

STUDIU-RAPORT DE CERCETARE nr. 1

PROIECTUL DE CERCETARE: *"Aplicații ale analizei matematice în teoria numerelor, optimizare, ecuații diferențiale, alte domenii de cercetare matematică sau multidisciplinară"*

COORDONATOR: Prof. Dan Tiba

RAPORTOR: Radu Budaca

OBIECTUL RAPORTULUI: Raportul are ca obiect activitatea de cercetare desfășurată pentru îndeplinirea obiectivului *"Studiul proprietăților spectrale ale soluției Hamiltonianului Bohr pentru un potențial sextic general având două minime de adâncimi diferite."* descris în propunerea de cercetare.

Introducere

Proprietățile macroscopice ale nucleelor atomice sunt de regulă descrise cu ajutorul unor modele colective. În particular, modelul Bohr-Mottelson [1] oferă o imagine fenomenologică consistentă printr-o descriere cuantică completă a fluctuațiilor suprafeței nucleare. Premisa acestui model este folosirea unor variabile geometrice asociate formei nucleare. Pentru cazul deformării cvadрупolare, se folosesc două variabile de formă, care împreună cu cele trei unghiuri Euler ce descriu rotațiile nucleare, formează un spațiu al fazelor de dimensiunea cinci. Hamiltonianul Bohr general asociat este construit ca suma unui operator cinetic cu o masă efectivă tensorială, definit în acord cu principiul de cuantificare Pauli-Podolski [2], și un potențial dependent doar de variabilele de formă. Diagonalizarea numerică a Hamiltonianului Bohr în forma sa cea mai generală a fost abordată încă de la introducerea modelului, materializându-se în așa-numitul Model Geometric Colectiv [3–6]. În ciuda succesului său, acest model suferă de mai multe neajunsuri, care îl fac dificil de implementat pentru calcule directe. Limitele exact rezolvabile [7,8] însă conțin puțini parametri și oferă calcule calitative surprinzător de bune. Totodată, aceste soluții sunt foarte bune doar pentru descrierea crudă a unor aspecte limitate ale excitațiilor colective. O varietate mai mare a comportărilor colective este în prezent accesibilă prin intermediul Modelului Algebric Colectiv [9], care reprezintă o variantă tractabilă computațional a modelului geometric colectiv general. Totuși, la fel ca în cazul soluțiilor analitice, complexitatea potențialelor colective abordabile este limitată la cazul

cu un singur minim global în spațiul variabilelor de deformare, chiar dacă de data aceasta curvatura minimului este arbitrară. Acest lucru, împiedică aplicarea efectivă a modelului la nuclee tranzitionale, ale căror forme, prin definiție și observație, nu sunt nici sferice și nici deformate.

Motivația

Potențialul critic pentru o tranziție de fază corespunde fie unei gropi plate ori unui profil cu două gropi. Primul caz implică un amestec maxim al formelor, în timp ce cea de-a doua situație corespunde unui scenariu în care cele două forme corespunzătoare gropilor de potențial coexistă [10]. Observațiile experimentale sugerează faptul că realitatea este undeva la mijloc. Lipsa unei forme determinate pentru nucleele tranzitionale constituie un impediment major pentru modelarea teoretică a punctului critic asociat acestora. Acest impas a fost oarecum ocolit inițial prin introducerea unor soluții particulare pentru Hamiltonianul Bohr bazate pe un potențial analitic de tip groapă dreptunghiulară infinită, care ignoră posibilă barieră ce ar separa cele două minime de deformare între care s-ar face tranziția de fază. Astfel de soluții cum ar fi $E(5)$ [11], $X(5)$ [12] și multe altele, au devenit în scurt timp adevărate puncte de referință pentru studiul atât teoretic cât și experimental al fenomenelor colective critice din nucleele atomice [13]. Astfel, s-a aflat că aceste soluții sunt strâns legate de simetria dinamică Euclidiană [14]. Acest rezultat vine ca o consecință a solvabilității exacte a acestor modele. Este atunci natural să presupunem că simetria dinamică Euclidiană ar putea juca un rol important și în descrierea unei tranziții de fază ce trece printr-un punct critic ce implică și coexistența de forme.

În cadrul acestui studiu, am considerat funcții Bessel de ordinul unu pentru diagonalizarea unui Hamiltonian Bohr pentru un potențial cu două minime în variabila de deformare β ce definește abaterea formei nucleare de la sfericitate. Funcțiile și implicit ecuația Bessel sunt strâns legate de simetria dinamică Euclidiană. Într-adevăr, operatorul Casimir al grupului Euclidian coincide cu ecuația pentru funcțiile Bessel de ordinul unu. Scopul propus este de a oferi o cale simplă pentru a obține spectrul energetic pentru cea mai simplă dar totodată cea mai generală formă a unui potențial colectiv cu două minime în variabila β . Gama imensă de aspecte spectrale și dinamice conținute într-un astfel de formalism este folosită pentru investigarea fenomenului de amestec și coexistență a formelor nucleare.

