulunk olyan γ_0 és $p_{min} > 0$ értékekből, ahol a $\tilde{g}(E, \gamma_0, p_{min})$ függvényben a héjszerkezet még világosan látszik. Majd a γ paramétert növelve, minden egyes γ értéknél kiszámítjuk az $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ intervallumon a hozzá legjobban illeszkedő $y(E) = aE + b$ polinom a , b együtthatóit a

$$\kappa(a, b) = \sum_{i=1}^{n_u} [\tilde{g}(\varepsilon_i, \gamma, p) - b - a\varepsilon_i]^2 \quad (4.0.23)$$

kifejezés minimalizálásával. Ebben a kiválasztott $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ intervallumnak

$$n_u = |\varepsilon_u - \varepsilon_l|/\delta\varepsilon + 1 \quad (4.0.24)$$

ekvidisztáns

$$\varepsilon_i = \varepsilon_l + (i - 1)\delta\varepsilon, \quad i = 1, \dots, n_u \quad (4.0.25)$$

beosztását használjuk. Ezután a γ paraméter függvényében megkeressük a

$$\chi^2(\gamma, p) = \sum_{i=1}^{n_u} [\tilde{g}(\varepsilon_i, \gamma, p) - y(\varepsilon_i)]^2 \quad (4.0.26)$$

függvény első minimumát az előző módon számított a , b együtthatókkal. A választott $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ intervallumnak, amiben a nívósűrűség linearitását megkívánjuk, távol kell lennie a simított spektrum alsó és felső végeitől, ezenkívül hosszának legalább 50%-kal nagyobbak kell lennie, mint a héjak becsült távolsága:

$$\varepsilon_u - \varepsilon_l = 1.5\hbar\Omega_0 . \quad (4.0.27)$$

Noha a (4.0.26) egyenletbeli feltétel egyértelműen megadja az adott p -hez tartozó γ értéket, a [24] munkában azt találták, hogy a (4.0.26) egyenletbeli $\chi^2(\gamma, p)$

függvénynek adott p mellett egynél több minimuma is lehet. Jelöljük ezeket a minimumhelyeket $\gamma_1, \gamma_2, \dots$ módon. Ahhoz, hogy a nívósűrűség túlsimítását elkerüljük, ezek közül a legkisebbet kell választanunk. Tehát az adott p és a $\gamma = \gamma_1$ paraméter mellett számítjuk a (4.0.8) egyenletbeli \tilde{E} és a héjkorrekciónak a (4.0.3) egyenletbeli értékét. Ezt a számítást p értékét kettesével növelgetve addig ismételjük, míg elérjük a megadott p_{max} felső határt.

Mivel a simított energia és a héjkorrekció függ a p értékétől, a p függés erősségét az \tilde{E}_p értékek szórásával jellemezzük. Ezért bevezetjük a simított energiák p szerinti átlagértékét:

$$av(\tilde{E}) = \frac{2}{(p_{max} - p_{min} + 2)} \sum_{p=p_{min}, p_{min}+2, \dots, p_{max}} \tilde{E}_p . \quad (4.0.28)$$

A [23] munkában $p_{min} = 6$ és $p_{max} = 14$ értékeket használtak. A módosított platófeltételt használó Strutinsky-módszerben az eljárás bizonytalanságát az \tilde{E}_p értékek szórása jellemzi:

$$\sigma = \sqrt{\frac{2}{(p_{max} - p_{min} + 2)} \sum_{p=p_{min}, p_{min}+2, \dots, p_{max}} (\tilde{E}_p - av(\tilde{E}))^2} . \quad (4.0.29)$$

Ugyanez a szórása az általánosított Strutinsky-módszerrel számított héjkorrekciónak is. A simított teljes energia átlagának ismeretében a héjkorrekciót tehát a következő módon számítjuk:

$$\delta E = E_{sp} - av(\tilde{E}) . \quad (4.0.30)$$

Ezt a számítási módot követjük az 5.1., 5.2. és az 5.3. fejezetekben leírt vizsgálatok során.

Középnéhez és nehéz atommagoknál, ahol az általánosított Strutinsky-módszer a leginkább alkalmazható, az eljárás bizonytalansága mindig 250 keV alatt volt.

Ahhoz, hogy ilyen kis szórást kapjanak, az egyenesillesztés intervallumát a simított Fermi-szinthez kellett rögzíteni, úgy, hogy az intervallum felső határa $\varepsilon_u = \tilde{\lambda} - \hbar\Omega_0$ legyen, az alsó határ pedig $\varepsilon_l = \varepsilon_u - 1.5\hbar\Omega_0$. Ha az intervallum felső határát $\varepsilon_u = \tilde{\lambda}$ -nak vették és az intervallum hossza változatlanul a (4.0.27) egyenletbeli érték maradt, akkor a héjkorrekció szórása kb. 400 keV-re változott.

A [23] munkában az általánosított Strutinsky-módszer eredményét a szemiklasszikus Wigner–Kirkwood módszerével hasonlították össze.

A két módszer eredményei közötti egyezés általában jó volt. Nagyobb eltérés volt azoknál a neutronokban gazdag magoknál, ahol a neutron Fermi-szint nullához közel esett ($-4 \text{ MeV} < \lambda < 0 \text{ MeV}$). Ennek az az oka, hogy

a Wigner–Kirkwood nívósűrűségnek a potenciálgát tetején szingularitása van. Ezekről az esetektől eltekintve a két módszerrel kapott héjkorrekciók különbsége $\Delta = \delta E - \delta E_{sc}$ általában kicsi, $|\Delta| < 600$ keV. A legnagyobb eltérést (≈ 2 MeV) a ^{122}Zr neutronban gazdag magra kapták.

A [24] munkában Vertse és munkatársai kontinuumot tartalmazó modellben vizsgálták a gömbszimmetrikus és deformált atommagok héjkorrekcióit. Ebben a munkában ismét megfigyelték, hogy a számított héjkorrekció valamennyire függött az $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ intervallum megválasztásától. A függés különösen erős volt könnyű atommagokra, ahol nehéz, vagy esetleg lehetetlen volt az egyenesítésére elég széles intervallumot találni, mert, ha az intervallum vége eléri a spektrum alsó, vagy felső végét, akkor a $\tilde{g}(E)$ függvény nem lehet lineáris.

A jelen munkában az a feladat, hogy egy olyan simítási módszert találjunk, ami kevésbé érzékeny a spektrumvégi hatásokra, de megtartja a módosított platófeltételnél kapott jó tulajdonságokat, nevezetesen azt, hogy a héjkorrekció gyengén függ a p megválasztásától, vagyis σ kicsi és az átlagolt érték közel lesz a Wigner–Kirkwood szemiklasszikus módszerrel számított értékhez ($|\Delta|$ kicsi), ha λ nem esik a küszöb közelébe, ahol a szemiklasszikus módszer elromlik.

5. fejezet

Héjkorrekció számítási módszerek

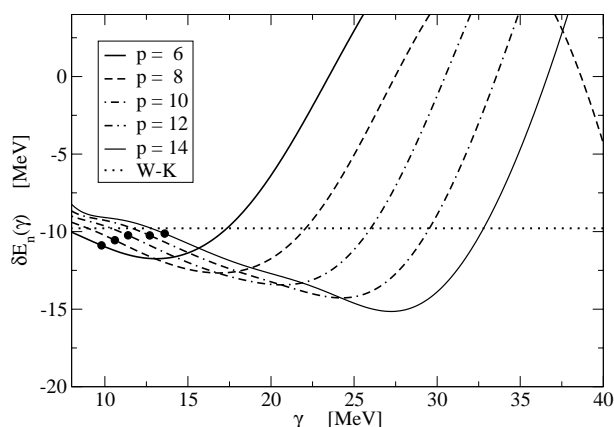
Ebben a fejezetben olyan héjkorrekció számítási módszereket mutatunk be, amelyekben a spektrum folytonos részének a hatását is figyelembe vesszük. A felhasznált simító függvényre különböző formákat használunk. Vizsgálunk olyan módszereket, amelyekben a nívósűrűség simává tételét véges hatótávolságú simító függvénnyel érjük el [39], majd olyat, amelyben a szokásos görbületkorrekciós eljárást újjal helyettesítjük [40]. A különböző módszerek alkalmazását részletesen bemutatjuk. Először azt mutatjuk be, hogy az eddig ismert módszereknek milyen hátrányaik vannak, és azt, hogy miért volt szükség új simítási módszerek keresésére.

5.1. Hagyományos és általánosított Strutinsky-módszer alkalmazása folytonos tartományt is tartalmazó spektrumok esetére

Mint már láttuk, egy, a valósághoz közelebb álló potenciál véges sok $e_i < 0$ kötött állapot mellett kontinuum számosságú, $E > 0$ energiájú szórásállapottal is rendelkezik. A teljes nívósűrűség ebben az esetben a diszkrét $g_d(E)$ nívósűrűség és a szórásállapotokat tartalmazó $g_c(E)$ szórás nívósűrűség összege, lásd a (4.0.20) egyenletet. Brack és Pauli ismerte fel [28], hogy ebben az esetben a platófeltétel nem elégíthető ki, mivel a $\delta E(\gamma, p)$ görbék, az

ún. platógörbék nem rendelkeznek olyan széles platókkal, ahol a (4.0.19) egyenletbeli feltétel teljesülne. Brack és Pauli minden lehetséges p értékre megkeresték a $\delta E(\gamma)$ függvények minimumát, és bevezették a lokális platófeltétel fogalmát. A minimum helyén, vagyis $\gamma = \gamma_p$ -ben a (4.0.19) feltétel természetesen teljesül. A lokális platófeltétel megköveteli továbbá, hogy a $\delta E(\gamma_p, p)$ értékek jó közelítéssel függetlenek legyenek p -től, ami abban az esetben teljesül, ha a $\delta E(\gamma_p, p)$ értékek szórása kicsi.

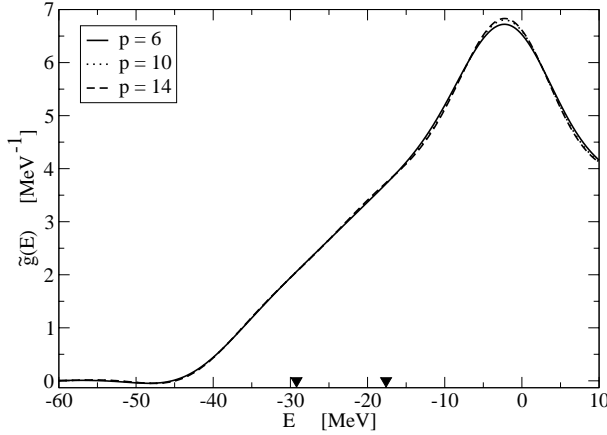
A [23] munkában Vertse és munkatársai megmutatták, hogy a lokális platófeltétel nem minden esetben elégíthető ki, és azt, hogy a standard Strutinsky-módszer által alkalmazott simítási eljárás nem minden esetben szolgáltat jól meghatározott simított energiát. A ^{146}Gd tipikusan olyan mag, amelyre ha a spektrum kontinuum tartományát is figyelembe vesszük, a lokális platófeltétel nem teljesül (lásd az 5.1. ábrát).



5.1. ábra. $\delta E_n(\gamma, p)$ neutron héjkorrekciók a ^{146}Gd magra γ függvényében a $p = 6, \dots, 14$ értékekre Gauss-féle simító függvénnyel. A feltöltött körök az általánosított Strutinsky-módszer eredményét mutatják. A vízszintes pontvonal a szemiklasszikus héjkorrekciót mutatja: $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^n$.

Bár minden egyes platógörbének létezik minimuma, a minimumokhoz tartozó héjkorrekció értékek nagyon különbözőek, tehát rájuk még egy közelítő p -függetlenség sem valósul meg.

Azért, hogy a módosított platófeltétel használatát bemutassuk, az 5.2. ábrán ábrázoltuk a ^{146}Gd mag simított nívósűrűségeit. Annak az $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ intervallumnak a végeit, amelyen belül a $\tilde{g}(E)$ a legkevésbé tér el egy egyenestől, azaz



5.2. ábra. Simított nívósűrűségek ^{146}Gd magra az általánosított Strutinsky-módszerrel $p = 6, 10, 14$ értékekre Gauss-féle simítófüggvénnyel.

a (4.0.26) egyenletbeli χ^2 függvénynek minimuma van, fekete háromszögekkel jelöltük az E tengelyen. Látható, hogy az $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ intervallumon belül a $\tilde{g}(E)$ valóban lineáris függvényként viselkedik és a $\tilde{g}(E)$ görbék p függése gyakorlatilag nem észrevehető. Némi p függés csak $E \approx -10$ MeV környezetében látszik, valamivel a $\tilde{\lambda} \approx -9.8$ MeV érték fölött és magasabb energián az $E = 0$ MeV közeli tartományban. Ezeknek azonban nincs hatásuk a számított héjkorrekcióra. A simított nívósűrűségben az $E = 0$ MeV környezetében látható nagy "hupli" a spektrum felső határának hatása. A spektrum pozitív tartományában csak néhány neutronrezonancia ad járulékot a nívósűrűséghez. A rezonanciák hatását az 5.1. ábrán fekete körökkel jelzett pontok γ_p abszcisszáinak megfelelő simító paraméterek úgy kisimítják, hogy azok hatása még jóval az $E = 0$ MeV küszöb alatt is érezhető. Az alsó határ hatása kevésbé kifejezett, és csak $E < -35$ MeV esetén észlelhető. Itt $\tilde{g}(E)$ E szerinti deriváltja megváltozik és $E < -45$ MeV alatt $\tilde{g}(E)$ egy szakaszon negatívvá válik. $\tilde{g}(E)$ legfontosabb tulajdonsága, hogy a megkövetelt linearitás csak a spektrum alsó és felső határaitól bizonyos távolságra teljesül.

Az 5.1. ábrán látható fekete körök a különböző p értékekhez tartozó görbéken azokat a $(\gamma_p, \delta E_n(\gamma_p, p))$ pontokat mutatják, amelyekhez tartozó γ_p értékeknél a (4.0.26) függvénynek minimuma van. A körök alapján látható, hogy a hozzájuk tartozó héjkorrekció értékek (σ) szórása jóval kisebb, mint

azon értékek szórása, amelyek az adott görbék minimumainál találhatók. Továbbá, a körökkel jelzett $\delta E_n(\gamma_p, p)$ értékek átlaga jó egyezésben van a szemiklasszikus értéket jelentő pontvonallal. A [23] munkában megmutatták, hogy ez a helyzet tipikus, és az általánosított Strutinsky-módszer a Wigner–Kirkwood módszeren [25, 28, 41–45] alapuló szemiklasszikus számításához hasonló eredményeket szolgáltat. Emellett az általánosított Strutinsky-módszer a standard módszerhez hasonló eredményeket szolgáltatott minden olyan esetben, amikor a platófeltétel teljesült, ezért tekinthető ez a módszer az eredeti Strutinsky-módszer általánosításának. Az új módszer azonban még azokban az esetekben (pl. a ^{146}Gd mag esetében) is jól definiált simított energiát szolgáltatott, amikor a lokális platófeltétellel sem kapunk egyértelmű eredményt.

