

Isovektori- spinmultipolivoimakkuudet ytimessä ^{90}Zr

Pro gradu -tutkielma, 01.09.2021

Tekijä:

ELINA KAUPPINEN

Ohjaaja:

JOUNI SUHONEN



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO
FYSIKAN LAITOS

© 2021 Elina Kauppinen

Julkaisu on tekijänoikeussäännösten alainen. Teosta voi lukea ja tulostaa henkilökohtaista käyttöä varten. Käyttö kaupallisiin tarkoituksiin on kielletty. This publication is copyrighted. You may download, display and print it for Your own personal use. Commercial use is prohibited.

Tiivistelmä

Kauppinen, Elina

Isovektorispinmultipolivoimakkuudet ytimestä ^{90}Zr

Pro gradu -tutkielma

Fysiikan laitos, Jyväskylän yliopisto, 2021, 45 sivua

Tässä tutkielmassa tarkasteltiin isovektorispinmultipolivirityksiä zirkonium-90 ytimestä. Tutkielmassa tutkittiin SIM, $L = 1$ ja $L = 2$ viritystilojen voimakkuuksia energian funktiona. Viritystilojen voimakkuudet laskettiin käyttämällä RPA- ja QRPA-menetelmiä. RPA-menetelmällä saatuja tuloksia verrattiin aikaisemmin tehdyn tutkimuksen vastaaviin tuloksiin.

Tässä työssä lasketut voimakkuusfunktiot olivat lähes vastaavat aikaisemman tutkimuksen tulosten kanssa, mutta kaikkien tilojen keskimääräiset energiat olivat hieman pienemmät kuin aikaisemmassa tutkimuksessa oli saatu. Tämä aiheutui suureksi osin siitä, että tässä tutkimuksessa saatiin viritystiloiille voimakkuutta myös alle 10 MeV:n energioilla, joita ei juurikaan havaittu aikaisemmassa tutkimuksessa.

Tutkielmassa verrattiin myös RPA- ja QRPA-menetelmillä saatuja alimpia energiatiloja kokeellisesti määritettyihin energiatiloihin. Huomattiin, että negatiivisen pariteetin tiloille lasketut energiat poikkesivat kokeellisista energioista huomattavasti enemmän kuin positiivisen pariteetin tiloille lasketuissa. QRPA-menetelmällä lasketut alimmat viritystilojen energiat olivat huomattavasti lähempänä kokeellisesti määritettyjä energiatiloja kuin RPA-menetelmällä lasketut energiat.

Avainsanat: isovektoriviritys, BCS-kvasihiukkaset, QRPA

Abstract

Kauppinen, Elina

Isovector spin-multipole strengths in nucleus ^{90}Zr

Master's thesis

Department of Physics, University of Jyväskylä, 2021, 45 pages.

In this thesis the isovector spin-multipole excitations in Zirconium-90 nucleus were examined. The excitation strengths for SIM, $L = 1$ and $L = 2$ states were observed as a function of energy. These excitation strengths were calculated by using RPA and QRPA methods. Results computed with RPA method were compared with corresponding results from the earlier research.

The computed strength functions were almost the same as in the earlier research but calculated average energies were slightly smaller for all states. This was mostly due to the fact that strength for less than 10 MeV was found in this thesis. This was not observed in the earlier research.

The lowest energy states calculated with the RPA and QRPA methods were also compared with experimentally observed lowest energy states. It was found out, that the calculated theoretical negative parity energy states differ considerably more from the experimental energies than the calculated positive parity states. Theoretical energies calculated with the QRPA method were much closer to the experimentally observed energy states than energies calculated with RPA method.

Keywords: isovector excitation, BCS-quasiparticles, QRPA

Sisällys

| | |
|---|-----------|
| Tiivistelmä | 3 |
| Abstract | 5 |
| 1 Johdanto | 9 |
| 2 Teoreettinen tausta | 11 |
| 2.1 Woods-Saxon yksihiukkasenergiatilat | 11 |
| 2.2 BCS-malli ja -kvasihiukkaset | 13 |
| 2.3 QRPA-menetelmä | 16 |
| 2.4 Siirtymät ja niiden voimakkuudet | 21 |
| 3 Tulokset | 29 |
| 3.1 RPA-menetelmä | 29 |
| 3.2 QRPA-menetelmä | 36 |
| 4 Päätäntö | 43 |
| Lähteet | 44 |

1 Johdanto

Tässä tutkielmassa tarkastellaan isovektorispinmultipolivoimakkuuksia zirkonium-90 ytimessä hyödyntämällä QRPA-menetelmää (*quasiparticle random-phase approximation*). Tutkittavassa ytimessä, ^{90}Zr , on 40 protonia ja 50 neutronia, joten sitä kutsutaan yleisesti puolimaagiseksi ytimeksi. Isovektorivirityksellä tarkoitetaan viritystä, jossa protonit ja neutronit värähtelevät toisiinsa nähden vastakkaisissa vaiheissa. Spinvirityksellä puolestaan tarkoitetaan sitä, että vastakkaissuuntaiset spinin (ylös, alas) omaavat nukleonit värähtelevät eri vaiheissa. [1] Tutkittavat multipolisiirtymät ovat pyörimismäärälle $L = 1$, jolle spin-pyörimismäärä on $S = 1$ ja kokonaispyörimismäärät ovat $J = 0^-, 1^-, 2^-$ sekä $L = 2$, jolle myös $S = 1$ ja $J = 1^+, 2^+, 3^+$. Tilaa $L = 1$ kutsutaan dipoliresonanssiksi ja tilaa $L = 2$ kvadrupoliresonanssiksi. Siirtymät lasketaan myös SIM-tilalle (*spin isovector monopole*), jossa koko ydin tiivistyy ja laajenee jaksottain. [1] Viritystilän voimakkuusfunktioiden avulla voidaan selvittää todennäköisyys ytimen siirtymiseen viritystilalle tietyllä energialla [2].