Metodologie

Se folosește Hamiltonianul Bohr [16]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2B} \left[\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\hat{\Lambda}^2}{\beta^2} \right] + V(\beta, \gamma), \quad (1)$$

unde B este masa considerată independentă de variabilele de deformare, iar

$$\hat{\Lambda}^2 = -\frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} + \sum_{k=1}^3 \frac{\hat{L}_k^2}{4 \sin^2(\gamma - 2\pi k/3)}, \quad (2)$$

este operatorul Casimir $SO(5)$ ce descrie rotațiile din spațiul cinci-dimensional. Funcția proprie a acestui operator Casimir este așa-numita armonică sferică $SO(5)$ $\mathcal{Y}_{\tau\alpha LM}(\gamma, \Omega)$ [17], ce este indexată de numărul cuantic de senioritate τ [18]. Senioritatea definește și valoarea proprie corespunzătoare a Casimirului $SO(5)$ [19]:

$$\hat{\Lambda}^2 \mathcal{Y}_{\tau\alpha LM}(\gamma, \Omega) = \tau(\tau + 3) \mathcal{Y}_{\tau\alpha LM}(\gamma, \Omega). \quad (3)$$

L este momentul cinetic intrinsec, M proiecția sa, iar α este numărul cuantic lipsă ce deosebește multiplele realizări ale aceluiași moment cinetic în cadrul unui multiplet de senioritate bine determinată. Dacă potențialul este funcție doar de variabila β , atunci întreg Hamiltonianul (1) va conține simetria grupului special ortogonal al rotațiilor în cinci dimensiuni $SO(5)$. În acest caz, funcția totală poate fi factorizată ca $\Psi_{\xi\tau\alpha LM} = R_{\xi\tau}(\beta) \mathcal{Y}_{\tau\alpha LM}(\gamma, \Omega)$, ξ jucând rolul numărului cuantic al excitațiilor datorate variabilei β . Această instanță a Hamiltonianului Bohr se spune că este γ -instabilă.

Pentru îndeplinirea obiectivului propus se va folosi potențialul sextic:

$$\frac{2B}{\hbar^2} V(\beta) = v(\beta) = \beta^2 - a\beta^4 + b\beta^6, \quad (4)$$

și metoda de diagonalizare introdusă în [10,15]. Acest potențial are două minime, cu unul în origine, atunci când $b > 0$ și $a^2 > 3b$. Diagonalizarea Hamiltonianului Bohr asociat unui astfel de potențial este realizată cu ajutorul unei baze construite ca o dezvoltare de tip Bessel-Fourier [20], unde funcțiile componente sunt definite astfel:

$$\tilde{R}_{\tau n}(\beta) = \frac{\sqrt{2}\beta^{-\frac{3}{2}} J_\nu(z_n^\nu \beta / \beta_W)}{\beta_W J_{\nu+1}(z_n^\nu)}. \quad (5)$$

Funcțiile bazei sunt determinate de o alegere potrivită a parametrului de limită β_W . Acesta definește o ecuație de tip radial pentru un potențial groapă infinită, a cărei soluții sunt exprimate ca funcții Bessel de ordinul unu J_ν cu $\nu = \tau + 3/2$ și zerourile sale z_n^ν . Soluția

finală reprezentată ca o dezvoltare Bessel-Fourier este atunci dată de:

$$R_{\xi\tau}(\beta) = \sum_{n=1}^{n_{Max}} A_n^\xi \tilde{R}_{\tau n}(\beta), \quad (6)$$

unde n_{Max} este dimensiunea bazei trunchiate, în timp ce ξ deosebește ordinul soluției diagonalizării matricii Hamiltonianului:

$$H_{nm} = \left(\frac{z_n^\nu}{\beta_W} \right)^2 \delta_{nm} + \frac{2 \sum_{i=1}^3 v_i (\beta_W)^{2i} I_{nm}^{(\nu\nu, 2i)}}{J_{\nu+1}(z_n^\nu) J_{\nu+1}(z_m^\nu)}, \quad (7)$$

unde $v_1 = 1, v_2 = -a, v_3 = b$. Integrala

$$I_{nm}^{(\nu\mu, k)} = \int_0^1 x^{k+1} J_\nu(z_n^\nu x) J_\mu(z_m^\mu x) dx, \quad x = \beta/\beta_W, \quad (8)$$

este determinată numeric sau apelând la relații de recurență [20].