Csak később, a [24] munkában, ahol az általánosított Strutinsky-módszert deformált magokra alkalmazták, derült fény arra, hogy a (4.0.26) egyenletbeli függvénynek γ -ban egynél több minimuma lehet. Arra a következtetésre jutottak, hogy ekkor a kisebb γ értéknél található minimumot célszerű használni. Az általánosított Strutinsky-módszer eredménye kismértékben függ az $[\varepsilon_l, \varepsilon_u]$ intervallum megválasztásától, ami azt kissé bizonytalanná teszi. A középnehéz és nehéz magok esetén ez a bizonytalanság mindig 250 keV alatt maradt. Ezt úgy érték el, hogy az energiaintervallumot, amelyben az elsőfokú polinomot illesztették, a simított Fermi-szinthez állították be, és az intervallum felső határát $\varepsilon_u = \tilde{\lambda} - \hbar\Omega_0$ -nak választották. Ha az intervallum végét $\varepsilon_u = \tilde{\lambda}$ -hoz tolták, a hosszát a (4.0.27) egyenlet alapján változatlanul hagyva a héjkorrekció szórása 400 keV-nek adódott. Ez a bizonytalanság még mindig elég kicsi, és a kapott héjkorrekció hasonlít a szemiklasszikus módszerrel kapott eredményhez.

Könnyű magok esetén az intervallum helyzetétől való függés erősödik. Ahogy az A tömegszám csökken, a héjak energiái közötti távolság nő (közelítően a (4.0.18) egyenletbeli formula írja le), és az intervallum hossza a (4.0.27) egyenletben szintén nő. A héjfluktuációk kisimításához egyre nagyobb γ értékre van szükség. Másrészt, az a tartomány, ahol $\tilde{g}(E)$ lineáris, egyre rövidül. Az alsó határ magasabban, míg a felső határ alacsonyabban érezteti a hatását. Kis A -k esetén tehát nincs elég hely, ahhoz, hogy az elvárt lineáris, E -függésű régió kialakuljon, mert $\tilde{g}(E)$ linearitását a határeffektusok elrontják. Ez magyarázza meg azt, hogy miért nem alkalmazható az általánosított Strutinsky-módszer könnyű magok esetén.

5.2. Új simító eljárás a nívósűrűségre

Az eddig alkalmazott simítási eljárások hátránya, hogy a felhasznált $w(x)$ Gauss-súlyfüggvény értelmezési tartománya végtelen, tehát az e_i energiák járuléka a teljes E tengely mentén elkenődik. Tehát a spektrum alsó és felső határa is járulékot ad a teljes simított nívósűrűség tartományhoz és így a δE héjkorrekcióhoz is. Jelen munkában a végeffektusokat véges tartományon ható súlyfüggvények alkalmazásával próbáljuk meg csökkenteni ezekben a mennyiségekben. Erre a célra az egyik megfelelő függvény a következő:

$$w(x) = \begin{cases} ke^{-\frac{1}{1-x^2}}, & \text{ha } |x| < 1 \\ 0 & , \text{ ha } |x| \geq 1 \end{cases} . \quad (5.2.1)$$

A k normálási állandó értékét a következő összefüggésből lehet meghatározni:

$$1 = \int_{-1}^{+1} w(x) dx . \quad (5.2.2)$$

Az (5.2.1) egyenletbeli súlyfüggvény egyik előnye, hogy $|x| = 1$ -ben minden deriváltja folytonos, vagyis folytonosan megy át azokba a tartományokba, ahol $w(x)$ azonosan nullává válik. Ennek a simításnak a hatása a $[-1, 1]$ intervallumra lokalizált. Ahhoz, hogy az új súlyfüggvényt használhassuk, ki kell számítanunk a

$$h_p(x) = \sum_{i=0,2,\dots,p} c_i x^i \quad (5.2.3)$$

görbületkorrekciós polinomokat az (5.2.1) egyenletbeli súlyfüggvényhez. Az új $h_p(x)$ polinomok nem fognak megegyezni a (4.0.16) egyenletben lévő polinomokkal, mert ezeknek az új súlyfüggvénnyel kell kielégíteniük a (4.0.15) egyenletbeli önkonzisztencia-feltételt. A [27] munkában megmutatták, hogy az (5.2.3) egyenletben szereplő görbületkorrekciós polinomok c_i együtthatói a következő lineáris egyenletrendszer megoldásai:

$$\sum_{i=0}^p c_i a_{i+j} = \delta_{j,0} \quad (0 \leq j \leq p) , \quad (5.2.4)$$

ahol az a_l együtthatókat a következő integrál adja meg:

$$a_l = \int_{-1}^1 w(x) x^l dx . \quad (5.2.5)$$

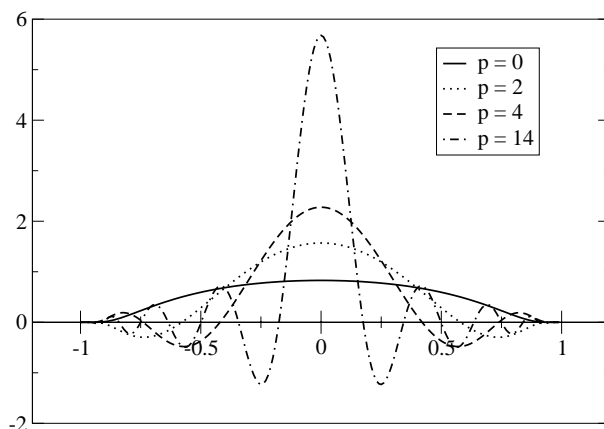
Az integrált azon intervallum fölött kell elvégezni, ahol a $w(x)$ súlyfüggvény nullától különbözik.

Az 5.1. táblázat tartalmazza a c_i együtthatókat $p = 0, 2, 4, 6$ értékek esetén.

p	c_0	c_2	c_4	c_6
0	1	0	0	0
2	1.8934	-5.6506	0	0
4	2.7492	-20.62052	28.52324	0
6	3.5866	-48.45461	155.33082	-136.79695

5.1. táblázat. A görbületkorrigáló polinom együtthatói az (5.2.1) véges hatótávolságú súlyfüggvény esetében $p = 0, 2, 4, 6$ értékekre.

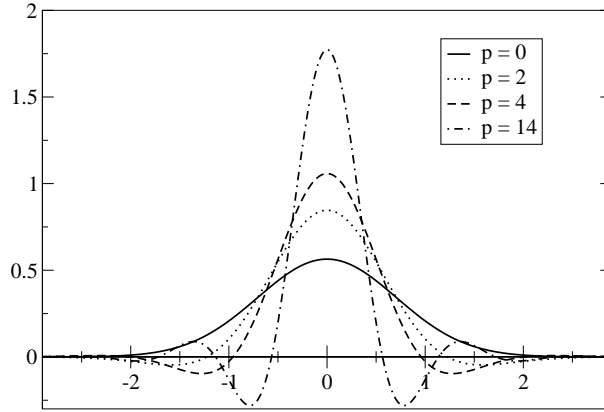
Az 5.3. ábrán bemutatjuk az $f_p(x)$ simító függvény alakját néhány p értékre, ha az (5.2.1) egyenletbeli $w(x) = f_0(x)$ -et használjuk súlyfüggvényként.



5.3. ábra. A véges hatótávolságú súlyfüggvényhez tartozó $f_p(x)$ simító függvények $p = 0, 2, 4, 14$ esetén. Itt $f_0(x) = w(x)$.

Az 5.4. ábrán bemutatjuk ugyanezeket a görbéket Gauss-súlyfüggvénnyel is. Mindkét súlyfüggvény esetében, ha $p > 0$, a $h_p(x)$ görbületkorrekciós polinomoknak p darab zérushelye van:

$$h_p(x_j^{(p)}) = 0, \quad j = \pm 1, \dots, \pm \frac{p}{2}, \quad x_{-j} = -x_j. \quad (5.2.6)$$



5.4. ábra. A Gauss-súlyfüggvényhez tartozó $f_p(x)$ simító függvények $p = 0, 2, 4, 14$ esetén. Itt $f_0(x) = w(x)$.

Az (5.2.6) egyenlet $x_j^{(p)}$ gyökeinek helyzete az 5.3. és 5.4. ábrákon látható. A pozitív gyököket rögzített p érték esetén célszerű növekvő sorrendbe rendezni, hogy így monoton növekvő sorozatot alkossanak:

$$0 < x_1^{(p)} < x_2^{(p)} < \dots < x_{\frac{p}{2}}^{(p)}. \quad (5.2.7)$$

Az $f_p(x)$ simító függvény legfontosabb része a $h_p(x)$, $x \in [-x_1^{(p)}, x_1^{(p)}]$ centrális régiója által meghatározott tartomány, melynek szélességét az első gyök, $x_1^{(p)}$ értéke határozza meg. Az ábrákon látható, hogy $p > 0$ esetén $x_1^{(p+2)} < x_1^{(p)}$, vagyis p növelésével $x_1^{(p)}$ értéke csökken.

A véges hatótávolságú simítás előnye, hogy adott e_i egyrészesecske-energiák az $E \in [e_i - \gamma, e_i + \gamma]$ intervallum határán túl nem adnak járulékot, tehát a simított nívósűrűség ebben az esetben egzaktul zérussá válik ($e_1 - \gamma$) szint alatti energiákra, míg a Gauss-súlyfüggvény esetén $\tilde{g}(E)$ a nulla környezetében oszcillál, és ez az oszcilláció a simító paraméter minden értékénél bekövetkezik.

Nagyobb E energiaértékek esetében $\tilde{g}(E)$ oszcilláló karaktere kisimítható, ha elég nagy γ értékeket használunk a simító függvényben (Gauss-súlyfüggvény esetén). Más a helyzet azonban akkor, ha véges hatótávolságú súlyfüggvénnyel simítunk, mivel ekkor még nagy simító paraméter értékek mellett is marad némi

hullámzás $\tilde{g}(E)$ -ben. Tehát, ebben az esetben, ellentétben az általánosított Strutinsky-módszerrel, nem közelíthetünk egyenessel.

Úgy tűnik, hogy ez egy fontos különbség a Gauss, és a véges hatótávolságú súlyfüggvénnyel számított simított nívósűrűségek között.

A (4.0.8) összefüggés alapján kiszámítjuk a simított energiát a véges hatótávolságú simító függvényt használva $\gamma \in [\gamma_{min}, \gamma_{max}]$ és $p \in \{p_{min}, p_{min} + 2, \dots, p_{max}\}$ értékek mellett. Így lehetőségünk nyílik a platógörbék tanulmányozására. A $p = 0$ esetén a platógörbe monoton növekvő függvény, vagyis a (4.0.19) egyenletbeli platófeltétel és a lokális platófeltétel egyike sem alkalmazható, mivel nincs olyan γ , amelynél a derivált zérus. Ez az eredmény illusztrálja a görbületkorrekciós polinomok szükségességét.

Abban az esetben, ha $p > 0$, a platógörbéknek minimuma (vagy maximuma) van azokon a helyeken, ahol a platófeltétel lokálisan teljesül. Lehetséges azonban, hogy a platógörbéknek több minimuma is van, és ezek közül kell kiválasztanunk a megfelelőt. A megfelelő simított nívósűrűség nem tükrözheti az egyrészecske-héjstruktúrát. Tehát, a simítási eljárás során a $\delta E(\gamma, p)$ platógörbének egy olyan (p -függő) γ_{min} minimumát kell megkeresnünk, amelyre a héjstruktúra már eltűnik. Az egyrészecske-spektrum legfontosabb tulajdonsága a két betöltött szint közötti legnagyobb távolság. Meg kell tehát állapítanunk a legnagyobb távolságot N részecske két egymást követő betöltött energiaszintje között:

$$G = \max_i \{ (e_{i+1} - e_i) \} . \quad (5.2.8)$$

Ez a G érték pontosabban jellemzi az egyrészecske-héjstruktúrát, mint a (4.0.18) egyenletben lévő $\hbar\Omega_0$. Annak érdekében, hogy γ_{min} értékét elfogadhatóan közelítsük, meg kell határozni a simító függvény *effektív szélességét* adott p érték esetén. Az effektív szélesség $h_p(x)$ középső csúcsának szélessége, tehát a $[-x_1^{(p)}, x_1^{(p)}]$ intervallum. Mivel p növelésével ez az intervallum, tehát a simító függvény effektív szélessége csökken, ezért nagyobb p értékek esetén nagyobb γ értékeket kell használni az azonos simító hatás eléréséhez. Annak érdekében, hogy ezt az effektust kiküszöböljük, érdemes bevezetnünk a

$$\Gamma_p = x_1^{(p)} \gamma_p \quad (5.2.9)$$

renormált simítási szélességet. A Γ_p renormált szélességben mérve a simítási szélesség p -függése számottevően csökken, ami abban jelentkezik, hogy a Γ_p szórása lényegesen kisebb lesz, mint a γ_p értékéé. Annak érdekében, hogy a különböző héjaktól származó fluktuációk is kisimuljanak, a Γ_p tartományak G -nél nagyobboknak kell lennie. Bevezetünk tehát egy egynél nagyobb F faktort

és megkeressük a Γ_p renormált simítási szélességnek egy olyan minimumát, ami nagyjából FG -vel egyenlő, tehát $\Gamma_{p,min} = FG$. (Megfigyeltük, hogy az F faktor optimális értéke könnyű magok esetén $1.5 \leq F \leq 2$, míg nehéz magok esetén $2.5 \leq F \leq 3.5$.) Miután rögzítettük ezt a minimumot, megkeressük a $\delta E(\gamma, p)$ platógörbének azt az első minimumát, amelyre teljesül, hogy

$$\gamma \geq \gamma_{p,min} = \frac{FG}{x_1^{(p)}}. \quad (5.2.10)$$

Ez a követelmény segít nekünk a $\delta E(\gamma_p, p)$ platógörbe megfelelő minimumának kiválasztásában. A legtöbb mag esetében a platógörbék több $\gamma_{p,1} < \gamma_{p,2} < \dots < \gamma_{p,l}$ minimummal is rendelkeznek. Ha p -t növeljük, akkor a minimumok l száma általában nő. Megfigyeltük, hogy a $p = 2$ esetben legfeljebb két minimum van: $l = 1$ és $l = 2$, továbbá az ezekhez az értékekhez tartozó minimumhelyek egyike eleget tesz a következő feltételnek:

$$\Gamma_{2,l} = x_1^{(2)} \gamma_{2,l} \approx FG. \quad (5.2.11)$$

Mivel a renormált simítási tartomány alkalmazásával nagymértékben csökkentettük a Γ_p értékek p függését, nagyobb p értékek esetén a megfelelő minimumnak közel kell lennie ehhez az (5.2.11) egyenletbeli értékhez. Ki kell tehát választanunk azt a k -adik minimumot, amelyre

$$\Gamma_{p,k} = x_1^{(p)} \gamma_{p,k} \approx \Gamma_{2,l} \quad (5.2.12)$$

teljesül. Ha a simítási tartományt ennek a kritériumnak megfelelően választjuk meg a $\delta E(\gamma_{p,k}, p)$ szórása kicsi lesz.