Tässä tutkielmassa on tarkoituksena vertailla saatuja RPA-tuloksia (*random-phase approximation*) aikaisemmin tehtyyn tutkimukseen, lähteessä [3] laskettuihin vastaaviin tuloksiin. Sekä RPA- että QRPA-menetelmien avulla laskettuja viritystilojen energioita verrataan myös kokeelliseen dataan. Näin voidaan selvittää, kuinka hyvin käytetty teoria antaa kokeellisesti määritettyjen ytimen viritystilojen energioita vastaavia tuloksia.

Sekä verrattavassa tutkimuksessa [3] että tässä tutkimuksessa on käytetty voimakkuusfunktioiden selvittämiseen RPA-menetelmää, joten tuloksia on mielekästä verrata. Tässä tutkielmassa otetaan kuitenkin hieman eri lähestymistapa RPA-yhtälöiden johtamiseen kuin lähteessä [3]. Tässä työssä (Q)RPA-yhtälöt johdetaan käyttämällä liikeyhtälöitä (*Equations of Motion*) ja verrattavassa lähteessä ne johdetaan käyttämällä Greenin yhtälöitä. Kun voimakkuusfunktiot on saatu laskettua RPA-menetelmällä, lasketaan voimakkuusfunktiot myös QRPA-menetelmällä. QRPA-menetelmässä, eli RPA-menetelmässä kvasihiukkasille, otetaan nimensä mukaisesti kvasihiukkaset huomioon laskuissa. Tässä tapauksessa kyse on BCS-kvasihiukkasista, jotka koostuvat nukleoniparista. Koska kyseessä on puolimaaginen ydin eli neut-

roneita on maaginen lukumäärä, vain protonien pariutuminen otetaan huomioon. Tämän jälkeen voidaan verrata QRPA-menetelmällä laskettuja voimakkuuksia RPA-menetelmällä ja samalla myös artikkelissa [3] saatuihin voimakkuuksiin.

Tutkielma alkaa työn kannalta oleellisen teorian läpikäymisellä. Teoriaosuudessa selvitetään ensin Woods-Saxon yksihiukkastilojen energiat, minkä jälkeen siirrytään BCS-kvasihiukkasiin ja niiden avulla BCS-malliin. Näiden jälkeen tutustutaan QRPA-menetelmään ja johdetaan QRPA-yhtälöt. Työssä hyödynnetään RPA- ja QRPA-menetelmiä kyseisen ytimen viritystilojen voimakkuuksien selvittämiseen. RPA- ja QRPA-menetelmiin perehdytään tässä työssä lähinnä viritysten siirtymien laskujen tukena. Menetelmiin voi perehtyä syvällisemmin esimerkiksi lähteissä [4, 5]. Lopulta johdetaan siirtymäamplitudit ja -voimakkuudet, joiden avulla tulokset lasketaan. Teoreettisten lähtökohtien jälkeen tarkastellaan tutkielmassa laskettuja tuloksia ja verrataan niitä aikaisempiin tuloksiin ja kokeelliseen dataan. Lopuksi päätetään tutkielma yhteenvetoon.

2 Teoreettinen tausta

Tässä luvussa käydään tutkielman kannalta oleellinen teoreettinen tausta läpi. Tutustutaan muun muassa yksihiukkasenergiatiloihin Woods-Saxon -potentiaalissa, BCS-kvasihiukkasiin sekä BCS-malliin ja työn laskuissa käytettyyn menetelmään eli QRPA-menetelmään. Tässä luvussa lähteenä on käytetty lähdeä [4], jollei toisin ole mainittu.

2.1 Woods-Saxon yksihiukkasenergiatilat

Ytimet, varsinkin raskaammat ytimet, koostuvat monista nukleoneista, jotka kaikki vuorovaikuttavat keskenään. Ydintä voidaan siis käsitellä monen kappaleen ongelmana. Analyyttisten ratkaisujen kehittäminen monen kappaleen systeemille on vähintäänkin vaikeaa ja työlästä, jollei jopa mahdotonta. Tämän takia on otettu käyttöön keskeiskenttäpotentiaali, jossa tarkoituksena on ajatella yhden nukleonin kokevan muiden nukleonien muodostavan keskeiskentän, jonka kanssa tämä nukleoni on vuorovaikutuksessa. Työssä keskeispotentiaalina käytetään Woods-Saxon -potentiaalia (WS-potentiaali) sekä protonien välillä vaikuttavaa Coulombin potentiaalia. Huomioidaan myös spin-orbit -vuorovaikutus, joka hajottaa saman pyörimismäärän l tilan kahdeksi tilaksi, $j = l \pm 1/2$. Tällöin pystytään ottamaan huomioon maagiset luvut ja niitä vastaavat energia-aukot. Käyttämällä Woods-Saxon ja Coulombin potentiaalia sekä huomioimalla spin-orbit -vuorovaikutus Hamiltonin operaattori saadaan muotoon

$$h = \frac{-\hbar^2}{2m_N} \left(\nabla_r - \frac{\mathbf{L}^2/\hbar^2}{r^2} \right) + v_{WS}(r) + v_C(r) + v_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (1)$$

jossa kineettisen energian termissä ensimmäinen osa, ∇_r , kuvaa radiaalista osaa ja sulkujen sisällä oleva toinen termi kulmaosaa, $v_{WS}(r)$ on Woods-Saxon -potentiaali ja $v_C(r)$ puolestaan Coulombin potentiaali ja viimeinen termi ottaa huomioon spin-orbit-vuorovaikutuksen. Nukleonien massojen arvioidaan olevan samansuuruiset ja

niitä merkitään m_N :llä. Woods-Saxon-potentiaali voidaan kirjoittaa muodossa

$$v_{WS}(r) = \frac{-V_0}{1 + e^{(r-R)/a}}, \quad (2)$$

jossa $R = r_0 A^{1/3} = 1,27 A^{1/3}$ fm on ytimen säde, A on ytimen massaluku, $a = 0,67$ on ytimen pinnan diffusiivisuus (surface diffuseness), joka kuvaa ytimen pinnan paksuutta, ja V_0 on ytimestä riippuva vakio. V_0 voidaan laskea seuraavasti

$$V_0 = \left(51 \pm 33 \frac{N - Z}{A} \right) \text{MeV}, \quad (3)$$

jossa N , Z kuvastavat neutronien ja protonien lukumääriä. Plusmerkkiä käyttämällä saadaan V_0 laskettua protoneille ja miinusmerkillä neutroneille. Coulombin potentiaali on puolestaan määritelty

$$v_C(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \begin{cases} \frac{3-(r/R)^2}{2R}, & r \leq R \\ \frac{1}{r}, & r > R. \end{cases} \quad (4)$$