Rezultate

Parametrul de limită ce definește baza de diagonalizare depinde în general de starea calculată, precizia cu care se dorește determinarea energiei acestei stări, de dimensiunea trunchierii bazei, precum și de potențialul folosit. În acest studiu, a fost fixat un parametru de limită β_W comun pentru toate stările considerate. Acest lucru a fost realizat prin fixarea în prealabil a dimensiunii bazei de diagonalizare și apoi creșterea incrementală a parametrului de limită începând cu valoarea unde se află cel de al doilea minim al potențialului, până când energiile tuturor stărilor considerate ating o convergență satisfăcătoare în ceea ce privește precizia prestabilită. Astfel, limita β_W va depinde doar de parametrul potențialului sextic și în consecință nu este un parametru liber. Avantajul bazei de diagonalizare folosite constă în faptul că partea solicitantă din punct de vedere computațional este reprezentată doar de integralele (8) care nu depind de nici un parametru. Astfel, aceste integrale trebuie calculate doar o singură dată și apoi factorizate de coeficienții a și b ai potențialului pentru a calcula matricea Hamiltonianului.

Pentru o mai bună înțelegere a dinamicii sistemului ce reiese din prezența a două minime în potențialul colectiv, ecuația diferențială (1) cu (4) este transcrisă într-o formă Schrödinger unidimensională prin schimbarea de funcție:

$$R_{\xi\tau}(\beta) = f_{\xi\tau}(\beta)/\beta^2. \quad (9)$$

Prin acest procedeu se obține potențialul efectiv:

$$v_{eff}(\beta) = \frac{\tau(\tau+3)+2}{\beta^2} + \beta^2 - a\beta^4 + b\beta^6. \quad (10)$$

Datorită contribuției centrifugale, minimum din zero al potențialului original este deplasat atât ca valoare cât și ca poziție în cadrul reprezentării potențialului efectiv. Această contribuție centrifugală ce vine de la gradele de libertate hyper-rotationale afectează chiar și starea fundamentală. Într-adevăr, atunci când $\tau = 0$, contribuția centrifugală $2/\beta^2$ nu dispare. În aceste condiții, este posibil ca un potențial colectiv sextic cu două minime să fie de fapt asociat unei probleme efective pentru un potențial cu un singur minim, fără efecte de coexistență. Din acest punct de vedere, se poate afirma că potențialul efectiv conține mai multă informație despre proprietățile dinamice ale sistemului descris.

Variația parametrilor a și b ce definesc potențialul sextic produce o mare diversitate de comportări dinamice colective incluzând și cazuri exotice [10]. Efectul variației adiabatică a fiecărui parametru asupra proprietăților spectrale este dificil de extras într-o manieră edificatoare. Este posibil totuși să se aleagă o cale în spațiul parametrilor a și b caracterizată de anumite proprietăți specifice ale potențialului sextic ce ar fi de interes. În acest studiu am ales să cercetez proprietățile oferite de modelul propus în cazul când potențialul efectiv pentru $\tau = 0$ ce descrie atât starea fundamentală cât și stările β excitate 0^+ , are două minime degenerate în energie. Evident, o astfel de restricție este orientată spre o interpretare geometrică a coexistenței de forme în stările de energie joasă și impune o relație funcțională între cei doi parametri a și b ai potențialului. Funcția $a = f(b)$ este determinată numeric și corespunde unei evoluții de la bariere înalte și subțiri consemnate de valori mici ale lui a la bariere joase și extinse obținute la valori mari ale lui a .

Pentru aplicațiile numerice am considerat o bază de dimensiunea $n_{Max} = 30$. O astfel de trunchiere a bazei și determinarea parametrului de limită β_W corespunzător, garantează că orice mărire a bazei va produce modificări ale energiilor considerate ce vor fi mai mici decât precizia prestabilită de 10^{-7} a energiilor absolute care sunt de ordinul unităților. Dat fiind faptul că baza de diagonalizare este special menită pentru potențiale cu mai multe minime, performanța acesteia este comparată cu tradiționala diagonalizare în baza stărilor oscilatorului armonic sferic din cinci dimensiuni. Se constată că în cazul parametrilor a și b ce realizează un potențial efectiv pentru starea fundamentală cu două minime degenerate și cu o barieră separatoare moderată ce permite tunelarea dintre ele, baza propusă cu parametrul fixat inițial pentru dimensiunea $n_{Max} = 30$ converge de două ori mai repede cu creșterea dimensiunii bazei decât în cazul funcțiilor de oscilator. Acest

lucru nu este întâmplător, deoarece bazele construite pe funcții de oscilator sferice sau deformate oferă un câștig în rata de convergență pentru un minim cu prețul scăderii preciziei pentru cel de al doilea minim al potențialului.