5.3. Az új nívósűrűség-simító eljárás alkalmazása

A véges hatótávolságú simítófüggvényt használó héjkorrekciós módszer vizsgálata során potenciálként a Woods–Saxon (WS) potenciált használtunk spinpálya taggal kiegészítve. Protonok esetén ezt egy egyenletes töltéeloszlású, diffúz szélű gömb Coulomb-potenciálja egészítette ki. (A diffúz gömb azért volt szükséges, hogy kiszámíthassuk a szemiklasszikus eredményeket az összehasonlítás érdekében.) A potenciálokban szereplő paraméterek megegyeztek a [46] munkában megadott ún. univerzális potenciál paramétereivel. A potenciál erőssége neutronok esetén ($\tau = \nu$) $t_3 = 1/2$ és protonok esetén ($\tau = \pi$)

$$t_3 = -1/2$$

$$V_0^\tau(Z, N) = -V \left[1 - 2\kappa t_3 \frac{N - Z}{A} \right] \quad (5.3.1)$$

volt, ahol $\kappa = 0.86$, $V = 49.6$ MeV. A spin-pálya tag erőssége:

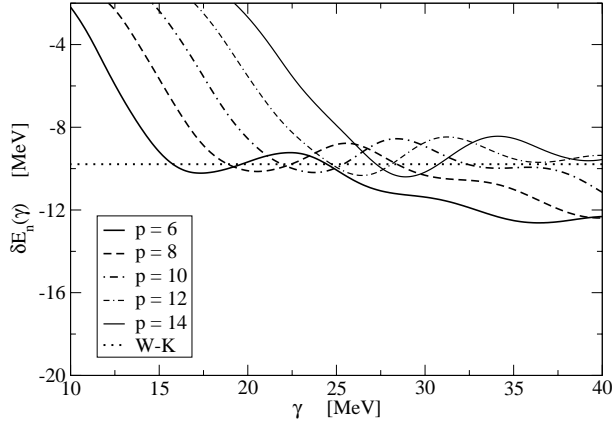
$$V_{so} = -\frac{\lambda_{so} V_0^\tau}{4} \left(\frac{\hbar}{2\mu c} \right)^2, \quad (5.3.2)$$

ahol μ a nukleon redukált tömege és a spin-pálya erősségek értékei a következők voltak: $\lambda_{so} = 35$ neutronok, illetve $\lambda_{so} = 36$ protonok esetén. A difuzitások minden potenciál tag esetén azonosak: $a = a_{so} = a_C = 0.7$ fm. A sugárparaméterek értékei, amiből a sugarak $r_0 A^{1/3}$ formulából számíthatók, a következők voltak: $r_0 = 1.347$ fm, $r_0 = r_C = 1.275$ fm rendre neutronokra és protonokra, míg a spin-pálya tag sugárparamétere $r_{so} = 1.31$ fm neutronokra, illetve $r_{so} = 1.32$ fm protonokra. Elképzelhető, hogy bizonyos magok esetében ezek a paraméterek nem voltak optimálisak, de általában megfelelő N, Z függést szolgáltatnak, legalábbis ahhoz, hogy a héjkorrekció számítási módszert teszteljünk.

Az egyrészecske Hamilton-operátor e_i energiáit az operátor harmonikus oszcillátor bázisban történő diagonalizálásával számítottuk ki. A bázisban a maximális pálya-impulzusmomentum 9 volt és minden esetben 20 bázisfüggvényt használtunk. (A bázis méretének növelése nem változtatott az eredményeken.) A szabad részecske (magpotenciál tagok nélküli) Hamilton-operátorának diagonalizálásához ugyanezt a bázist használtuk. Ezzel kaptuk a pozitív $e_i^{(0)}$ energiaszinteket, amelyek ahhoz szükségesek, hogy a [24] munkában részletesen ismertetett Green-függvény módszert alkalmazhassuk a kontinuum tartomány hatásának figyelembevételére. A [24] munkában megmutatták, hogy a valódi és a szabad Hamilton-operátorok spektrumai simított nívósűrűségének különbségéből kiesik a mesterséges részecske-gáz hatása, és ugyanaz a simított nívósűrűség adódik, mint amit a szórási fáziseltolások deriváltjából számított nívósűrűségek simításával kapnánk [24].

Az 5.5. ábrán a $p = 6, \dots, 14$ platógörbét mutatjuk be a ^{146}Gd mag esetére a véges hatótávolságú simítás alkalmazásával, illetve összehasonlítási alapként a Wigner–Kirkwood számítás eredményét is megmutatjuk.

Itt az alkalmazott p értéktartomány megegyezik a [23] munkában használttal. Az ábrán látható, hogy az új módszert használva a véges hatótávolságú simítással alkalmazni tudtuk a lokális platófeltételt. Vagyis a γ_p értékeket úgy választottuk, hogy azoknál a $\delta E(\gamma, p)$ platógörbéknek minimuma legyen. A minimumokhoz tartozó $\delta E(\gamma_p, p)$ értékek nagyon jó egyezésben



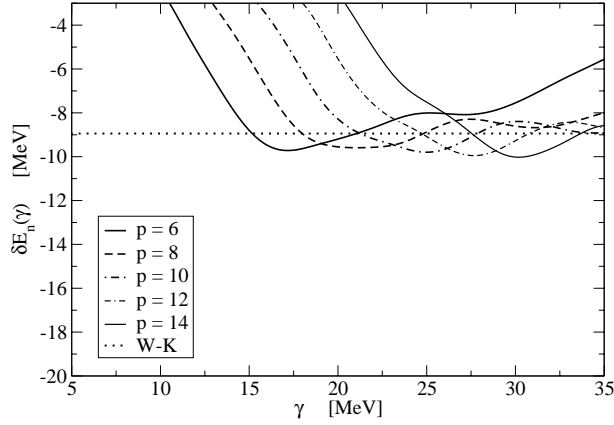
5.5. ábra. Neutron héjkorrekciók a ^{146}Gd magra γ függvényében a $p = 6, \dots, 14$ értékek esetén véges hatótávolságú súlyfüggvény használatával. A vízszintes pontvonal a szemiklasszikus héjkorrekciót mutatja: $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^n$.

vannak (500 keV-en belül) a szemiklasszikus számítás eredményét mutató horizontális pontvonallal. Mivel az így kapott $\delta E(\gamma_p, p)$ értékek σ szórása (4.0.29) kicsi, a (4.0.28) egyenletben álló átlaggal definiált héjkorrekció értéke jól meghatározott.

Egy másik példaként az 5.6. ábrán példaként bemutatjuk a kétszeresen mágikus ^{132}Sn magot.

Ebben az esetben a σ szórás kisebb, mint 200 keV és az eltérés a szemiklasszikus értéktől kisebb, mint 1 MeV. Egyébként ez a legnagyobb eltérés az 5.2. táblázatban álló esetek között.

Megfigyelhető az 5.5. és 5.6. ábrán, hogy azok a γ_p értékek, amiknél a $\delta E(\gamma, p)$ függvények minimumai találhatóak, a p növelésével növekednek. Ez a növekedés lényegesen csökkenthető az (5.2.9) összefüggéssel definiált Γ_p re-normált simítási tartomány alkalmazásával. Ha az első γ_p minimum értékét az (5.2.10) egyenletben szereplő $\gamma_{p, min}$ értékénél nagyobbobbnak választottuk, a kapott $\delta E(\gamma_p, p)$ értékek a legtöbb mag esetében nagyon hasonlóan adódtak. A (4.0.28) egyenletbeli héjkorrekciók a $\delta E(\gamma_p, p)$ értékek átlagát felettetjük meg, a héjkorrekció bizonytalanságának pedig ezek (4.0.29) egyenletbeli σ szórását. Az 5.2. táblázatban bemutatjuk, hogy neutronokra és néhány középnehéz és nehéz magra milyen héjkorrekciókat eredményezett az új $\delta E_n(FR)$ simítási eljárás, illetve a $\delta E_n(G)$ általánosított Strutinsky-módszer. A táblázatban a



5.6. ábra. Neutron héjkorrekciók az ^{132}Sn magra γ függvényében a $p = 6, \dots, 14$ értékek esetén véges hatótávolságú súlyfüggvény használatával. A vízszintes pontvonal a szemiklasszikus héjkorrekciót mutatja: $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^n$.

Mag	$\delta E_n(FR)$	σ	$\delta E_n(G)$	σ	δE_{sc}	Δ_{FR}	Δ_G
^{68}Ni	0.16	0.12	0.50	0.07	0.81	0.65	0.31
^{78}Ni	-3.59	0.07	-2.78	0.16	-4.21	0.62	1.43
^{90}Zr	-7.42	0.06	-7.35	0.17	-6.82	0.60	0.53
^{122}Zr	-5.92	0.11	-4.52	0.15	-6.33	0.41	1.81
^{124}Zr	-4.12	0.12	-3.25	0.13	-4.35	0.23	1.10
^{100}Sn	-8.16	0.20	-6.95	0.23	-7.50	0.66	0.55
^{132}Sn	-9.85	0.14	-8.58	0.10	-8.87	0.98	0.29
^{146}Gd	-10.26	0.07	-10.33	0.20	-9.79	0.47	0.54

5.2. táblázat. Neutron héjkorrekciók δE_n és a σ szórásai véges hatótávolságú (FR) súlyfüggvény esetén összehasonlítva az általánosított Strutinsky-módszer (G) eredményével és a szemiklasszikus számítás eredményével. $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^n$, $\Delta_{FR} = |\delta E_{sc} - \delta E_n(FR)|$, $\Delta_G = |\delta E_{sc} - \delta E_n(G)|$. Az összes energia MeV egységben van megadva.

harmadik és ötödik oszlopok tartalmazzák a héjkorrekciók σ szórásait. Az utolsó két oszlopban a héjkorrekcióknak a [21] munkában bemutatott szemiklasszikus eljárás eredményeitől való eltéréseit adjuk meg. Az új módszer eredményeinek

a szemiklasszikus eredményektől való eltérése minden magnál 1 MeV alatt maradt. Az általánosított Strutinsky-módszer esetében pedig a Δ_G eltérés számos esetben jóval nagyobb 1 MeV-nél. A Δ_{FR} és Δ_G eltérések átlagai pedig 0.6 MeV és 0.8 MeV-nek adódtak.

Az 5.3. táblázat hasonló elrendezésben tartalmazza a protonokra vonatkozó eredményeket. Itt a Δ_{FR} és Δ_G eltérések átlagai 0.4 MeV és 0.6 MeV. Ez arra enged következtetni, hogy az új eljárás protonok esetében is alkalmazható.

Mag	$\delta E_p(FR)$	σ	$\delta E_p(G)$	σ	δE_{sc}	Δ_{FR}	Δ_G
^{90}Zr	1.59	0.19	1.88	0.20	1.44	0.15	0.44
^{100}Sn	-7.47	0.064	-7.42	0.14	-7.01	0.46	0.41
^{132}Sn	-7.39	0.068	-6.04	0.12	-6.64	0.75	0.60
^{146}Gd	4.89	0.10	5.28	0.24	4.52	0.37	0.76
^{180}Pb	-8.94	0.15	-7.78	0.04	-8.62	0.32	0.84
^{208}Pb	-7.57	0.07	-6.73	0.03	-7.29	0.28	0.56

5.3. táblázat. Proton héjkorrekciók δE_p és a σ szórásaik véges hatótávolságú (FR) súlyfüggvény esetén összehasonlítva az általánosított Strutinsky-módszer (G) eredményével és a szemiklasszikus számítás eredményével. $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^n$, $\Delta_{FR} = |\delta E_{sc} - \delta E_p(FR)|$, $\Delta_G = |\delta E_{sc} - \delta E_p(G)|$. Az összes energia MeV egységben van megadva.

Ezek a különbségek sem neutronok, sem protonok esetén nem számottevőek. Az új eljárás eredményei az elhullatási vonalak közelében általában közelebb vannak a szemiklasszikus eredményekhez. Ez figyelhető meg a ^{78}Ni , ^{122}Zr , ^{124}Zr magokon neutron esetén, és a ^{180}Pb magon proton esetén. Ez arra utal, hogy a véges hatótávolságú simítás alkalmazásával jobban megközelíthetőek az elhullatási vonalak, mint a végtelen tartományú Gauss-súlyfüggvénnyel.

Az új módszernek az egyik előnye az, hogy a megfelelő héjkorrekció meghatározása egyértelműbb, mint a korábban használt módszereké, továbbá az új módszer eredményei mentesek az általánosított Strutinsky-módszer zavaró tényezőinek többségétől, vagyis nem függenek annak az intervallumnak a helyzetétől, ahol a simított nívósűrűség linearitását megköveteljük.

Az új eljárás legfontosabb előnye azonban az, hogy könnyű magok esetén is alkalmazható, ahol az általánosított Strutinsky-módszer nem használható. Az új módszer eredményeit könnyű magok esetén neutronokra az 5.4. táblázat, protonokra pedig az 5.5. táblázat tartalmazza. Látható, hogy a szemiklasszikus értékekkel való egyezés épp olyan jó, mint a nehezebb magok esetén. Különösen

jó eredményeket kaptunk a neutronelhullatási vonal közelében elhelyezkedő oxigén izotópoknál.

Mag	δE_n	σ	δE_{sc}	Δ
^{16}O	-1.63	0.04	-1.57	0.06
^{18}O	2.67	0.04	3.01	0.34
^{20}O	3.25	0.24	3.11	0.14
^{22}O	0.12	0.53	0.09	0.03
^{24}O	-1.68	0.49	-1.69	0.01
^{20}Ne	3.07	0.56	3.01	0.06
^{40}Ca	-1.77	0.35	-0.66	0.97
^{48}Ca	-2.91	0.24	-2.59	0.32

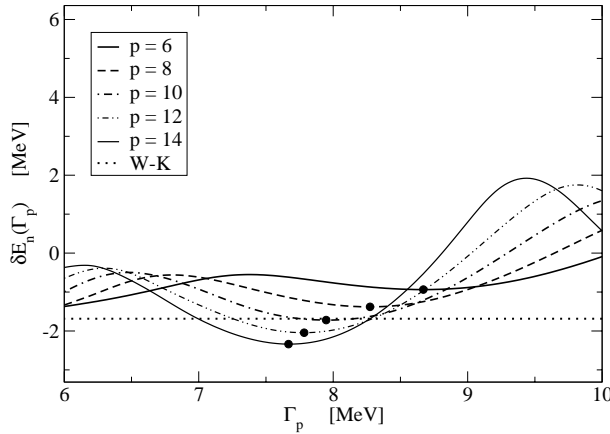
5.4. táblázat. Neutron héjkorrekciók és a szórásaik a (4.0.29) egyenlet alapján. A szemiklasszikus módon számított értékek a negyedik oszlopban láthatók, $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^n$. Az utolsó oszlop a két módszer eltérését mutatja: $\Delta = |E_{sc} - \tilde{E}|$. Az összes energia MeV egységben van megadva.

Mag	δE_p	σ	δE_{sc}	Δ
^{16}O	-1.65	0.03	-1.44	0.21
^{18}O	-1.65	0.10	-1.66	0.01
^{20}O	-2.09	0.19	-1.90	0.19
^{22}O	-2.30	0.15	-2.14	0.16
^{24}O	-3.10	0.66	-2.36	0.74
^{40}Ca	-1.62	0.12	-0.91	0.71
^{48}Ca	-1.70	0.19	-1.44	0.26
^{48}Ni	-0.80	0.36	-1.23	0.43
^{56}Ni	-3.67	0.29	-3.45	0.22

5.5. táblázat. Proton héjkorrekciók és a szórásaik a (4.0.29) egyenlet alapján. A szemiklasszikus módon számított értékek a negyedik oszlopban láthatók, $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^p$. Az utolsó oszlop a két módszer eltérését mutatja, $\Delta = |E_{sc} - \tilde{E}|$. Az összes energia MeV egységben van megadva.