Spin-orbit -vuorovaikutus voidaan kirjoittaa muodossa

$$v_{LS}(r) = v_{LS}^{(0)} \left(\frac{r_0}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{r} \left[\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + e^{(r-R)/a}} \right], \quad (5)$$

jossa $v_{LS}^{(0)} = 0,44V_0$.

Hamiltonin operaattori koostuu myös termeistä, joissa on osana \mathbf{L}^2 ja $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$. Tiedetään seuraavat

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 |l \frac{1}{2} jm\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |l \frac{1}{2} jm\rangle \\ \mathbf{J}^2 |l \frac{1}{2} jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |l \frac{1}{2} jm\rangle \\ \mathbf{S}^2 |l \frac{1}{2} jm\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2 |l \frac{1}{2} jm\rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

Avaamalla \mathbf{J}^2 , saadaan laskettua $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$. Nyt siis $\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S}^2$, josta saadaan

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2), \quad (7)$$

jolloin kun $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ operoi ominaistilaan $|l\frac{1}{2}jm\rangle$ saadaan

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}|l\frac{1}{2}jm\rangle = \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] |l\frac{1}{2}jm\rangle. \quad (8)$$

Otetaan nyt ominaistilassa huomioon myös täydentävä lisäkvanttiluku n , jolloin ominaistila saadaan muotoon $|nl\frac{1}{2}jm\rangle$. Operoidaan sitten Hamiltonin operaattorilla (1) ominaistilaan ja saadaan

$$\begin{aligned} h|nl\frac{1}{2}jm\rangle &= \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_N} \left[\nabla_r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - v_{WS}(r) + v_C(r) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \hbar^2 v_{LS}(r) \right\} |nl\frac{1}{2}jm\rangle \\ &= h_{lj}(r) |nl\frac{1}{2}jm\rangle \\ &= \varepsilon_{nlj} |nl\frac{1}{2}jm\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Energia ε_{nlj} ei riipu projektiokvanttiluvusta m , koska kaikki suunnat ovat ekvivalentteja keskenään pallomaisesti symmetriselle Hamiltonin operaattorille. Merkitään nyt $|nl\frac{1}{2}jm\rangle = f_{nlj}|l\frac{1}{2}jm\rangle$, jolloin yhtälö (9) saadaan differentiaaliyhtälöksi muotoon

$$h_{lj}(r)f_{nlj}(r) = \varepsilon_{nlj}f_{nlj}(r). \quad (10)$$

Ratkaisemalla yhtälö (10) saadaan tuloksena ominaisenergiat ε_{nlj} ja ominaisfunktiot $f_{nlj}(r)$ ratkaistua.

2.2 BCS-malli ja -kvasihiukkaset

BCS-mallilla pystyttiin alunperin perustelemaan suprajohtavuutta metalleissa [6]. Mallin esitteli John Bardeen, Leon Cooper ja John Robert Schrieffer, joiden nimistä malli on saanut myös nimensä. Suprajohtavissa metalleissa kahden elektronin välille syntyy pitkän kantaman efektiivinen vetovoima metallisidoksen positiivisten ionien takia. Metallisidoksessa elektronit liikkuvat lähes vapaina metalliatomien ydinten ympärillä. Yksi elektroni vetää puoleensa positiivisia ioneja ja tällöin positiiviset ionit vetävät toista elektronia puoleensa. Tällöin näiden kahden elektronin välille syntyy efektiivinen vetovoima ja ne muodostavat parin, niin sanotun komposiittibosonin, jota kutsutaan Cooperin pariiksi. Elektronit ovat fermioneja, mutta pariutuessaan

ne muuttuvat bosonisiksi pareiksi. [7] Tällöin Paulin kieltoääntö ei enää päde ja samalla kvanttitalalla voi olla useampia pareja. Syntyneet efektiiviset bosoniset parit kondensoituvat perustilalle synnyttäen suuren energiaeron perustilan ja viritystilojen välille. Tällöin matalilla lämpötiloilla hilasta siroavat elektronit eivät pysty ylittämään energiaeroa. Niinpä elektronit pysyvät perustilalla, mutta eivät kuitenkaan menetä energiaansa. Näin virta pystyy kulkemaan ilman vastusta. [4]

Samalla tavalla on huomattu myös tapahtuvan atomien ytimissä, joissa valenssinukleonit kokevat ydinvoiman lyhyen kantaman komponentista aiheutuvaa vahvaa vetovoimaa muita valenssinukleoneja kohtaan. Tämän voiman takia ytimessä olevat protonit ja neutronit pariutuvat.