Fenomenologia asociată dinamicii sistemului din starea fundamentală și stările β excitate cu $\tau = 0$ ce urmează calea din spațiul parametrilor a și b corespunzătoare unui potențial efectiv pentru $\tau = 0$ cu două minime degenerate, poate fi extrasă din evoluția soluțiilor evidențiată în distribuția probabilității de deformare β :

$$\rho_{\xi\tau}(\beta) = [R_{\xi\tau}(\beta)]^2 \beta^4. \quad (11)$$

Astfel, pentru valori mici ale lui $a = f(\beta)$, atunci când bariera separatoare este foarte înaltă, starea fundamentală este localizată în groapa cu deformare mare, iar prima stare β excitată este localizată în groapa de deformare mică. În această situație, datorată impenetrabilității barierei separatoare, cele două stări precum și benzile rotaționale construite pe acestea până la o anumită frecvență nu interacționează între ele și posedă deformări β medii extrem de diferite. Din punct de vedere fenomenologic, această imagine corespunde unei coexistențe de forme nucleare definite ca existența într-un singur nucleu a unor seturi de stări cu caracteristici aparținând la forme foarte distincte [21].

Crescând parametrul a de-a lungul funcției $a = f(b)$ specificate, bariera devine mai joasă și începe să intervină tunelarea cuantică dintre cele două gropi, fapt reflectat într-un schimb de probabilitate de distribuție a deformării între cele două gropi de potențial. Când se întâmplă acest lucru, probabilitatea de distribuție a deformării pentru primele două stări 0^+ începe să prezinte o formă cu două vârfuri. Apariția celor două vârfuri în starea 0^+ β excitată este datorată formării unui nod în funcția de undă asociată. Acest lucru este specific unei stări excitate vibrațional unde cele două vârfuri emergente corespund la deformarea punctelor de întoarcere a vibrației [22]. Funcția de undă în variabila β a stării fundamentale, din contra, nu are un nod. Dar chiar și așa, totuși prezintă și ea o distribuție de probabilitate a deformării cu două vârfuri. Din punct de vedere fenomenologic, acest lucru este înțeles prin prisma fenomenului de coexistență în același nucleu dar și în aceeași stare, a două forme foarte diferite. În același raționament, excitația β este rezultatul unei vibrații mai generale între două minime [22–24]. Acest caz special este asociat cu așa-numitul fenomen de coexistență a formelor cu amestec [21].

În sfârșit, atunci când bariera separatoare este sub nivelul stării fundamentale, efectul

acesteia începe să scadă până devine complet neglijabil. Apogeul acestei tendințe constă în obținerea unei funcții de undă pentru starea fundamentală cu un profil al probabilității de deformare având un singur vârf foarte extins ce cuprinde ambele gropi de potențial. În același timp, starea $0^+ \beta$ excitată va căpăta un caracter vibrațional mult mai pronunțat. Toate aceste aspecte sunt bine-cunoscute ca fiind semnături ale fluctuațiilor mari ale formei nucleare ce au loc în punctele critice ale tranziției de fază dintre forma sferică și cea deformată a nucleului atomic.

Degenerarea stărilor teoretice conform grupului $SO(5)$ este rar regăsită în spectrele colective experimentale. Pentru a îmbunătăți aplicabilitatea formalismului, realizarea experimentală a acestuia este căutată cu un termen rotațional invariant la grupul $SO(3)$, folosit pentru desfacerea multipleților de senioritate în componente cu moment cinetic distinct. Justificarea teoretică a unui astfel de termen vine din considerente de simetrie. Modelul Bohr în general satisface o algebră Heisenberg-Weyl ce generează grupul $HW(5)$ [25]. Funcțiile de undă ale bazei de diagonalizare folosite în acest studiu sunt clasificate conform numerelor cuantice asociate lanțului de subgrupuri:

$$E(5) \subset SO(5) \subset SO(3) \subset SO(2), \quad (12)$$

$$\xi \quad \tau \quad L \quad M$$

unde $E(5)$ este simetria dinamică pentru soluția Hamiltonianului Bohr γ -instabil cu un potențial de tip groapă dreptunghiulară infinită pentru variabila β , iar $SO(D)$ sunt grupurile speciale ortogonale ale rotațiilor în $D = 2, 3$ și 5 dimensiuni. Atunci, produsul semi-direct $[HW(5)]E(5)$ definește grupul de simetrie dinamică care este potrivit pentru tratarea Hamiltonianului Bohr în varianta sa γ -instabilă cu un potențial ce are mai multe minime. Cea mai generală formă a Hamiltonianului într-o astfel de simetrie este dat de suma operatorilor Casimir din lanțul de subalgebre al grupului și un potențial în variabila β

$$H_{[HW(5)]E(5)} = c_1 C[E(5)] + c_2 C[SO(5)] + c_3 C[SO(3)] + V(\beta), \quad (13)$$

unde $c_i (i = 1, 2, 3)$ sunt parametri liberi. Operatorul Casimir al lui $E(5)$ este exact operatorul cinetic al Hamiltonianului Bohr, în timp ce $C[SO(5)] = \hat{\Lambda}^2$ iar $C[SO(3)] = \hat{L}^2$. Pentru o reproducere cantitativă a datelor experimentale cu un număr cât mai mic de parametri, cel de al doilea operator Casimir poate fi omis. Această alegere se rezumă la modificarea

Hamiltonianului (1) prin adunarea unui termen ce conservă simetria $SO(5)$, și anume \hat{L}^2 . Acesta are menirea de a desface multipletul τ de nivele energetice fără a schimba funcția de undă totală [26]. Acest lucru este posibil deoarece armonicile sferice $SO(5)$ sunt funcții proprii atât pentru \hat{L}^2 cât și pentru \hat{L}^2 și \hat{L}_3 cu valorile proprii $L(L + 1)$ și respectiv M .

Formalismul, fără nici o restricție impusă parametrilor a și b , a fost aplicat cu succes pentru descrierea stărilor de energie joasă ale nucleelor $^{96,98,100}\text{Mo}$, scoțând în evidență aspecte legate de coexistența de forme a acestor nuclee.

Referințe

- [1] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. 2, Benjamin, Reading, Massachusetts, 1975.
- [2] W. Pauli, *General Principles of Quantum Mechanics* (Springer, Berlin, 1980).
- [3] G. Gneuss, U. Mosel and W. Greiner, *Phys. Lett. B* **30**, 397 (1969).
- [4] G. Gneuss and W. Greiner, *Nucl. Phys. A* **171**, 449 (1971).
- [5] D. Habs, H. Klewe-Nebenius and K. Wisshak, *Z. Physik* **267**, 149 (1974).
- [6] P. O. Hess, M. Seiwert, J. Maruhn, and W. Greiner, *Z. Phys. A* **296**, 147 (1980).
- [7] L. Fortunato, *Eur. Phys. J. A* **26**, s01, 1 (2005).
- [8] P. Baganu and L. Fortunato, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **43**, 093003 (2016).
- [9] D. J. Rowe and J. L. Wood, *Fundamentals of nuclear models: Foundational Models* (World Scientific, Singapore, 2010).
- [10] R. Budaca and A. I. Budaca, *EPL* **123**, 42001 (2018).
- [11] F. Iachello, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3580 (2000).
- [12] F. Iachello, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 052502 (2001).
- [13] R. F. Casten, *Nature Phys.* **2**, 811 (2006).
- [14] R. Budaca and A. I. Budaca, *Phys. Lett. B* **759**, 349 (2016).
- [15] R. Budaca, P. Baganu, and A. I. Budaca, *Phys. Lett. B* **776**, 26 (2018).
- [16] A. Bohr, *Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk.* **26**, 14 (1952).
- [17] D. J. Rowe, P. S. Turner, and J. Repka, *J. Math. Phys.* **45**, 2761 (2004).
- [18] G. Rakavy, *Nucl. Phys.* **4**, 289 (1957).
- [19] D. R. Bes, *Nucl. Phys.* **10**, 373 (1959).
- [20] H. Taşeli and A. Zafer, *J. Comput. Appl. Math.* **95**, 83 (1998).
- [21] K. Heyde and J. L. Wood, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1467 (2011).
- [22] M. D. Harmony, *Chem. Soc. Rev.* **1**, 211 (1972).
- [23] Q. B. Chen, S. Q. Zhang, P. W. Zhao, R. V. Jolos, and J. Meng, *Phys. Rev. C* **94**, 044301 (2016).
- [24] R. Budaca, *Phys. Rev. C* **98**, 014303 (2018).
- [25] D. J. Rowe, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **37**, 265 (1996).
- [26] M. A. Caprio and F. Iachello, *Nucl. Phys. A* **781**, 26 (2007).

Data

17.07.2019

Radu Budaca