Az 5.7. ábrán a kétszeresen mágikus ^{24}O -hez tartozó neutron platógörbékét ábráztuk a renormált simítási tartomány paraméter, a Γ_p függvényében, $p =$

6, 8, ..., 14 értékek esetén. A szemiklasszikus eredményt a vízszintes pontvonal mutatja.



5.7. ábra. Neutron héjkorrekciók az ^{24}O magra Γ_p renormált simítási szélesség függvényében a $p = 6, \dots, 14$ értékek esetén véges hatótávolságú súlyfüggvény használatával. A vízszintes pontvonal a szemiklasszikus héjkorrekciót mutatja: $\delta E_{sc} = E_{sc} - E_{sp}^n$.

Az egyes görbék minimumait a rajtuk található fekete körök mutatják. Látható, hogy a körökkel jelölt $\delta E_n(\Gamma_p, p)$ értékek -0.9 MeV és -2.3 MeV közé esnek, és a hozzájuk tartozó Γ_p értékek 8 MeV közelében sűrűsödnek. A $\delta E_n(\Gamma_p, p)$ értékek szórása hozzávetőleg 0.5 MeV, az átlaguk pedig egybeesik a szemiklasszikus értékkel. Ez az egybeesés véletlen, de látható, hogy a Δ értékek más oxigén izotópok esetében is kicsik. Figyeljük meg ezen az ábrán azt is, hogy a minimumok helyzete a Γ_p függvényeként a különböző p -khez tartozó görbék esetén jóval kevésbé szór, mint az 5.6. ábrán, ahol a γ simítási tartományt alkalmaztuk. Ez azt mutatja, hogy a renormált simítási szélesség bevezetése hasznos volt. Úgy hisszük tehát, hogy a véges hatótávolságú simítás alkalmazásával az elhullatási vonalak jobban megközelíthetőek, mint a végtelen tartományú Gauss-súlyfüggvénnyel.

5.4. Új görbületkorrekciós módszerek

A Strutinsky héjkorrekciós eljárásával kivitelezett tömegszámítások a simított nívósűrűségen alapulnak. A simítási folyamat mindig görbületkorrekció használatával történik. Ha simítást alkalmazunk, akkor görbületkorrekció használata esetén a sima függvény változatlan marad. Tekintsük át ismét a görbületkorrekció fogalmát.

5.4.1. Görbületkorrekció

A 4. fejezetben láttuk, hogy a konvolúció ideális eszköz egy $y(x)$ oszcilláló függvény simítására. Ha $f(x)$ a simító függvény, amiről az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy páros, akkor a simított $\tilde{y}(x)$ függvényt az $f(x)$ és az $y(x)$ konvolúciójával kapjuk:

$$\tilde{y}(x) = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{x-x'}{\gamma}\right) y(x') dx'. \quad (5.4.1)$$

Itt a γ pozitív valós szám határozza meg a simítási szélességet. A simító függvénynek ki kell elégítenie a (4.0.15) önkonzisztencia-feltételt, hogy a simítás ne változtassa meg a már eleve sima függvényt. Itt sima függvény alatt legfeljebb $(p+1)$ -ed fokú polinomot értünk [7, 27], tehát megköveteljük, hogy az $y(x) \rightarrow \tilde{y}(x)$ leképezés a legfeljebb $(p+1)$ -ed fokú polinomok halmazára az azonos leképezés legyen, azaz teljesüljön a (4.0.15) feltétel. Arra az f simító függvényre, ami a (4.0.15) egyenletet teljesíti, azt mondjuk, hogy p -ed fokú görbületkorrekciójú. Ha ezt a tulajdonságát ki akarjuk emelni, akkor a simító függvényt f helyett f_p -vel jelöljük. A nulladfokú görbületkorrekcióval rendelkező függvény lesz a kezdő simító függvény, és ennek a függvénynek párosnak kell lennie. Ha a simítás γ szélességét és a görbületkorrekció p fokát hangsúlyozni akarjuk, akkor a simított SPLD-re a $\tilde{g}_{\gamma,p}(E)$ jelölést használjuk. A kezdő simító függvény nem más, mint a korábbi $w(x)$ súlyfüggvény.

5.4.2. Hagyományos görbületkorrekciós módszerek

A teljesség kedvéért tekintsünk át két hagyományos módszert is. A legelterjedtebb módszerben a p -ed fokú görbületkorrekciós simító függvényt [27] az

$$f_p(t) = h_p(t) f_0(t) \quad (5.4.2)$$

formában keressük, ahol $h_p(t)$ az (5.2.3) egyenletbeli p -ed fokú polinom. A továbbiakban feltesszük, hogy $p \geq 0$ páros. Ezt a módszert a 4. fejezetben

már ismertettük és a továbbiakban polinomiális görbületkorrekciónak nevezzük (PCC), megkülönböztetésül a most bevezetendő másfajta görbületkorrekciós módszerektől.

Brack és Pauli egy másik módszert javasoltak [28], ahol a p -ed fokú görbületkorrekciós simító függvényt a következő alakban írták fel:

$$f_p(t) = \sum_{i=0}^{\frac{p}{2}} a_{2i} \frac{d^{2i}}{dt^{2i}} f_0(t) . \quad (5.4.3)$$

Erre a módszerre, mint Brack és Pauli görbületkorrekciós módszerére fogunk hivatkozni (BPCC). A (4.0.15) egyenletben szereplő feltétel egyértelműen meghatározza az a_{2i} együtthatókat, amelyek most különbözhetnek a PCC-beli c_i együtthatóktól. Az a_0 értéke 1. Ezen a_{2i} együtthatók teljesítik továbbá a következő egyenletrendszert:

$$\sum_{j=1}^{\frac{p}{2}} B_{i,j} a_{2j} = -b_{2i}, \quad i = 1, \dots, \frac{p}{2}, \quad (5.4.4)$$

ahol $B_{i,i} = 1$, $B_{i,j} = 0$ ($i < j$), $B_{i,j} = b_{2(i-j)}$ ($1 < i < j$) és b_{2i} kifejezhető az f_0 momentumaival:

$$b_{2i} = \frac{M_{2i}(f_0)}{(2i)!} . \quad (5.4.5)$$

A simítófüggvény momentumait a következő formulával értelmezzük:

$$M_i(f) = \int_{-\infty}^{\infty} t^i f(t) dt, \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (5.4.6)$$

5.4.3. Görbületkorrekció több szélességgel

A simítás hibatagja:

$$\delta y(x) = \tilde{y}(x) - y(x) \quad (5.4.7)$$

a következő alakban írható:

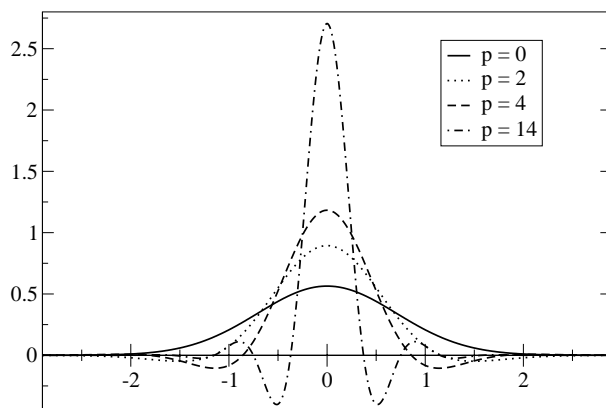
$$\delta y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \gamma^n \frac{1}{n!} M_n(f) y^{(n)}(x) , \quad (5.4.8)$$

ahol $y(x)$ n -edik deriváltját $y^{(n)}(x)$ -al jelöljük és feltételezzük, hogy $M_0(f) = 1$, azaz, hogy a kiindulási simító függvény egyre van normálva.

Ha az f simító függvény momentumai teljesítik a következő feltételeket: $M_0(f) = 1$, $M_i(f) = 0$ ($i = 1, 2, \dots, p+1$), akkor az (5.4.8) egyenletből látható, hogy egy ilyen simító függvény p -ed fokú görbületkorrekciójú. Tételezzük fel, hogy van egy f_p simító függvényünk, és az páros függvény. Azt állítjuk, hogy ekkor egy $(p+2)$ -ed fokú görbületkorrekcióval rendelkező simító függvény felírható a következő alakban:

$$f_{p+2}(t) = \frac{f_p(t) - c^{-p-3} f_p\left(\frac{t}{c}\right)}{1 - c^{-p-2}}, \quad p \geq 0. \quad (5.4.9)$$

Itt c tetszőleges valós szám, amire a $c \neq 0$ és a $c \neq 1$ feltételek teljesülnek. Az 5.8. ábrán bemutatjuk az $f_p(x)$ simító függvény alakját néhány különböző p értékre $c = 0.9$ esetén Gauss kezdő simító függvény mellett.



5.8. ábra. A Gauss kezdő simító függvényhez tartozó $f_p(x)$ simító függvények az (5.4.9) egyenlet alapján $p = 0, 2, 4, 14$ és $c = 0.9$ esetén.

Ahhoz, hogy állításunkat bebizonyítsuk, elég meggyőződni a

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{p+2}(t) dt = 1 \quad (5.4.10)$$

és

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^i f_{p+2}(t) dt = 0, \quad i = 1, 2, \dots, (p+3) \quad (5.4.11)$$

egyenletek teljesüléséről. Bizonyításukhoz be kell helyettesítenünk az (5.4.9) egyenletben lévő formulát az (5.4.10) és az (5.4.11) egyenletekbe, és fel kell

használnunk az integrálás műveletének linearitását, valamint az integrációs változót a bal oldal második tényezőjében t -ről $u = t/c$ -re kell cserélnünk.

Ha minden iterációs lépésben ugyanazt a c értéket használjuk (a $p = 0$ kezdőlépéstől kezdve), akkor az f_p ($p \geq 2$) simító függvényre a következő zárt kifejezést kapjuk:

$$f_p(t) = A_p \sum_{k=0}^{\frac{p}{2}} (-1)^k c^{(\frac{p}{2}-k)(\frac{p}{2}-k+2)} \left[\begin{matrix} \frac{p}{2} \\ k \end{matrix} \right]_{c^2} f_0\left(\frac{t}{c^k}\right), \quad (5.4.12)$$

ahol a q -binomiális együttható jelölésére az alábbi formulát alkalmazzuk:

$$\left[\begin{matrix} s \\ r \end{matrix} \right]_q = \begin{cases} 1, & \text{ha } r = 0 \\ \frac{(1-q^s)(1-q^{s-1})\dots(1-q^{s-r+1})}{(1-q)(1-q^2)\dots(1-q^r)}, & \text{ha } 1 \leq r \leq s \\ 0, & \text{ha } r > s \end{cases} \quad (5.4.13)$$

és az (5.4.12) egyenletbeli A_p együttható a következő lesz:

$$A_p = \left(\sum_{k=0}^{\frac{p}{2}} c^{2k} \right) \frac{1}{c^{(\frac{p}{2}+2)^2-4}} \left(\prod_{k=1}^{\frac{p}{2}} \frac{1}{1-c^{-(2k+2)}} \right). \quad (5.4.14)$$

Azokat a simító függvényeket, amelyeket az (5.4.9) és az (5.4.12) egyenletek segítségével számítottunk ki, többszélességű simító függvényeknek, az ezeket használó simítási módszert pedig *többszélességű görbületkorrekciónak* (MWCC) nevezzük. Az elnevezés a simított SPLD-nek az MWCC módszerbeli

$$\tilde{g}_{\gamma,p}(E) = A_p \sum_{k=0}^{\frac{p}{2}} (-1)^k c^{(\frac{p}{2}-k)(\frac{p}{2}-k+2)+k} \left[\begin{matrix} \frac{p}{2} \\ k \end{matrix} \right]_{c^2} \tilde{g}_{\gamma c^k,0}(E) \quad (5.4.15)$$

alakjából származik. Az (5.4.15) egyenletből látszik, hogy a p -ed fokú görbületkorrekcióval rendelkező simító függvényhez kapcsolódó simított SPLD azoknak az SPLD-eknek a lineáris kombinációja, amelyet a γc^k ($k = 0, \dots, \frac{p}{2}$) simítási szélességű kezdő simító függvényből kapunk. Az egyes $\tilde{g}_{\gamma c^k,0}(E)$ tényezők különbözően viselkednek, néhány tényező mutatja a héjstruktúrát, mások meg túlsimíthatnak, de a megfelelő lineáris kombináció fenntartja az egyensúlyt a tagok között.

5.4.4. Derivált görbületkorrekció

Az (5.4.9) egyenletbeli rekurzió $c = 1$ esetén nem érvényes. Ha a $c \rightarrow 1$ határértéket L'Hospital szabálya alapján határozzuk meg, akkor az új p -ed fokú

görbületkorrekciós simító függvény

$$f_{p+2}(t) = \frac{p+3}{p+2}f_p(t) + \frac{1}{p+2}t \frac{d}{dt}f_p(t) \quad (5.4.16)$$

alakban jelenik meg. Az így kapott simító függvényt derivált simító függvénynek nevezzük, a módszert pedig *derivált görbületkorrekciónak* (DCC).

Az (5.4.16) egyenletbeli rekurzió segítségével egy zárt kifejezés nyerhető a ($p \geq 0$) simító függvényekre:

$$f_p(t) = \sum_{k=0}^{\frac{p}{2}} \frac{a(\frac{p}{2}+1, k+1)}{\frac{p}{2}!2^{\frac{p}{2}}} t^k \frac{d^k}{dt^k} f_0(t), \quad (5.4.17)$$

ahol az $a(n, m)$ együtthatók teljesítik az

$$a(n, m) = (2n + m - 2)a(n - 1, m) + a(n - 1, m - 1) \quad (5.4.18)$$

rekurziót $a(1, 1) = 1$, $a(n, 0) = 0$ (n tetszőleges egész) és $a(n, m) = 0$ ($n < m$) kezdeti feltételekkel. A t^k szorzófaktorától eltekintve az (5.4.17) és az (5.4.3) egyenletbeli simító függvények hasonlítanak egymásra. A BPCC módszerrel ellentétben azonban az (5.4.17) egyenletben a lineáris kombinációs együtthatók függetlenek a kezdeti simító függvénytől. A BPCC módszerben a lineáris kombinációs együtthatókat az (5.4.4) egyenletet használva számítjuk ki.