Yrite BCS-perustilalle on muotoa

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\alpha>0} (u_\alpha - v_\alpha A_\alpha^\dagger) |\text{CORE}\rangle, \quad (11)$$

jossa u_α ja v_α ovat miehitysparametreja, v_α^2 :n kuvatessa yksihiukkasorbitaalin miehitystodennäköisyyttä ja u_α^2 :n kuvatessa miehittämättömyystodennäköisyyttä, ja operaattori A_α^\dagger on määritelty seuraavasti

$$A_\alpha^\dagger = c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger. \quad (12)$$

Alaindeksit α ja a merkitsevät seuraavaa $\alpha = (a, m_\alpha)$ ja $a = (n_a, l_a, j_a)$, joissa m_α , n_a , l_a ja j_a merkitsevät orbitaalilla α sijaitsevan hiukkasen magneettista-, lisä-, pyörimismäärä- ja kokonaispyörimismääräkvanttilukua. Tildeoperaattori on määritelty seuraavasti $\tilde{c}_\alpha = (-1)^{j_a+m_\alpha} c_{-\alpha}$, jossa $c_{-\alpha} = c_{a,-m_\alpha}$. Yhtälössä (11) $|\text{CORE}\rangle$ tarkoittaa tietyn ytimen alimpia tiloja, jotka eivät vaikuta viritystilojen muodostumiseen. Tarkastellaan BCS-perustilan yritettä (11). Ottamalla u_α yhteiseksi tekijäksi, yhtälö saadaan muotoon

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\alpha>0} u_\alpha \left(1 - \frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle. \quad (13)$$

Kehitetään nyt eksponenttifunktio-operaattori $\exp\left(-\frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right)$ Taylorin sarjaksi. Tällöin saadaan

$$e^{-\frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger} = e^{-\frac{v_\alpha}{u_\alpha} c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger} = 1 - \frac{v_\alpha}{u_\alpha} c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger + 0 = 1 - \frac{v_\alpha}{u_\alpha} c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger = 1 - \frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger. \quad (14)$$

Edellinen summa katkeaa kahden termin jälkeen operaattoreiden antikommutaatio-

relaatioiden takia. Sijoitetaan tämä nyt yritteeseen (11), jolloin saadaan

$$\begin{aligned}
|\text{BCS}\rangle &= \prod_{\alpha>0} (u_\alpha - v_\alpha A_\alpha^\dagger) |\text{CORE}\rangle = \prod_{\alpha>0} u_\alpha (1 - \frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger) |\text{CORE}\rangle \\
&= \prod_{\alpha>0} u_\alpha \exp\left(-\frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle = \prod_{\beta>0} u_\beta \prod_{\alpha>0} \exp\left(-\frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle \quad (15) \\
&= \prod_{\beta>0} u_\beta \exp\left(-\sum_{\alpha>0} \frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle.
\end{aligned}$$

Käytetään hyväksi eksponenttifunktion sarjakehitelmää

$$e^x = \sum_n \frac{x^n}{n!}, \quad (16)$$

jolloin yhtälö (15) saadaan muotoon

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\beta>0} u_\beta \sum_n \frac{1}{n!} \left(-\sum_{\alpha>0} \frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right)^n |\text{CORE}\rangle. \quad (17)$$

Merkitään nyt

$$|N\rangle \equiv \left(-\sum_{\alpha>0} \frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right)^{N/2} |\text{CORE}\rangle, \quad (18)$$

jossa N on nukleonien lukumäärä. Nyt siis BCS-perustila on muotoa

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\beta>0} u_\beta \sum_{N=\text{parillinen}} \frac{1}{(N/2)!} |N\rangle. \quad (19)$$

Nyt johdettu $|\text{BCS}\rangle$ on vakuumi BCS-kvasihiukkasille. BCS-perustilassa yksittäiset nukleonit ovat pariutuneet, minkä takia muutetaan $n \rightarrow N/2$. Tästä huomataan, että BCS-vakuumilla ei ole hyvää hiukkaslukua, vaan se on lineaarikombinaatio parillisista hiukkasluvuihin.

Nyt käsiteltävien BCS-kvasihiukkasten luomis- ja hävitysoperaattorit, a_α^\dagger ja a_α , voidaan määrittellä seuraavien yhtälöiden avulla

$$\begin{aligned}
a_\alpha^\dagger &= u_\alpha c_\alpha^\dagger + v_\alpha \tilde{c}_\alpha \\
\tilde{a}_\alpha &= u_\alpha \tilde{c}_\alpha - v_\alpha c_\alpha^\dagger.
\end{aligned} \quad (20)$$

Yhtälöitä kutsutaan Bogoliubov-Valatinin muunnokseksi ja hävitysoperaattori on määritelty \tilde{c}_α avulla. Kvasihiukkasten luomis- ja hävitysoperaattorit ovat siis lineaarikombinaatioita hiukkasoperaattoreista. Luomisoperaattorin voidaan siis ajatella luovan hiukkasen orbitaalille α todennäköisyydellä v_a^2 ja aukon todennäköisyydellä u_a^2 . BCS-kvasihiukkanen on siis lineaarikombinaatio hiukkasesta ja aukosta.

Jotta ydin voisi virittyä vitystilalle BCS-perustilalta, tarvitsee rikkoo vähintään yksi nukleonipari. Tämä ei kuitenkaan riitä, vaan tarvitaan lisäksi nukleonien sidosenergian verran energiaa, jotta viritys tapahtuu. Kun pari hajoaa, syntyy kaksi kvasihiukkasta, joiden energiat voidaan ilmoittaa seuraavasti

$$E_a = \sqrt{\eta_a^2 + \Delta_a^2} \geq \Delta_a. \quad (21)$$

Edellisessä η_a on määritelty seuraavasti

$$\eta_a = \varepsilon_a - \lambda - \mu_a, \quad (22)$$

jossa ε_a on hiukkasen yksihiukkasenergia, λ kemiallinen potentiaali ja μ_a hiukkasen itseisenergia. Tällöin siis kahden kvasihiukkasen vitystilan energia on

$$E_{2\text{qp}} \geq 2\Delta_{\text{pienin}}. \quad (23)$$

Yhtälössä (21) esiintyvää Δ_a :ta kutsutaan pariaukoksi ja yhtälössä (23) esiintyvää termiä $2\Delta_a$ puolestaan kutsutaan pariutumisenenergiaksi.