Az (5.4.16) rekurzió leegyszerűsíti a héjkorrekciós módszer segédmennyiségeinek kiszámítását. A részecskeszám kiszámításához szükségünk lesz az alábbi

$$N_p(x) = \int_{-\infty}^x f_p(t) dt, \quad p \geq 0 \quad (5.4.19)$$

integrálra (lásd a (4.0.11) egyenletet). Könnyen megkapjuk a következő rekurziót az $N_p(x)$ függvényre:

$$N_{p+2}(x) = N_p(x) + \frac{1}{p+2} x f_p(x). \quad (5.4.20)$$

Ez a rekurzió

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} (t f_p(t)) = 0, \quad p \geq 0 \quad (5.4.21)$$

esetében érvényes. A simított energia kiszámítására szükségünk van az

$$E_p(x) = \int_{-\infty}^x t f_p(t) dt, \quad p \geq 0 \quad (5.4.22)$$

integrálra (lásd a (4.0.12) egyenletet). Levezethetjük a következő rekurziót

$$E_{p+2}(x) = \frac{p+1}{p+2}E_p(x) + \frac{1}{p+2}x^2f_p(x). \quad (5.4.23)$$

Itt feltételeztük, hogy

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} (t^2 f_p(t)) = 0, \quad p \geq 0. \quad (5.4.24)$$

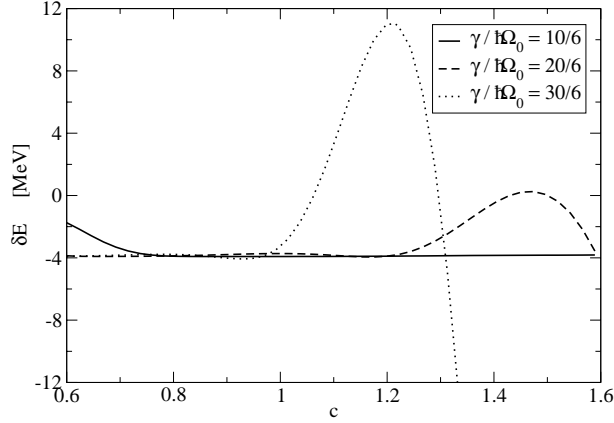
5.5. Az új görbületkorrekciós módszerek alkalmazásai

Az új görbületkorrekciós módszerek alkalmazásakor először egy alkalmas kezdő simító függvényt kell választanunk. Erre a legszélesebb körben használt forma a Gauss-függvény: $f_0(t) = e^{-t^2}/\sqrt{\pi}$. A [28] munkában a BPCC módszernél $f_0(t) = 1/(2\cosh^2(t))$ simító függvényt használtak. Mi mindkét simító függvényt használni fogjuk és Gauss, valamint Cosh-típusú simító függvényeknek fogjuk hívni őket. Meg kell említenünk egy érdekes megfigyelést. Gauss kezdő simító függvény esetén a PCC, a BPCC és a DCC módszerek ugyanarra az f_p simító függvényhez vezetnek. Az MWCC módszer azonban új simító függvényt eredményez. A Cosh-típusú kezdő simító függvény esetén minden bemutatott módszer különböző simító függvényeket eredményez.

Az MWCC módszer a γ simítási szélességen és p paraméteren kívül (ahol p a görbületkorrekció foka) tartalmaz még egy új, dimenzió nélküli technikai paramétert, amit c -vel jelöltünk. Az 5.9. ábrán a c paraméter függvényében mutatjuk a héjkorrekciót egy könnyű ($N=20$) mag esetére, három különböző simítási szélességet használva.

Az ábra szerint c -nek van egy optimális régiója (ahol a héjkorrekció nem függ a c értékétől). Ez a régió mindhárom γ értékre nagyjából 0.8 és 1 között van. Az általunk elvégzett számításokban mindig találtunk egy stabil régiót c -ben, és ez az esetek többségében 1 alatt volt. Mivel a héjkorrekciós módszer eleve tartalmaz két technikai paramétert (γ és p), nem lenne bölcs dolog emelni a számukat, ezért leírjuk, hogy milyen módszert vezettünk be c értékének rögzítésére.

A γ és p paraméterek minden rögzített értékénél c értékét a következőképpen határozzuk meg. Kiválasztunk egy átlagoló ablakot az N részecskeszám körül. Mivel az energianívók héjakba rendeződnek, így elég természetesnek tűnik az a választás, hogy az átlagoló ablak felső értéke essen egybe a héjlezárodásnak megfelelő részecskeszámmal, az ablak alsó értéke pedig legyen az adott héj kezdete.



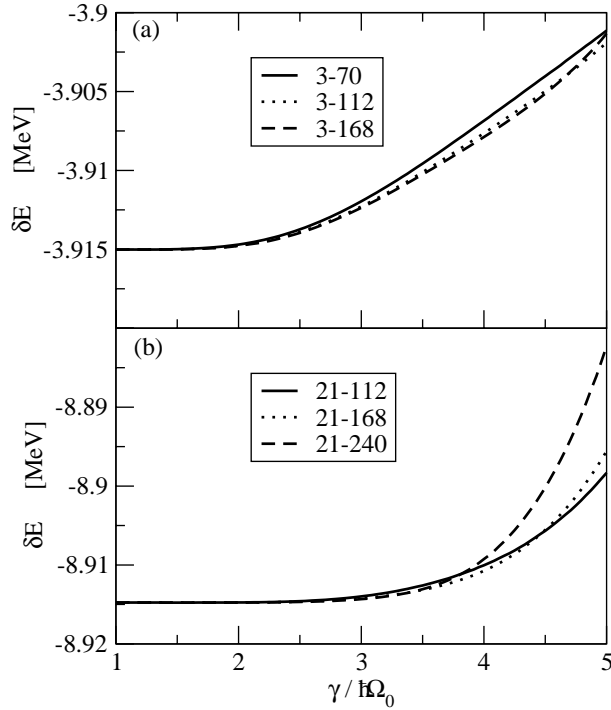
5.9. ábra. Az MWCC módszerrel számított héjkorrekció harmonikus oszcillátor potenciálra ($\hbar\Omega_0 = 6 \text{ MeV}$, $N=20$), mint a c paraméter függvénye, három különböző simítási szélességet használva. A görbületkorrekció foka $p = 6$. A simító függvényeket Gauss kezdő simító függvényekből állapítjuk meg MWCC módszerrel.

Kiszámítjuk az átlagoló ablakhoz tartozó valamennyi atommag héjkorrekcióját. A c paramétert úgy választjuk meg, hogy a héjkorrekciók átlagértéke olyan közel essen nullához, amennyire csak lehetséges. Ezt a módszert a [47, 48] munkák alapján vezettük be. A héjkorrekció a részecskeszám gyorsan változó függvénye. Bár a δE átlagértékét nullának várták, de kiderült, hogy az energia fluktuáló részének az átlaga nem zérus, és ez az átlagérték az energia sima részéhez járul hozzá [47]. A c értékét úgy határozzuk meg, hogy minimalizáljuk a héjkorrekció ezen extra sima tagját.

Egy könnyű és egy középnehéz atommag esetén is megvizsgáltuk az átlagoló ablaktól való függést. A c optimális értékét a fenti módszerrel határozzuk meg ezen esetekben is. A görbületkorrekció fokszáma $p = 6$ volt. Az átlagoló ablakok felső határai a héjlezárodásokhoz tartoztak, míg az alsó határok az új héjak kezdetei voltak. Az eredményeket az 5.10. ábrán mutatjuk be.

Látható, hogy a héjkorrekció alig függ az átlagoló ablaktól (figyeljük meg a függőleges tengely beosztását). Úgy találtuk, hogy a c optimális értékének meghatározásához a vizsgált részecskeszám saját héján kívül elegendő az eggyel alatta, illetve felette lévő héjakat figyelembe venni.

A héjkorrekciós módszer általában két technikai paramétert tartalmaz, a γ

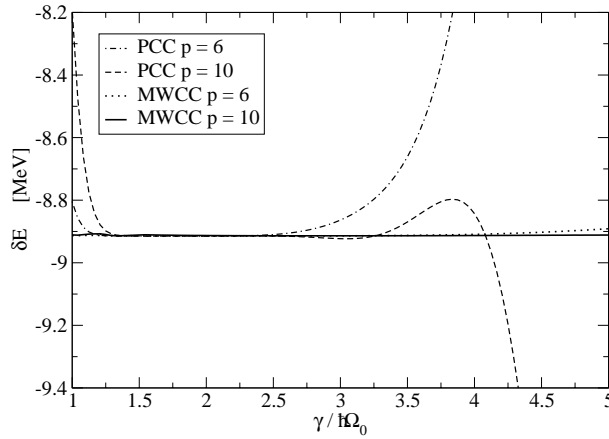


5.10. ábra. Héjkorrekción harmonikus oszcillátor potenciálra ($\hbar\Omega_0 = 6 \text{ MeV}$), mint a simítási szélesség függvénye, különböző átlagoló ablakokat használva a c paraméter megfelelő meghatározására. A görbületkorrekción foka $p = 6$. A simító függvényeket Gauss kezdő simító függvényekből állapítjuk meg MWCC módszerrel. A részecskeszám $N=20$ az (a) esetben és $N=70$ a (b) esetben.

simítási szélességet és a görbületkorrekción p fokszámát. Ha ezen paraméterek értékeit megfelelően választjuk meg, akkor az eredményeknek ezektől függetlennek kell lenniük. A harmonikus oszcillátor, vagy hasonló potenciálok esetén (ami végtelen számú kötött állapotot tartalmaz) a [28] munkában megmutatták, hogy a simítási szélességnek van egy elég nagy tartománya, ahol a héjkorrekción gyakorlatilag konstans, tehát a platófeltétel teljesül. Az új görbületkorrekción módszereket is ellenőrizni kell harmonikus oszcillátor potenciálra, hogy a platófeltétel teljesül-e.

Az ellenőrző számítás során a harmonikus oszcillátor potenciál paraméterét

$\hbar\Omega_0 = 6$ MeV-nek választottuk, a vizsgált részecskeszám $N = 70$ volt és a görbületkorrekció fokát $p = 6$ -nak választottuk, ugyanúgy, mint a [28] munkában. Ebben az esetben a PCC (Gauss-típusú simító függvény esetén) és a BPCC (Cosh-típusú simító függvény esetén) módszereket alkalmaztuk. A héjkorrekciót a simítási szélesség függvényében ábrázolva az 5.11. ábra mutatja, ahol Gauss kezdő simító függvényt használtunk.



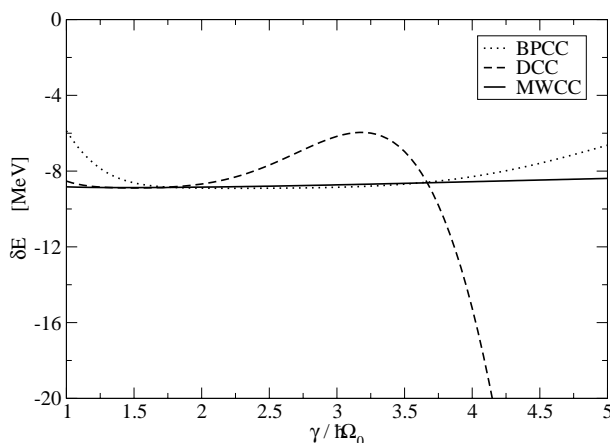
5.11. ábra. *Különböző módszerekkel számított héjkorrekció harmonikus oszcillátor potenciálra ($\hbar\Omega_0 = 6$ MeV, $N=70$), mint a simítási szélesség függvénye. A görbületkorrekció foka $p = 6$ és $p = 10$. A simító függvényeket Gauss kezdő simító függvényekből állapítjuk meg. Ebben az esetben PCC, BPCC és DCC ugyanazt a simító függvényt adja a simításra.*

Mivel a héjtávolságok értéke $\hbar\Omega_0$, a héjkorrekciókat csak $\gamma > \hbar\Omega_0$ esetben számoltuk ki, másképp a simított SPLD-ben a héjakbeli fluktuációk is megfigyelhetők lennének [49].

A PCC $p = 6$ -al jelölt görbe az 5.11. ábrán megegyezik a [28] munka eredményével. A héjkorrekció nagy abszolútértéke annak köszönhető, hogy a 70-es részecskeszám a harmonikus oszcillátor potenciálban mágikus szám. Annak érdekében, hogy lássuk a görbületkorrekció fokától való függést is, a számítást megismételtük $p = 10$ -re és ezt ábrázoltuk az 5.11. ábrán. Látható, hogy a vizsgált MWCC módszer γ -beli platótartománya körülbelül kétszer nagyobb a PCC módszer platótartományánál. Az is látható, hogy a görbületkorrekció fokának 6-ról 10-re történő emelése nem módosítja az MWCC módszer

eredményét, nagy változást eredményez azonban a PCC módszer esetében.

A Cosh-típusú kezdő simító függvényénél a héjkorrekciót az 5.12. ábra mutatja.



5.12. ábra. *Különböző módszerekkel számított héjkorrekció harmonikus oszcillátor potenciálra ($\hbar\Omega_0 = 6 \text{ MeV}$, $N=70$), mint a simítási szélesség függvénye. A görbületkorrekció foka $p = 6$. A simító függvényeket Cosh-típusú kezdő simító függvényekből állapítjuk meg.*

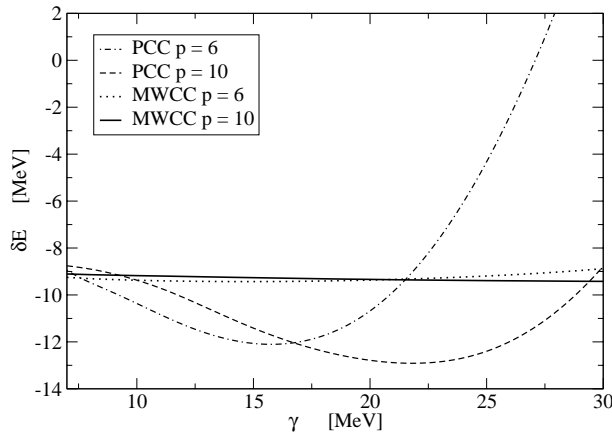
Ezt a simító függvényt használva meg tudjuk ítélni a DCC, MWCC és BPCC módszerek jóságát. Ebben az esetben is az MWCC módszer bizonyult a legjobbnak, mert ez adta a legnagyobb platótartományt. A BPCC és az MWCC módszerek eredményei csak nagy γ értékeknél térnek el. Ilyen nagy γ tartományban csak az MWCC módszer tartja meg a platófeltételt. A nagy platótartomány azért fontos, mert a globális tömegszámításoknál csak egy A -tól függő γ értéket használnak. Kívánatos, hogy ez a γ érték a platótartományba essen.

Mindezek után tanulmányozzuk a görbületkorrekciós módszerek tulajdonságait realizztikus potenciáloknál. Munkánkat a gömbszimmetrikus potenciálok vizsgálatára korlátozzuk. Spin-pálya taggal kiegészített Woods–Saxon-potenciált fogunk használni. A Woods–Saxon-potenciál paramétereit a [46] munkában adott univerzális parametrizálásnak megfelelően választottuk, ahogy azt az 5.3. részben megadtuk. Nagy különbség van a harmonikus oszcillátor és a realizztikus potenciál között. Amíg a h. o. potenciálnak csak kötött

állapotai vannak, addig a Woods–Saxon-potenciálnak a kötött állapotok mellett kontinuumja is van.