2.3 QRPA-menetelmä

RPA-menetelmä on lyhenne sanoista *random-phase approximation* eli satunnaisvaiheaprossimaatio. Nimi juontaa juurensa kiinteän olomuodon fysiikasta ja liittyy oletukseen, että Hamiltonin operaattori sisältää osan, jonka termit kumoavat toisensa satunnaisesti. [8] RPA-menetelmässä tavallinen Hartree-Fock hiukkas-aukko-vakuu korvataan RPA-vakuulla, joka on korrelaatioperustila, joka sisältää usean hiukkasen - usean aukon vitykset. [4] QRPA-menetelmä on puolestaan lyhenne sanoista *quasiparticle random phase approximation*, eli RPA-menetelmä kvasihiukkasille. QRPA-menetelmä on laajennettu versio RPA-menetelmästä. Tässä menetelmässä otetaan huomioon luvussa 2.2 esitellyt BCS-kvasihiukkaset ja niiden kontribuutiot RPA-menetelmään.

Työssä tarkastellaan QRPA-menetelmän avulla laskettujen viritysten voimakkuutta. QRPA-yhtälöt voidaan johtaa monella eri tavalla. Eräs tapa johtaa QRPA- (ja RPA-yhtälöt) on käyttää hyväksi Greenin funktioita, kuten [3] julkaisussa on tehty. Tässä tutkielmassa yhtälöt johdetaan lähtien liikkeelle liikeyhtälöistä, jotka ovat muotoa

$$\langle \Psi_0 | [\delta Q, H, Q_\omega^\dagger]_\pm | \Psi_0 \rangle = E_\omega \langle \Psi_0 | [\delta Q, Q_\omega^\dagger]_\pm | \Psi_0 \rangle, \quad (24)$$

jossa Ψ_0 tarkoittaa perustilaa, Q_ω^\dagger on luomisoperaattori ja δQ sen variaatio. Yhtälön vasemmalla puolella on tuplakommutaattori, joka määritellään seuraavasti

$$[A, B, C]_\pm = \frac{1}{2} \left([A, [B, C]]_\pm + [[A, B], C]_\pm \right) \quad (25)$$

Plus-miinus -merkillä erotellaan kommutaattorit antikommutaattoreista

$$\begin{aligned} [A, B]_- &= [A, B] = AB - BA \\ [A, B]_+ &= \{A, B\} = AB + BA. \end{aligned} \quad (26)$$

Tiedetään, että QRPA:lle luomisoperaattori ja sen variaatio sekä perustila ovat muotoa

$$\begin{aligned} Q_\omega^\dagger &= \sum_{a \leq b} [X_{ab}^\omega A_{ab}^\dagger(JM) - Y_{ab}^\omega \tilde{A}_{ab}(JM)] \\ \delta Q &= A_{ab}(JM), \tilde{A}_{ab}^\dagger(JM) \\ |\Psi_0\rangle &= |\text{QRPA}\rangle, \end{aligned} \quad (27)$$

joissa X_{ab}^ω ja Y_{ab}^ω ovat todennäköisyysamplitudeja, joista X_{ab}^ω :n neliö kuvaa todennäköisyyttä, jolla QRPA-vakuumiin luodaan kvasihiukkaspari ja Y_{ab}^ω :n neliö kuvaa todennäköisyyttä, että QRPA-vakuumilta hävitetään kvasihiukkaspari. QRPA-vakuumi ei ole tyhjä tila, kuten BCS-vakuumi vaan se on korreloitunut. Tällöin tilalta voi

myös hävittää kvasihiukkasia niiden luomisen lisäksi. A_{ab}^\dagger ja \tilde{A}_{ab} ovat muotoa

$$\begin{aligned} A_{ab}^\dagger(JM) &\equiv \mathcal{N}_{ab}(J)[a_a^\dagger a_b^\dagger]_{JM} \\ \tilde{A}_{ab}(JM) &\equiv (-1)^{J+M}(A_{ab}^\dagger(J-M))^\dagger = (-1)^{J+M}A_{ab}(J-M) \\ &= -\mathcal{N}_{ab}(J)[\tilde{a}_a \tilde{a}_b]_{JM} \end{aligned} \quad (28)$$

Edellisessä $\mathcal{N}_{ab}(J)$ on normitustekijä, joka on muotoa

$$\mathcal{N}_{ab}(J) = \frac{\sqrt{1 + \delta_{ab}(-1)^J}}{1 + \delta_{ab}}. \quad (29)$$

Normituksesta huomataan, että jos nukleonit a ja b eivät ole identtisiä, normitusvakio on automaattisesti yksi. Jos taas nukleonit ovat identtiset, normitusvakio riippuu pyörimismäärästä seuraavasti

$$\begin{cases} \mathcal{N}_{ab}(J) = \frac{1}{\sqrt{2}}, & \text{jos } J \text{ on parillinen} \\ \mathcal{N}_{ab}(J) = 0, & \text{jos } J \text{ on pariton.} \end{cases} \quad (30)$$

Operaattorit a^\dagger ja a ovat kvasihiukkasten luomis- ja hävitysoperaattorit. QRPA:n luomisoperaattorin hermiten konjugaatti, eli hävitysoperaattori, on muotoa

$$Q_\omega = \sum_{a \leq b} [X_{ab}^{\omega*} A_{ab}(JM) - Y_{ab}^{\omega*} \tilde{A}_{ab}^\dagger(JM)], \quad (31)$$

jossa X_{ab}^ω on QTDA:sta aiheutuva amplitudi ja Y_{ab}^ω on amplitudi, joka kuvastaa perustilan korrelaatioita.

Vaikka QRPA-menetelmässä BCS-vakuumi ei ole eksakti perustila, käytetään sitä QRPA-yhtälöiden johtamiseen. Käyttämällä kvasibosoniapproksimaatiota (QBA), eli approksimoimalla perustilan olevan BCS-vakuumi, liikeyhtälöt (24) saadaan muotoon

$$\langle \text{BCS} | [\delta Q, \mathcal{H}, Q_\omega^\dagger] | \text{BCS} \rangle = E_\omega \langle \text{BCS} | [\delta Q, Q_\omega^\dagger] | \text{BCS} \rangle. \quad (32)$$

Liikeyhtälöiden oikeaa puolta huomioiden, samalla muistaen, että $a \leq b$ ja $c \leq d$,

seuraavat yhtäsuuruudet pätevät

$$\begin{aligned}\langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), A_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle &= \delta_{ac} \delta_{bd} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \\ \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{ab}(JM), \tilde{A}_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle &= \delta_{ac} \delta_{bd} \delta_{JJ'} \delta_{MM'}.\end{aligned}\quad (33)$$

Asetetaan ensin $\delta Q = A_{ab}(JM)$ ja avataan liikeyhtälön vasen puoli, jolloin saadaan

$$\begin{aligned}\langle \text{BCS} | [\delta Q, \mathcal{H}, Q_\omega^\dagger] | \text{BCS} \rangle &= \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, X_{cd}^\omega A_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle \\ &\quad - \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, Y_{cd}^\omega \tilde{A}_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle \\ &= \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, A_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle X_{cd}^\omega \\ &\quad - \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, \tilde{A}_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle Y_{cd}^\omega.\end{aligned}\quad (34)$$

Avataan nyt liikeyhtälön oikea puoli ja saadaan

$$\begin{aligned}E_\omega \langle \text{BCS} | [\delta Q, Q_\omega^\dagger] | \text{BCS} \rangle &= E_\omega \left(\sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), A_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle X_{cd}^\omega \right. \\ &\quad \left. - \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \tilde{A}_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle Y_{cd}^\omega \right) \\ &= E_\omega \sum_{c \leq d} \delta_{ac} \delta_{bd} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} X_{cd}^\omega\end{aligned}\quad (35)$$

Yhdistämällä edellä saadut tulokset, saadaan liikeyhtälö muotoon

$$\begin{aligned}\sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, A_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle X_{cd}^\omega \\ - \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, \tilde{A}_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle Y_{cd}^\omega &= E_\omega \sum_{c \leq d} \delta_{ac} \delta_{bd} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} X_{cd}^\omega.\end{aligned}\quad (36)$$

Edellistä sieventämällä, yhtälö saadaan muotoon

$$\begin{aligned} & \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, A_{cd}^\dagger] | \text{BCS} \rangle X_{cd}^\omega \\ & - \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{BCS} \rangle = E_\omega X_{ab}^\omega. \end{aligned} \quad (37)$$

Tilannetta voidaan tarkastella myös, kun $\delta Q = \tilde{A}_{ab}^\dagger(JM)$. Tällöin lasku menee täysin samalla tavalla kuin edellä ja lopputulokseksi saadaan

$$\begin{aligned} & \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{ab}^\dagger(JM), \mathcal{H}, A_{cd}^\dagger] | \text{BCS} \rangle X_{cd}^\omega \\ & - \sum_{c \leq d} \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{ab}^\dagger(JM), \mathcal{H}, \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{BCS} \rangle = E_\omega Y_{ab}^\omega. \end{aligned} \quad (38)$$

Tulosten seuraamista helpottamiseksi, merkitään jatkossa

$$\begin{aligned} A_{ab,cd}(J) & \equiv \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{BCS} \rangle \\ B_{ab,cd}(J) & \equiv -\langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), \mathcal{H}, \tilde{A}_{cd}^\dagger(JM)] | \text{BCS} \rangle. \end{aligned} \quad (39)$$

Tiedetään seuraavat

$$\begin{aligned} [A, B, C]^\dagger & = [C^\dagger, B^\dagger, A^\dagger] \\ [A, B, C] & = [C, B, A] \end{aligned} \quad (40)$$

Näiden avulla saadaan

$$\begin{aligned} \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{ab}^\dagger, \mathcal{H}, A_{cd}^\dagger] | \text{BCS} \rangle & = \langle \text{BCS} | [A_{cd}, \mathcal{H}, \tilde{A}_{ab}] | \text{BCS} \rangle^\dagger = -B_{cd,ab}^* = -(B^\dagger)_{ab,cd} \\ \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{ab}^\dagger, \mathcal{H}, \tilde{A}_{cd}] | \text{BCS} \rangle & = \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{cd}, \mathcal{H}, \tilde{A}_{ab}^\dagger] | \text{BCS} \rangle \\ & = \langle \text{BCS} | [A_{cd}, \mathcal{H}, A_{ab}^\dagger] | \text{BCS} \rangle = A_{cd,ab} = (A^T)_{ab,cd}. \end{aligned} \quad (41)$$

Nyt siis saadaan yhtälöpari

$$\begin{cases} \sum_{c \leq d} A_{ab,cd} X_{cd}^\omega - \sum_{c \leq d} B_{ab,cd} Y_{cd}^\omega = E_\omega X_{ab}^\omega \\ - \sum_{c \leq d} (B^\dagger)_{ab,cd} X_{cd}^\omega - \sum_{c \leq d} (A^T)_{ab,cd} Y_{cd}^\omega = E_\omega Y_{ab}^\omega, \end{cases} \quad (42)$$

jonka yhtälöitä kutsutaan QRPA-yhtälöiksi. QRPA-yhtälöt voidaan myös ilmoittaa matriisimuodossa, jolloin yhtälöpari saadaan muotoon

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\omega \\ Y^\omega \end{pmatrix} = E_\omega \begin{pmatrix} X^\omega \\ Y^\omega \end{pmatrix}. \quad (43)$$

Matriisien $A_{ab,cd}$ ja $B_{ab,cd}$ eksplisiittiset muodot on esitetty kirjassa [4].