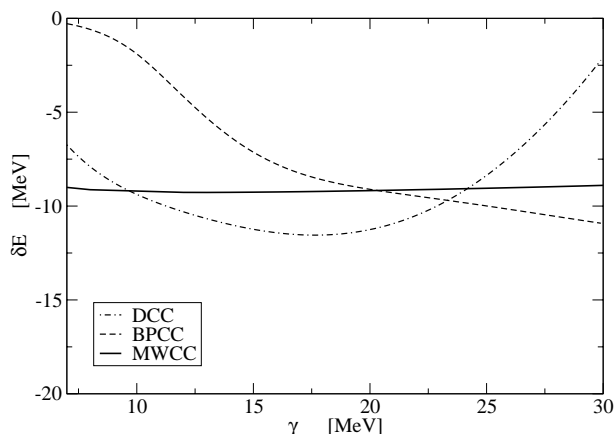
A c paraméter értékét ugyanúgy határozzuk meg, mint ahogy azt a harmonikus oszcillátor esetén tettük. Mivel véges számú kötött állapotunk van, az átlagoló ablak felső határának természetes értéke $\sum_{i=1}^{N_b} d_i$. Ez egy olyan atommaghoz tartozik, amiben minden kötött állapot betöltött. Az átlagoló ablak alsó határa $N = 50$ volt. Ellenőriztük, és azt találtuk, hogy az eredmény alig függött ettől az értéktől.

A ^{146}Gd mag neutron héjkorrekcióját az 5.13. és 5.14. ábra mutatja.



5.13. ábra. Különböző módszerekkel számított neutron héjkorrekció a ^{146}Gd magra, mint a simítási szélesség függvénye. Az egyrészecke-potenciál Woods–Saxon-potenciál spin-pálya taggal. A görbületkorrekció foka $p = 6$ és $p = 10$. A simító függvényeket Gauss kezdő simító függvényekből állapítjuk meg. Ebben az esetben PCC, BPCC és DCC ugyanazt a simító függvényt adja a simításra.

A Gauss kezdő simító függvény esetén (5.13. ábra) a görbületkorrekció foka $p = 6$ és $p = 10$ volt. Az eredményeket, melyeket Cosh-típusú kezdő simító függvényt használva nyertünk, az 5.14. ábra mutatja, ahol a görbületkorrekció foka $p = 14$ volt. Az 5.13. és 5.14. ábrából ugyanazt a következtetést vonhatjuk le. MWCC módszer esetén egy nagyobb platótartomány van, amiben a héjkorrekció gyakorlatilag független a γ értéktől. A többi héjkorrekciós módszernek nincs platója, ezek csak a lokális platófeltételnek tesznek eleget (a héjkorrekció γ szerinti deriváltja csak egyes γ pontokban zérus). A platófeltétel



5.14. ábra. Különböző módszerekkel számított neutron héjkorrekció a ^{146}Gd magra, mint a simítási szélesség függvénye. Az egyrészecske-potenciál Woods–Saxon-potenciál spin-pálya taggal. A görbületkorrekció foka $p = 14$. A simító függvényeket Cosh-típusú kezdő simító függvényekből állapítjuk meg.

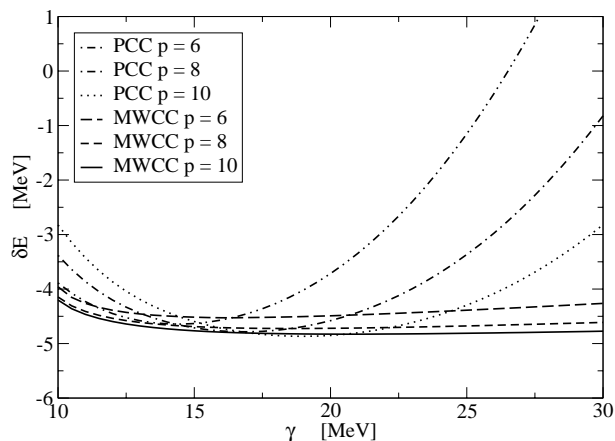
teljesülését kvantitatívvá tehetjük, ha meghatározzuk a héjkorrekció teljes variációját az adott γ intervallumon belül. Az 5.13. ábrát nézve az MWCC módszernek teljes variációja 0.3 MeV, míg a PCC módszeré 3 MeV. Harmonikus oszcillátornál az MWCC módszer héjkorrekciójának a teljes variációja csak 0.01 MeV. A platófeltétel természetesen nem teljesül olyan jól realiztikus potenciálnál, mint harmonikus oszcillátor esetében.

A görbületkorrekció fokától való függés ugyanolyan mértékű, mint a harmonikus oszcillátor esetén volt. Az MWCC módszer eredményei gyakorlatilag függetlenek a p paramétertől. PCC, DCC és BPCC módszereknél a héjkorrekció érzékeny a p értékre.

A héjkorrekciós módszerben a görbületkorrekció fokát és a simítási tartományt a platófeltétel határozza meg. Néhány esetben, pl. egyes könnyű atommagoknál a platófeltétel nem teljesült [26].

Nézzük meg, hogy mi a helyzet az új módszereknél. Vizsgáljuk ezért a ^{40}Ca könnyű atommagot. A ^{40}Ca neutron héjkorrekcióját az 5.15. ábra mutatja.

Az eredményeket PCC és MWCC módszerrel számítottuk ki. A görbületkorrekció foka $p = 6$, $p = 8$ és $p = 10$ volt. A részecskeszám most csak 20 volt, de hasonló eredmény figyelhető meg, mint a korábbi számításainknál, ahol a



5.15. ábra. Különböző módszerekkel számított neutron héjkorrekció a ^{40}Ca magra, mint a simítási szélesség függvénye. Az egyrészecske-potenciál Woods–Saxon-potenciál spin-pálya taggal. A görbületkorrekció foka $p = 6$, $p = 8$ és $p = 10$. A simító függvényeket Gauss kezdő simító függvényekből állapítjuk meg.

részecskeszám 82 volt. A héjkorrekció a γ függvényében stabilabb az MWCC módszernél, mint a PCC módszernél. A görbületkorrekció fokától való függés nem olyan jó, mint a nehezebb ^{146}Gd mag esetében. Az 5.15. ábráról leolvasható, hogy az MWCC módszer még a könnyű magtartományban is pontosabb eredményeket ad, mint a PCC módszer.

6. fejezet

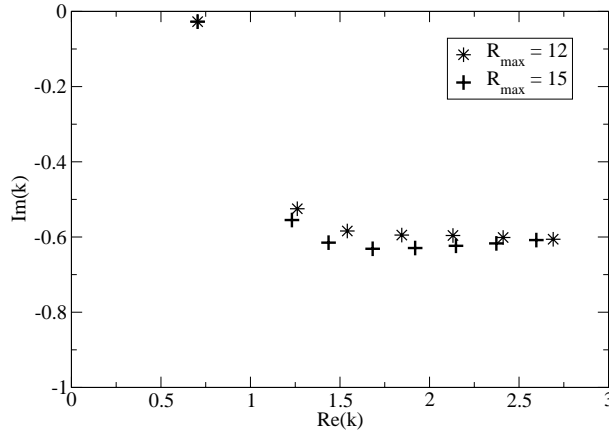
Egy új, fenomenologikus magpotenciál

Az atommagok rezonanciaállapotai napjainkban újra a figyelem középpontjába kerültek a radioaktív nyalábokat használó gyorsítóknál előállított nem, vagy gyengén kötött magoknak köszönhetően. Ezeknek a magoknak az elméleti leírására új modelleket vezettek be, pl. a Gamow-héjmodellt [50], ami a héjmodell olyan általánosítása, amiben az egyrészececske-bázis komplex energiájú rezonanciákat (Gamow-állapotokat) és szórési állapotokat is tartalmaz [51, 52].

A számításokban használt egyrészececske-potenciál Woods–Saxon alakú, mivel önkonzisztens számítások alapján az egy nukleon által érzékelt erős kölcsönhatás átlagos erőssége jól közelíthető a fenomenologikus WS-potenciállal (2.2.39), kiegészítve egy a WS-potenciál deriváltjával megegyező alakú spin-pálya taggal (2.2.40). Mivel azonban a WS-potenciál hatótávolsága végtelen, a rövid hatótávolságú magerők leírásához a csonkolt változatát használják, amiben egy véges R_{max} távolságon túl a potenciált nullával teszik egyenlővé.

Gyakorlati számításokhoz csak a csonkolt alakot (2.2.41) alkalmazzák. (A vágás miatt a potenciál deriváltja nem létezik az $r = R_{max}$ pontban.) A spin-pálya tagra ugyanilyen vágást alkalmaznak, vagyis a fenomenologikus potenciál R_{max} -on túl nullával egyenlő. Megfelelő $R_{as} \geq R_{max}$ sugarat választva illeszthetjük a radiális Schrödinger-egyenlet megoldását a (2.2.19) egyenletbeli aszimptotikus megoldáshoz és kiszámíthatjuk az S -mátrix pólusainak helyét az E komplex energiasíkon, vagy a k hullámszám-síkon. A kötött állapot pólusok helyének numerikus meghatározásával a 2.3. részben már foglalkoztunk. A

pólusoknak a komplex k -síkon való tipikus elhelyezkedését a 2.1. ábrán mutattuk be. Ezen pólusok közül azoknak van valódi fizikai tartalma, amelyek a valós tengelyekhez közel fekszenek. Egy adott parciális hullámban általában egy keskeny és több széles rezonancia található. Köztudott, hogy a keskeny rezonanciák helyzete gyengén függ az R_{max} vágási sugártól [53], azonban a széles rezonanciák esetén ez a függés jóval erősebb, ami a csonkolt WS-potenciál kellemetlen tulajdonsága. A 6.1. ábra erre a függésre mutat néhány példát.



6.1. ábra. Az $1h_{11/2}$ rezonancia pólusainak helyzete a komplex k -síkon, a Woods-Saxon-potenciál alapján, a következő paraméterértékek mellett: $V_0=50$ MeV, $R=4.6$ fm, $a=0.65$ fm és $R_{max}=15$ fm (plusszal jelölve), valamint $R_{max}=12$ fm (csillaggal jelölve).

A $k = (0.705, -0.027)$ fm $^{-1}$, $E = (10.49, -0.81)$ MeV értékeknél található $1h_{11/2}$ rezonancia kivételével, amely gyakorlatilag független az R_{max} értékétől, minden más rezonancia helyzete nagyon erősen függ tőle. A korábban tárgyalt héjkorrekció számításoknál kötött állapotokat használtunk, s ezek helye érzéketlen volt az R_{max} értékére. Vannak azonban olyan mennyiségek, amelyek számításánál fontos lehet a szélesebb rezonanciák pontos elhelyezkedése. A Green-függvény, illetve a válaszfüggvény kontinuum RPA [54] közelítésben történő pólus kifejtésében nagyon hasznosnak bizonyultak a széles rezonanciák.

Az R_{max} függés megmagyarázható, ha perturbációs számítás segítségével kiszámítjuk egy pólus energiájának változását. Jelöljük az n -edik pólus energiáját e_n -el, a hozzá tartozó normált radiális hullámfüggvényt $u_i(r, k_n)$ -el

az R_{max} sugárnál vágott $v_{tr}^{WS}(r)$ potenciálban. (Az i index itt n mellett az l, j kvantumszámokat is tartalmazza.) A pólusokban vett megoldások normálásához a [55] munkában szereplő Berggren-féle általánosított skalárszorzatot és a [56] munkában bevezetett komplex forgatást használtuk. Növeljük meg az R_{max} levágási sugarat ΔR -el. Ekkor a pólus energiájának megváltozását elsőrendben a következő kifejezés adja:

$$\Delta e_n = \int_{R_{max}}^{R_{max}+\Delta R} v^{WS}(r) u_i^2(r, k_n) dr \neq 0 . \quad (6.0.1)$$

Mivel a (2.2.39) egyenletbeli $v^{WS}(r)$ le nem vágott potenciál az integrációs tartományon nem nulla, az energia Δe_n megváltozása a radiális hullámfüggvény $u_i(r, k_n)$ integrációs tartományon vett viselkedésétől függ. Erősen kötött állapotok és keskeny rezonanciák esetén az $u_i(r, k_n)$ függvény értéke ebben a tartományban kicsi, így az R_{max} változtatása miatti energiaeltolódás elhanyagolható. Széles rezonanciák esetén azonban az $u_i(r, k_n)$ radiális hullámfüggvény értéke a tartományon nagy, ami nagy Δe_n értékeket eredményezhet. Mivel a publikációk többsége nem ad meg konkrét R_{max} értékeket, a széles rezonanciák helyzetének bizonytalansága emiatt jelentős lehet.

A potenciál simítási munkánkban [57] az volt a célunk, hogy bevezessünk egy olyan potenciált, amely már egy véges ρ értéknél egzaktul nullává válik, és a deriváltjai folytonosak (még az $r = \rho$ pontban is). Ilyen potenciál esetén a pólusenergia biztosan nem fog függni az R_{as} illesztési sugártól, ha $R_{as} \geq \rho$. Erre alkalmas lehet a következő függvényalak:

$$f_\rho(r) = \begin{cases} -e^{-\frac{r^2}{r^2-\rho^2}}, & \text{ha } r < \rho \\ 0, & \text{ha } r \geq \rho, \end{cases} \quad (6.0.2)$$

mert

$$\lim_{r \rightarrow \rho} f_\rho(r) = 0 . \quad (6.0.3)$$

Ennek az alaknak kellemes matematikai tulajdonsága, hogy minden rendű deriváltja eltűnik az $r = \rho$ pontban:

$$\left. \frac{d^n f_\rho(r)}{dr^n} \right|_{r=\rho} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.0.4)$$

Vagyis az n -ed rendű deriváltak még az $r = \rho$ pontban is folytonosak. Ilyen típusú potenciálra példa lehetne a következő egyszerű alak:

$$v_N(r) = c_0 f_\rho(r) , \quad (6.0.5)$$

ami azonban jelentősen különbözik a $v^{WS}(r)$ potenciáltól, ugyanis nem tartalmaz a WS alak diffuzitásának megfelelő paramétert.