QRPA-vakuumi voidaan kirjoittaa BCS-vakuumin avulla seuraavasti

$$|\text{QRPA}\rangle = \mathcal{N}_0 e^S |\text{BCS}\rangle, \quad (44)$$

jossa \mathcal{N}_0 on normitusvakio ja S on muotoa

$$S = \frac{1}{2} \sum_{JM} \sum_{a \leq b, c \leq d} C_{abcd}(J) A_{ab}^\dagger(JM) \tilde{A}_{cd}^\dagger(JM). \quad (45)$$

Edellisessä $C_{abcd} = C_{cdab}$ saadaan selville vaatimalla

$$Q_\omega |\text{QRPA}\rangle = 0, \quad (46)$$

kaikille ω . Viritystila voidaan puolestaan laskea QRPA-vakuumista seuraavasti

$$|\omega\rangle = |nJ^\pi\rangle = Q_\omega^\dagger |\text{QRPA}\rangle. \quad (47)$$

2.4 Siirtymät ja niiden voimakkuudet

Sähkömagneettisen operattorin redusoitu matriisielementti saadaan seuraavasti

$$(\xi_f J_f || \mathcal{M}_{\sigma\lambda} || \xi_i J_i) = \hat{\lambda}^{-1} \sum_{ab} (a || \mathcal{M}_{\sigma\lambda} || b) (\xi_f J_f || [c_a^\dagger \tilde{c}_b]_\lambda || \xi_i J_i). \quad (48)$$

Nyt valitaan operaattoriksi $Q_{L,JM}^0$, joka on muotoa

$$Q_{L,JM}^0 = i^L r^L [Y_L \sigma]_{JM}. \quad (49)$$

Voidaan määrittää operaattorille $Q_{L,JM}^0$ redusoitu matriisielementti yhtälön (48) avulla. Tällöin saadaan

$$(J_f||Q_{L,J}^0||J_i) = \hat{J}^{-1} \sum_{ab} (a||Q_{L,J}^0||b)(J_f||[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_J||J_i). \quad (50)$$

Jotta saadaan laskettua siirtymien voimakkuudet QRPA-vakuumilta viritystilalle, täytyy selvittää mitä on $(nJ^\pi||Q_{L,J}^0||\text{QRPA})$. QRPA-viritystila voidaan ilmoittaa muodossa

$$|\omega\rangle = Q_\omega^\dagger|\text{QRPA}\rangle, \quad (51)$$

joten siirtymä QRPA-viritystilalta QRPA-vakuumille voidaan kirjoittaa yhtälön (50) avulla muodossa

$$(\text{QRPA}||Q_{L,J}^0||\omega) = \hat{J}^{-1} \sum_{ab} (a||Q_{L,J}^0||b)(\text{QRPA}||[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_J||\omega). \quad (52)$$

Käyttämällä nyt Wignerin-Eckartin teoreemaa

$$\langle \xi' j' m' | T_{LM} | \xi j m \rangle = \hat{j}'^{-1} (j m L M | j' m') (\xi' j' || \mathbf{T}_L || \xi j) \quad (53)$$

saadaan yhtälö (52) muotoon

$$(\text{QRPA}||Q_{L,J}^0||\omega) = (JMJM|00)^{-1} \hat{J}^{-1} \sum_{ab} (a||Q_{L,J}^0||b) \langle \text{QRPA} | [c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M} Q_\omega^\dagger | \text{QRPA} \rangle. \quad (54)$$

Tarkastellaan nyt termiä $\langle \text{QRPA} | [c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M} Q_\omega^\dagger | \text{QRPA} \rangle$, joka voidaan kirjoittaa muodossa

$$\langle \text{QRPA} | [c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M} Q_\omega^\dagger | \text{QRPA} \rangle = \langle \text{QRPA} | [[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M}, Q_\omega^\dagger] | \text{QRPA} \rangle, \quad (55)$$

koska $\langle \text{QRPA} | Q_\omega^\dagger = 0$. Sijoitetaan seuraavaksi QRPA:n luomisoperaattori ja $[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{\lambda\mu}$ yhtälöön (55). Nyt $[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{\lambda\mu}$ voidaan kirjoittaa kvasihiukkasten avulla käyttämällä

Bogoliubov-Valatinin muunnoksen (20) käänteismuunnosta. Tulokseksi saadaan

$$\begin{aligned}
[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{\lambda\mu} &= u_a u_b [a_a^\dagger \tilde{a}_b]_{\lambda\mu} + (-1)^{j_a + j_b + \lambda} v_a v_b [a_b^\dagger \tilde{a}_a]_{\lambda\mu} \\
&+ u_a v_b [a_a^\dagger a_b^\dagger]_{\lambda\mu} - v_a u_b [\tilde{a}_a \tilde{a}_b]_{\lambda\mu} + \delta_{ab} \delta_{\lambda 0} \delta_{\mu 0} \hat{j}_a v_a v_b,
\end{aligned} \tag{56}$$

jossa viimeinen termi häviää, koska nyt λ ja μ eivät ole nollia. Yhtälö (55) saadaan muutamien laskutoimitusten jälkeen muotoon

$$\begin{aligned}
&\langle \text{QRPA} | [[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M}, Q_\omega^\dagger] | \text{QRPA} \rangle \\
&= \sum_{c \leq d} \left[X_{cd}^\omega (u_a v_b \langle \text{QRPA} | [[a_a^\dagger a_b^\dagger]_{J-M}, A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{QRPA} \rangle \right. \\
&\quad - v_a u_b \langle \text{QRPA} | [[\tilde{a}_a \tilde{a}_b]_{J-M}, A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{QRPA} \rangle) \\
&\quad - Y_{cd}^\omega (u_a v_b \langle \text{QRPA} | [[a_a^\dagger a_b^\dagger]_{J-M}, \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{QRPA} \rangle \\
&\quad \left. - v_a u_b \langle \text{QRPA} | [[\tilde{a}_a \tilde{a}_b]_{J-M}, \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{QRPA} \rangle \right].
\end{aligned} \tag{57}$$

Käyttämällä nyt yhtälöitä (28) apuna, voidaan edellinen kirjoittaa seuraavasti

$$\begin{aligned}
&\langle \text{QRPA} | [[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M}, Q_\omega^\dagger] | \text{QRPA} \rangle \\
&= \mathcal{N}_{ab}^{-1}(J) \sum_{c \leq d} \left[X_{cd}^\omega (u_a v_b \langle \text{QRPA} | [A_{ab}^\dagger(J-M), A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{QRPA} \rangle \right. \\
&\quad + v_a u_b \langle \text{QRPA} | [\tilde{A}_{ab}(J-M), A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{QRPA} \rangle) \\
&\quad - Y_{cd}^\omega (u_a v_b \langle \text{QRPA} | [A_{ab}^\dagger(J-M), \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{QRPA} \rangle \\
&\quad \left. + v_a u_b \langle \text{QRPA} | [\tilde{A}_{ab}(J-M), \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{QRPA} \rangle \right].
\end{aligned} \tag{58}$$