Mivel a (2.2.41) egyenletbeli csonkolt $v_{tr}^{WS}(r)$ potenciálnak négy paramétere van (V_0 , R , a és R_{max}), célszerű ezt egy olyan véges potenciállal közelíteni, aminek szintén négy szabad paramétere van. Az új potenciál alakját a mag felületének közelében kell javítanunk, ezért olyan tagot adunk hozzá, amelynek itt van a maximuma. Az $f_\rho(r)$ első deriváltja

$$f'_\rho(r) = \frac{2r\rho^2}{(r^2 - \rho^2)^2} e^{\frac{-r^2}{r^2 - \rho^2}} \quad (6.0.6)$$

épp megfelelően viselkedik. Az új (SV) potenciál

$$v^{SV}(r) = -V_0 \mathcal{F}^{SV}(r) \quad (6.0.7)$$

alakú lesz, ahol az $\mathcal{F}^{SV}(r)$ alak a következő lineáris kombináció:

$$\mathcal{F}^{SV}(r) = c_0 f_{\rho_0}(r) + c_1 f'_{\rho_1}(r) = \mathcal{F}^{SV}(r, c_0, c_1, \rho_0, \rho_1) . \quad (6.0.8)$$

A (2.2.39) egyenletbeli $v^{WS}(r)$ potenciál a következő formájú:

$$v^{WS}(r) = -V_0 \mathcal{F}^{WS}(r) , \quad (6.0.9)$$

ahol

$$\mathcal{F}^{WS}(r) = \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} . \quad (6.0.10)$$

Annak érdekében, hogy az új potenciál alakja a lehető legjobban illeszkedjen a (6.0.10) egyenletbeli WS alakhoz, a következő integrált, mint az új paraméterek függvényét, minimalizálnunk kell:

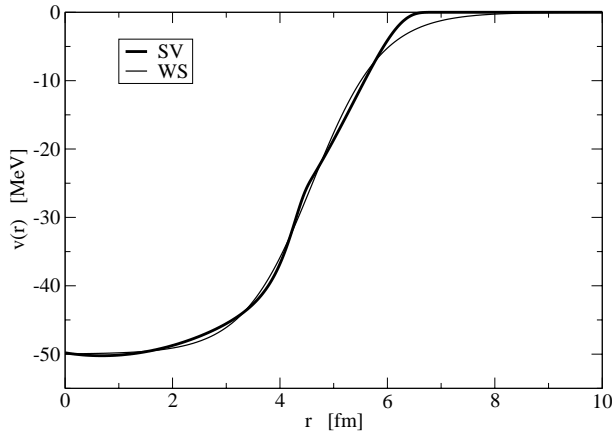
$$\Delta(\rho_0, \rho_1, c_0, c_1) = \int_0^{\rho_>} [\mathcal{F}^{SV}(r, c_0, c_1, \rho_0, \rho_1) - \mathcal{F}_{tr}^{WS}(r)]^2 dr , \quad (6.0.11)$$

ahol $\rho_> = \max(\rho_0, \rho_1)$ és $\mathcal{F}_{tr}^{WS}(r)$ a (2.2.41) egyenlet alapján

$$\mathcal{F}_{tr}^{WS}(r) = \begin{cases} \mathcal{F}^{WS}(r), & \text{ha } r < R_{max} \\ 0, & \text{ha } r \geq R_{max} . \end{cases} \quad (6.0.12)$$

A következőkben megpróbáljuk reprodukálni az $A = 50$ tömegszámú mag WS-potenciálját a következő tipikus paraméterértékek mellett: $V_0 = 50$ MeV, $r_0 = 1.25$ fm, $a = 0.65$ fm, $R_{max} = 15$ fm.

A többváltozós Δ funkcionál abszolút minimumának megtalálásához először a Downhill-szimplex módszert [58] használtuk véletlenszerűen kiválasztott kezdő szimplexekkel, majd a Powell-módszerre [59] váltottunk. Az illesztési integrál minimális értéke $\Delta = 0.136$ -nak adódott, a következő paraméterértékeknél: $\rho_0 = 7.1$ fm, $\rho_1 = 4.78$ fm, $c_0 = 0.996$, $c_1 = -0.292$. A 6.2. ábrán jól látható, hogy a (6.0.8) egyenletben bemutatott új, véges potenciál ezekkel a paraméterekkel jól visszaadja a centrális WS-potenciálalakot.



6.2. ábra. A Woods–Saxon-potenciál centrális tagjának ($V_0=50$ MeV, $R=4.6$ fm, $a=0.65$ fm) és a SV-potenciálnak az összehasonlítása ($\rho_0=7.1$ fm, $\rho_1=4.78$ fm, $c_0=0.996$ és $c_1=-0.292$).

A két alak közötti legnagyobb eltérés a külső régióban figyelhető meg, mivel az új potenciál $\rho_0 = 7.1$ fm-nél eléri a nullát, a csokolt WS-potenciál pedig ezt csak 15 fm-nél teszi. Megpróbáltunk összefüggéseket találni az új potenciál és az illesztett WS-potenciál paramétere között. Ebben az esetben a $\rho_1 = 4.78$ fm sugár egy kicsit nagyobb, mint a WS-potenciálvölgy sugara, $1.25A^{1/3} \approx 4.6$ fm. Azért, hogy ellenőrizzük az összefüggés általánosságát, megváltoztattuk az A tömegszámot a WS-potenciálban, $R = 1.25A^{1/3}$, és kiszámítottuk a legjobb illeszkedést adó paraméterértékeket. Azt találtuk, hogy $\rho_1/A^{1/3}$ jó közelítéssel megegyezik egy r_0 -nál kicsivel nagyobb állandó értékkel, tehát a ρ_1 paraméter a WS-potenciál R sugarára hasonlít. A ρ_0, ρ_1 sugarak különbsége ugyanazt a szerepet tölti be, mint a WS-potenciál diffúziós pa-

ramétere, ugyanis a nagyon könnyű ($A < 28$) magok kivételével fennáll a

$$\rho_0 - \rho_1 \approx 4a \quad (6.0.13)$$

összefüggés.

A két fenomenologikus potenciál összehasonlítása érdekében fontos az általuk generált egyrészecske-spektrumok összehasonlítása. Ahhoz, hogy reális fizikai héjstruktúrát kapjunk, helyesen kell megállapítanunk a spin-pálya potenciál erősségét és alakját. A GAMOW [34] program segítségével kiszámítottuk a kötött és rezonancia egyrészecske-állapotokat, V_{so} -t 10 MeV-nek véve a (2.2.40) egyenletben. A WS-potenciál esetében kapott értékeket a 6.1. táblázat második oszlopa tartalmazza.

n,l,j	Energia(WS)	Energia(SV)
1s _{1/2}	-39.14	-38.96
1p _{3/2}	-30.15	-30.13
1p _{1/2}	-28.93	-28.50
1d _{5/2}	-20.26	-20.53
1d _{3/2}	-17.67	-17.16
2s _{1/2}	-17.15	-17.29
1f _{7/2}	-9.81	-10.42
1f _{5/2}	-5.72	-5.05
2p _{3/2}	-6.78	-6.78
2p _{1/2}	-5.50	-5.03
2d _{5/2}	(1.05, -0.23)	(1.29, -0.29)
2d _{3/2}	(1.93, -0.92)	(2.85, -1.61)
1g _{9/2}	(0.72, -8.8×10^{-3})	(-0.10, 0.0)
1g _{7/2}	(5.58, -0.30)	(6.58, -0.40)

6.1. táblázat. *Kötött és rezonancia neutron egyrészecske-energiák összehasonlítása WS-potenciál és a SV-potenciál esetében az A=50 magra. Az összes energia MeV egységben van megadva.*

Az új SV-potenciál esetében a spin-pálya tagot a szokásos módon a (6.0.7) egyenletben szereplő centrális potenciál deriváltja ($1/r$)-szeresének vettük:

$$\begin{aligned} v_{so}^{SV}(r) &= -\frac{c_{so}}{rc_0} 2(\vec{l} \cdot \vec{s}) \frac{dv^{SV}(r)}{dr} = \\ &= -\frac{c_{so}}{r} 2(\vec{l} \cdot \vec{s}) \left[f'_{\rho_0}(r) + \frac{c_1}{c_0} f_{\rho_1}(r) \frac{2\rho_1^2(3r^4 - \rho_1^4)}{(r^2 - \rho_1^2)^4} \right]. \end{aligned} \quad (6.0.14)$$

A 6.1. táblázat harmadik oszlopában azok a kötött és rezonancia-energiaszintek állnak, amelyeket az új potenciállal (6.0.8) és az új spin-pálya taggal (6.0.14) kaptunk $c_{so} = 0.267c_0$ esetén. Ezzel a csatolási állandóval sikerült a legjobban illeszteniünk az adatokat a legkisebb négyzetek módszerének segítségével. Látható, hogy a WS-potenciál által generált spektrum héjstruktúráját sikerült elfogadhatóan reprodukálni a SV-potenciállal. A legnagyobb eltérések az $1f_{5/2}$ (0.67 MeV) és az $1f_{7/2}$ (0.61 MeV) pályák esetén adódnak. Le kell ellenőriznünk, hogy nehéz magok esetén is visszakapjuk-e a WS-potenciál spektrumát, ezért kiszámítottuk az egyrészecske neutron-állapotokat a ^{208}Pb magra. A WS-potenciálhoz a paramétereket a [60] munkából vettük ($V_0 = 44.4$ MeV, $r_0 = 1.27$ fm, $a = 0.7$ fm, $R_{max} = 15$ fm, $V_{so} = 16.5$ MeV). Ezt illesztve a (6.0.8) egyenletbeli alakkal, a következő paraméter értékeket kaptuk: $\rho_0 = 10.963$ fm, $\rho_1 = 8.328$ fm, $c_0 = 0.983$ és $c_1 = -0.997$. A centrális potenciálalakot így jól reprodukáltuk. Az új spin-pálya tagban a $c_{so} = 0.38c_0$ csatolási állandó adta a legjobb illeszkedést a WS-potenciálhoz, minden kötött energiaszintnél.

A 6.2. táblázat tartalmazza a WS-potenciál, illetve az új potenciálból számított Fermi-szint feletti egyrészecske-energiákat, lehetővé téve azok összehasonlítását.

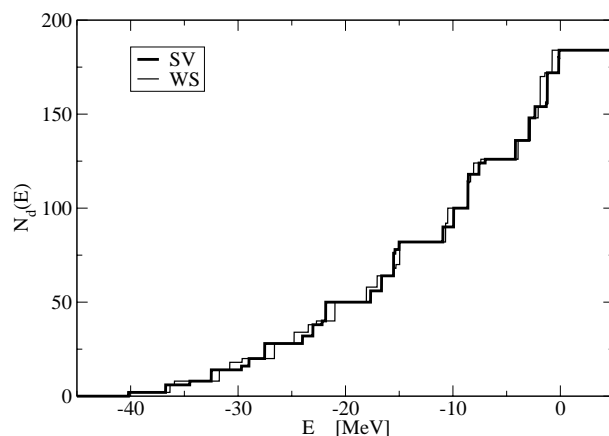
n,l,j	Energia(WS)	Energia(SV)
$2g_{9/2}$	-3.93	-3.92
$1i_{11/2}$	-2.80	-2.81
$3d_{5/2}$	-2.07	-2.00
$1j_{15/2}$	-1.88	-1.97
$4s_{1/2}$	-1.44	-1.31
$3d_{3/2}$	-0.78	-0.63
$2g_{7/2}$	-0.77	-0.50
$3f_{7/2}$	(2.10, -0.87)	(2.33, -0.95)
$2h_{11/2}$	(2.25, -0.026)	(2.41, -3.1×10^{-2})
$3f_{5/2}$	(2.70, -2.32)	(3.45, -2.59)
$1k_{17/2}$	(5.03, -1.26×10^{-3})	(4.87, -9×10^{-4})
$1j_{13/2}$	(5.41, -9.4×10^{-3})	(5.36, -8×10^{-3})

6.2. táblázat. *Fermi-szint feletti kötött és rezonancia neutron egyrészecske-energiák összehasonlítása a WS-potenciál és a SV-potenciál esetében az $A=208$ magra. Az összes energia MeV egységben van megadva.*

A részecskeszám függvény

$$N_d(E) = \sum_{i: e_i < E} d_i \quad (6.0.15)$$

módon van értelmezve. A WS-potenciálból, valamint az új potenciálból kapott kötött energiaszintek közötti összefüggést a 6.3. ábra mutatja, – az egyezés láthatóan nagyon jó.



6.3. ábra. Részecskeszám függvények összehasonlítása a SV-potenciál és a WS-potenciál esetén a ^{208}Pb magra.

6.1. További vizsgálatok

Újabbban azt vizsgáljuk, hogy az S -mátrix pólusai hogyan vándorolnak a magpotenciál V_0 erősségének függvényében a komplex k -síkon (E -síkon) különböző l értékek esetén a levágott WS-potenciálban, illetve a SV-potenciálban. A pólusok által leírt görbéket trajektóriának nevezik. Ismeretes, hogy lényeges különbség van az $l = 0$ és az $l > 0$ trajektóriák között [61]. A WS-potenciálbeli pólus trajektóriákat Bang és munkatársai vizsgálták [62], és azt tapasztalták, hogy a rezonancia-trajektóriák erősen függenek az R_{max} levágási sugártól. A mi kezdeti vizsgálataink [63] megerősítik ezt a függést. Azt találtuk, hogy a pólusok trajektóriái úgy függenek a WS-potenciál R_{max} értékétől, hogy a nagyobb R_{max}

érték esetén a trajektória $V_0 \rightarrow 0$ kezdőpontjának $Im(k_0)$ értéke fordítottan arányos az R_{max} értékkel, tehát $R_{max}Im(k_0)$ értéke egy adott rezonanciára állandó. Megjegyezzük, hogy az a közkeletű hiedelem, hogy a pólus helye gyakorlatilag nem függ R_{max} -tól, ezért R_{max} pontos értékét nem is szükséges megadni, téves. A SV-potenciál esetén ilyen függés természetesen nem létezik.

Tervezzük még a SV-potenciál kipróbálását a fúziós és a rugalmas szórás mérések egyidejű elméleti leírásában is. Ez utóbbira ugyanis a WS-potenciál nem volt alkalmas [64].

7. fejezet

Összefoglalás

Dolgozatomban két függvénsimítási probléma megoldásával foglalkoztam. Az első probléma a Mic-Mac magmodellben felhasználásra kerülő héjkorrekció pontosabb kiszámítása volt. A Mic-Mac modellben az atommag kötési energiáját két nagyon különböző magmodell kombinálásával számítjuk. A mikroszkopikus magmodellben a nukleonok mozgását a kvantummechanika keretében végezzük, a makroszkopikus modellben a magot makroszkopikus objektumnak, pl. folyadékcseppnek tekintjük, amire a klasszikus mechanika vonatkozik. Mivel a két modellbeli kötési energiák egyszerű összeadásával a nukleonok közötti kölcsönhatásokat duplán számolnánk, ezért a makroszkopikus energiához a mikroszkopikusan számolt kötési energiának csak azt a részét szabad hozzáadni, amiből a simán változó részt már leválasztottuk. Ez utóbbi a héjkorrekció. A mikroszkopikus leírást az egyszerűség kedvéért az egyrészeske-héjmodell keretében végeztük, és az ennek eredményeképpen kapott diszkrét energiaspektromot próbáltuk kisimítani. A simítás módjára kerestünk olyan módszereket, amelyek akkor is megbízhatóan alkalmazhatók, ha a mag spektrumának folytonos energiájú részét is figyelembe vesszük. A korábban erre az esetre alkalmazott módszerek nem voltak mentesek önkényes választásoktól a simítás folyamatában alkalmazott technikai paramétereket illetően. Az eddigi módszerek a simítást vagy a nívósűrűségben, vagy a részecskeszámban alkalmazták.

Strutinsky héjkorrekciós módszerében a simított nívósűrűséget konvolúcióval számítják ki. A görbületkorrekciónak az a célja, hogy teljesítse az önkonzisztencia-feltételt: a simításnak (konvolúciónak) egy sima függvényt változtatlanul kell hagynia. Polinomiális görbületkorrekciónak (PCC) nevezzük azt a módszert, amikor a simításhoz használt függvényt úgy kapjuk meg, hogy

a kezdő simító függvényt megszorozzuk egy polinommal.

Egyik javított módszerünk a polinomiális görbületkorrekció azon esete, amiben a végtelen hatótávolságú simítófüggvénynek véges hatótávolságúra cserélésével érünk el javulást [39]. Ez a változtatás lehetővé teszi, hogy egyetlen e_i energiájú egyrészecske-állapot hatását egy véges $[e_i - \gamma, e_i + \gamma]$ intervallumra lokalizáljuk. Ez a lokalizáció tette lehetővé, hogy a módszer alkalmazhatósági tartományát szélesítsük. Így könnyebben kiszámíthatóvá vált a héjkorrekció az elhullatási vonalak közelében elhelyezkedő, kismértékben kötött magok esetében, illetve könnyű magok esetén is. Ez az új módszer az ún. lokális platófeltételt használja. Megmutattuk, hogy az új módszer proton és neutron héjkorrekciók kiszámításánál egyaránt jól működik.

Vizsgáltuk még azt a módszert is, amelyben meghagyjuk a végtelen hatótávolságú simító függvényt, azonban ebből többféle szélességű tagokból összeállított alkalmas lineáris kombinációt használunk, amit több szélességű görbületkorrekciónak (MWCC) nevezünk. Szórási állapotok nélküli potenciálokra (harmonikus oszcillátor és hasonló potenciálok) a héjkorrekció a simítási szélesség függvényében minden görbületkorrekciós módszernél gyakorlatilag állandó, tehát kielégíti a platófeltételt. A platótartomány mérete azonban az MWCC módszernél sokkal nagyobb, mint a többi módszernél. Az MWCC módszernél belépő extra paraméter alkalmas megválasztásával elértük, hogy széles részecskeszám tartományon jól működő simító eljárást alkalmazunk. Az MWCC módszer igen fontos tulajdonsága, hogy használatával szórási állapotokat is tartalmazó spektrum esetén is teljesül a platófeltétel [40].

Mindkét simítási eljárásnak nagy előnye, hogy kiterjeszti a héjkorrekció megbízható számítását a könnyebb atommagok tartományára, ami a korábbi módszerek alkalmazásával nem volt lehetséges. A véges hatótávolságú PCC módszerrel még a neutronelhullatási vonal közeli magokra is kiterjeszthető a módszer.

A kétféle simítási módszer egymáshoz való viszonyának részletes feltárására további vizsgálatokat tervezünk.

A második simítási feladatban a fenomenologikus magpotenciál hibáját javítottuk ki egy alkalmasabb új potenciálsalak bevezetésével. A héjkorrekció számításainknál használt egyrészecske Hamilton-operátorban a levágott WS típusú fenomenologikus potenciálsalakot használtuk. A levágás miatt ez az alak matematikailag nem esztétikus, hiszen a levágás helyén szakadása van, s itt a deriváltja nem létezik. Az önkényes távolságban lévő levágás emellett jelentős hatással van a széles rezonanciák komplex energiájára, ami bizonyos esetekben jelentős bizonytalanság forrása lehet.

Ennek kiküszöbölésére bevezettünk egy új potenciálsalakot, az ún. SV ala-

ket [57], aminek deriváltjai mindenütt folytonosak, és a SV-potenciál véges hatótávolságú. Megmutattuk, hogy a SV-potenciál paramétereinek alkalmas megválasztásával a WS alakkal számolt energiák és a héjszerkezet jól közelíthetők. Ezért javasoljuk az általunk bevezetett SV-potenciál használatát a levágott WS forma helyett.

Summary

My PhD thesis deals with two sorts of smoothing tasks. The first task is to find an improved method for the calculation of the shell correction to be used in the Mic-Mac model. In the Mic-Mac model the binding energy of the nucleus is calculated by combining two very different nuclear models. In the microscopic model we calculate the motion of the nucleons in the nucleus in the framework of quantum mechanics. In the macroscopical model the nucleus is treated as a macroscopic object, and we describe it by the classical mechanics. If we would simply add the binding energies calculated in the two models, we would doublecount a major parts of the binding energy. Therefore we should add to the macroscopic binding energy only those part of the microscopic binding energy from which the smooth part has been deducted. This part of the microscopic energy is the shell correction. For the sake of simplicity, we work in the simple single-particle shell model. We have to smooth the discrete energy spectrum resulted by the single-particle shell model. Our task is to find reliable smoothing methods for spectra including not only discrete part but a continuum of scattering states as well. Earlier methods used so far were not free from the uncertainties caused by choosing the technical parameters of the smoothing procedures. These methods used either smoothing of the level density or smoothing in the particle number variable.

In the shell correction method introduced by Strutinsky the smoothed level density is calculated by using a convolution integral. The curvature correction should serve to fulfill the so-called self-consistency condition, which requires that the smoothing operation should not change a function which is already smooth. We call polynomial curvature correction the method in which the smoothing function is a product of the starting smoothing function and a polynomial.

In one of our improved method we change the original smoothing function with infinite-range to a smoothing with finite-range [39]. This change made it possible to localize the effect of a single e_i energy to a finite $[e_i - \gamma, e_i + \gamma]$ interval. This localization helped us to broaden the range of applicability of

our method. Our method made it possible to calculate more reliable values of the shell corrections for slightly bound nuclei being in vicinity of the drip lines and also for light nuclei. Our new method uses the local plato condition and we proved that it can be applied for the calculation of proton and neutron shell corrections.

In the first task, we studied another method in which we kept the infinite-range smoothing function but we used a suitable linear combination of smoothing functions with different widths. We called this method as multi width curvature correction (MWCC). If we apply any of the smoothing methods for potentials without continuum (harmonic oscillator like potentials), the plateau curves are practically independent of the smoothing width parameter, therefore the plateau condition is satisfied. However the length of the plateau is much wider for the MWCC method than for the other methods. By using a proper value for the extra parameter in the MWCC method, we get a properly working smoothing method for wide ranges of nuclei. An important feature of the MWCC method is that it works well even for potentials with scattering states and the plateau condition can be satisfied for these potentials too [40].

A great advantage of both smoothing procedures is that the range of the applicability can be extended for lighter nuclei, where the earlier methods could not be applied. The PCC method with finite-range can be used even for nuclei in the drip line region.

We plan to carry out further studies for the relation of the two smoothing methods.

In the second task, we cured an error of the widely used form of the phenomenological nuclear potential by introducing a new potential form. The single-particle Hamiltonian used in the calculation of the shell correction contained a truncated Woods–Saxon potential form. From a mathematical point of view this form is not nice due to the sharp cut, since it has a discontinuity at the cut-off radius, where their derivatives are not defined. The positions of the broad resonances in the complex energy-plane do depend on the value of the cut-off radius and this dependence causes a source of uncertainty if the value of the cut-off radius is not specified.

We introduced a new potential shape, the so-called SV potential, which has a finite-range and the new form and its derivatives are continuous in the whole range [57]. We showed how one can choose the parameters of the SV potential so that the single-particle energies calculated by using a WS potential shape are reproduced reasonably well. Since the shell structure of a WS potential can be reproduced by an SV potential too, we suggested to use the SV potential instead of the truncated WS potential.

Irodalomjegyzék

- [1] K. Blaum, Phys. Rep. **425**, 1 (2006).
- [2] D. Lunney, J. M. Pearson, C. Thibault, Rev. Mod. Phys. **75**, 1021 (2003).
- [3] O. Takaharu, M. Takahiro, H. Michio, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **25**, 699-715 (1999).
- [4] I. O. Morales, P. Van Isacker, V. Velazquez, J. Barea, J. Mendoza-Temis, J. C. López Vieyra, J. G. Hirsch, A. Frank, Phys. Rev. **C81**, 024304 (2010).
- [5] S. Goriely, F. Tondeur, J. M. Pearson, At. Data Nucl. Data Tables **77**, 311 (2001).
- [6] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A95**, 420 (1967).
- [7] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A122**, 1 (1968).
- [8] A. Bhagwat, X. Viñas, M. Centelles, P. Schuck, R. Wyss, Phys. Rev. **C81**, 053825 (2010).
- [9] F. Garcia, O. Rodriguez, J. Mesa, J. D. T. Arruda-Neto, V. P. Likhacchev, E. Garrote, R. Capote, F. Guzmán, Comp. Phys. Commun. **120**, 57 (1999).
- [10] W. Dudek, S. Cwiok, P. Kaszynski, Int. J. Mod. Phys. **E14**, 377 (2005).
- [11] K. Mahata, S. Kailas, S. S. Kapoor, Prog. Part. Nucl. Phys. **59**, 305 (2007).

-
- [12] A. Dobrowolski, B. Nerlo-Pomorska, K. Pomorski, *Act. Phys. Pol.* **40**, 705 (2009).
- [13] V. I. Zagrebaev, A. V. Karpov, W. Greiner, *Phys. Rev.* **C81**, 044608 (2010).
- [14] C. Yannouleas, U. Landman, *Phys. Rev.* **B48**, 8376 (1993).
- [15] S. Näher, S. Bjørnholm, S. Frauendorf, F. Garcias, C. Guet, *Phys. Rep.* **285**, 245 (1997).
- [16] S. Krückeberg, G. Dietrich, K. Lützenkirchen, K. Schweikhard, J. Ziegler, *Phys. Rev* **A60**, 1251 (1999).
- [17] F. Tondeur, *Nucl. Phys.* **A383**, 32 (1982).
- [18] K. Pomorski, *Phys. Rev.* **C70**, 044306 (2004).
- [19] A. Diaz-Torres, *Phys. Lett.* **B594**, 69 (2004).
- [20] C. K. Ross, R. K. Bhaduri, *Nucl. Phys.* **A188**, 566 (1972).
- [21] W. Nazarewicz, T. R. Werner, J. Dobaczewski, *Phys. Rev.* **C50**, 2860 (1994).
- [22] A. T. Kruppa, *Phys. Lett.* **B431**, 237 (1998).
- [23] T. Vertse, A. T. Kruppa, R. J. Liotta, W. Nazarewicz, N. Sandulescu, T. R. Werner, *Phys. Rev.* **C57**, 3089 (1998).
- [24] T. Vertse, A. T. Kruppa, W. Nazarewicz, *Phys. Rev.* **C61**, 064317 (2000).
- [25] M. Brack, R. K. Bhaduri, *Semi-classical Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1997).
- [26] P. Möller, J. R. Nix, W. D. Myers, W. J. Swiatecki, *At. Data Nucl. Data Tables* **59**, 185 (1995).
- [27] G. G. Bunatian, V. M. Kolomietz, V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys.* **A188**, 225 (1972).
- [28] M. Brack, H. C. Pauli, *Nucl. Phys.* **A207**, 401 (1973).

-
- [29] S. E. Liverhant, *Elementary Introduction to Nuclear Reactor Physics*, John Wiley & Sons (1960).
- [30] C. Mahaux, H. A. Weidenmüller, *Shell-Model Approach to Nuclear Reactions*, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, London (1969).
- [31] M. Abramowitz, I. A. Stegun, (Eds.). "Orthogonal Polynomials." Ch. 22 in *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 9th printing, New York, Dover (1972).
- [32] G. Szegő, *Orthogonal Polynomials*, American Mathematical Society (1939).
- [33] R. D. Woods, D. S. Saxon, *Phys. Rev.* **95** (1954).
- [34] T. Vertse, K. F. Pál, Z. Balogh, *Comput. Phys. Commun.* **27**, 309 (1982).
- [35] W. Ritz, Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik, *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, Vol. 135. (1909).
- [36] A. T. Kruppa, Z. Papp, *Comput. Phys. Commun.* **36**, 59 (1985).
- [37] M. Bender, P. H. Heenen, P. G. Reinhard, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 121 (2003).
- [38] P. G. Reinhard, M. Bender, W. Nazarewicz, T. Vertse, *Phys. Rev.* **C73**, 014309 (2006).
- [39] P. Salamon, A. T. Kruppa, T. Vertse, *Phys. Rev.* **C81**, 067422 (2010).
- [40] P. Salamon, A. T. Kruppa, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **37** 105106 (2010).
- [41] R. K. Bhaduri, C. K. Ross, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 606 (1971).
- [42] B. K. Jennings, *Nucl. Phys.* **A207**, 538 (1973).
- [43] B. K. Jennings, R. K. Bhaduri, M. Brack, *Phys. Rev. Lett.* **A34**, 228 (1975).
- [44] B. K. Jennings, R. K. Bhaduri, *Nucl. Phys.* **A237**, 149 (1975).
- [45] B. K. Jennings, R. K. Bhaduri, M. Brack, *Nucl. Phys.* **A253**, 29 (1975).

- [46] J. Dudek, Z. Szymański, T. R. Werner, Phys. Rev. **C23**, 920 (1981).
- [47] M. Centelles, P. Leboeuf, A. G. Monastra, J. Roccia, P. Schuck, X. Viñas, Phys. Rev. **C74**, 034332 (2006).
- [48] J. Roccia, P. Leboeuf, Phys. Rev. **C76**, 014301 (2007).
- [49] B. Mohammed-Azizi, D. E. Medjadi, Phys. Rev. **C74**, 054302 (2005).
- [50] N. Michel, W. Nazarewicz, M. Płoszajczak, T. Vertse, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **36** 013101 (2009).
- [51] R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu, T. Vertse, Phys. Rev. Lett. **89**, 042501 (2002).
- [52] N. Michel, W. Nazarewicz, M. Płoszajczak, K. Bennaceur, Phys. Rev. Lett. **89**, 042502 (2002).
- [53] A. I. Baz' , Y. B. Zeldovich, A. M. Perelomov, Scattering, Reactions, and Decay in Non-relativistic Quantum Mechanics, IPST No. 5149 Jerusalem (1969).
- [54] P. Lind, R. J. Liotta, E. Maglione, T. Vertse, Z. Phys. **A347**, 231 (1994).
- [55] T. Berggren, Nucl. Phys. **A109**, 265 (1968).
- [56] B. Gyarmati, T. Vertse, Nucl. Phys. **A160**, 523 (1971).
- [57] P. Salamon, T. Vertse, Phys. Rev. **C77**, 037302 (2008).
- [58] J. A. Nelder, R. Mead, Comput. J. **7**, 308 (1965).
- [59] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical Recipes in FORTRAN, The Art of Scientific Computing, 2. Ed., Cambridge University Press, Cambridge (1992).
- [60] P. Curutchet, T. Vertse, R. J. Liotta, Phys. Rev. **C39**, 1020 (1989).
- [61] R. G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles, Springer-Verlag, New York (1982).
- [62] J. Bang, S. N. Ershov, F. A. Gareev, G. S. Kazacha, Nucl. Phys. **A339**, 89 (1980).
- [63] P. Salamon, T. Vertse, Phys. Rev. **C**, *előkészületben*.

- [64] A. Mukherjee, D. J. Hinde, M. Dasgupta, K. Hagino, J. O. Newton, R. D. Butt, Phys. Rev. **C75**, 044608 (2007).

A jelölt publikációi

Megjelent publikációk

- P. Salamon, A. T. Kruppa, T. Vertse, *New method for calculating shell correction*, Phys. Rev. **C81**, 067422 (2010).
- P. Salamon, A. T. Kruppa, *Curvature correction in Strutinsky's method*, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **37** 105106 (2010).
- P. Salamon, T. Vertse, *New simple form for a phenomenological nuclear potential*, Phys. Rev. **C77**, 037302 (2008).
- P. Salamon, A. T. Kruppa, T. Vertse, *Shell correction with finite-range smoothing*, Atomki Annual Report (2008).
- P. Salamon, A. T. Kruppa, *Shell correction and function approximation*, Atomki Annual Report (2007).
- P. Salamon, T. Vertse, *New simple form for a phenomenological nuclear potential*, Atomki Annual Report (2007).

Előadások

- 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

- 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*.