Käytetään seuraavaksi kvasibosoni approksimaatiota (QBA), jolloin edellinen yhtälö

saadaan muotoon

$$\begin{aligned}
& \langle \text{QRPA} | [[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M}, Q_\omega^\dagger] | \text{QRPA} \rangle \\
& \approx \mathcal{N}_{ab}^{-1}(J) \sum_{c \leq d} \left[X_{cd}^\omega (u_a v_b \langle \text{BCS} | [A_{ab}^\dagger(J-M), A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{BCS} \rangle \right. \\
& + v_a u_b \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{ab}(J-M), A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{BCS} \rangle \\
& - Y_{cd}^\omega (u_a v_b \langle \text{BCS} | [A_{ab}^\dagger(J-M), \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{BCS} \rangle \\
& \left. + v_a u_b \langle \text{BCS} | [\tilde{A}_{ab}(J-M), \tilde{A}_{cd}(JM)] | \text{BCS} \rangle \right]. \tag{59}
\end{aligned}$$

Hyödynnetään tietoa, että luomis- ja hävitysoperaattorit kommutoivat keskenään, jolloin edellinen yhtälö saadaan muotoon

$$\begin{aligned}
& \langle \text{QRPA} | [[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M}, Q_\omega^\dagger] | \text{QRPA} \rangle \\
& = \mathcal{N}_{ab}^{-1}(J) (-1)^{J+M} \sum_{c \leq d} (v_a u_b X_{cd}^\omega \langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), A_{cd}^\dagger(JM)] | \text{BCS} \rangle \\
& + u_a v_b Y_{cd}^\omega \langle \text{BCS} | [A_{cd}(J-M), A_{ab}^\dagger(J-M)] | \text{BCS} \rangle). \tag{60}
\end{aligned}$$

Tiedetään, että

$$\langle \text{BCS} | [A_{ab}(JM), A_{cd}^\dagger(J'M')] | \text{BCS} \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \mathcal{N}_{ab}^2(J) [\delta_{ac} \delta_{bd} - (-1)^{j_a + j_b + J} \delta_{ad} \delta_{bc}], \tag{61}$$

minkä avulla saadaan yhtälö seuraavaan muotoon

$$\begin{aligned}
& \langle \text{QRPA} | [[c_a^\dagger \tilde{c}_b]_{J-M}, Q_\omega^\dagger] | \text{QRPA} \rangle \\
& = \mathcal{N}_{ab}(J) (-1)^{J+M} \sum_{c \leq d} (v_a u_b X_{cd}^\omega + u_a v_b Y_{cd}^\omega) (\delta_{ac} \delta_{bd} - (-1)^{j_a + j_b + J} \delta_{ad} \delta_{bc}). \tag{62}
\end{aligned}$$

Kirjoitetaan nyt siirtymä viritystilalta perustilalle yllä laskettujen tulosten avulla.

Saadaan siis

$$\begin{aligned}
(\text{QRPA}||Q_{L,J}^0||nJ^\pi) &= (-1)^{J+M} \hat{J}^{-1} (JM J - M|00)^{-1} \sum_{ab} \mathcal{N}_{ab}(J) (a||Q_{L,J}^0||b) \\
&\times \sum_{c \leq d} (v_a u_b X_{cd}^\omega \delta_{ac} \delta_{bd} - v_a u_b X_{cd}^\omega (-1)^{j_a+j_b+J} \delta_{j_a+j_b+J} \delta_{ad} \delta_{bc}) \\
&+ u_a v_b Y_{cd}^\omega \delta_{ac} \delta_{bd} - u_a v_b Y_{cd}^\omega (-1)^{j_a+j_b+J} \delta_{ad} \delta_{bc}.
\end{aligned} \tag{63}$$

Käyttämällä hyödyksi tietoa $(jmjm'|00) = (-1)^{j-m} \hat{j}^{-1} \delta_{m,-m}$, voidaan edellistä yhtälöä sieventää. Lopulta päädytään seuraavaan muotoon

$$\begin{aligned}
(\text{QRPA}||Q_{L,J}^0||nJ^\pi) &= \sum_{c \leq d} \mathcal{N}_{cd}(J) \left[(c||Q_{L,J}^0||d) v_c u_d Y_{cd}^\omega \right. \\
&- (d||Q_{L,J}^0||c) v_d u_c X_{cd}^\omega (-1)^{j_c+j_d+J} \\
&\left. + (c||Q_{L,J}^\omega||d) u_c v_d Y_{cd}^\omega - (d||Q_{L,J}^0||c) u_d v_c Y_{cd}^\omega (-1)^{j_c+j_d+J} \right].
\end{aligned} \tag{64}$$

Siirtymät tilalta c tilalle d voidaan kirjoittaa seuraavasti

$$\begin{aligned}
(d||Q_{L,J}^0||c) &= (d||i^L r^L [Y_L \sigma]_{JM}||c) = (n_d l_d \frac{1}{2} j_d ||i^L r^L [Y_L \sigma]_{JM}||n_c l_c \frac{1}{2} j_c) \\
&= \hat{j}_d \hat{J} \hat{j}_c \begin{Bmatrix} l_d & \frac{1}{2} & j_d \\ l_c & \frac{1}{2} & j_c \\ L & 1 & J \end{Bmatrix} (l_d ||Y_L||l_c) \left(\frac{1}{2} ||\sigma||\frac{1}{2}\right) \mathcal{R}_{dc}^{(L)} (-1)^{\frac{1}{2}(l_c-l_d+L)} \\
&= \sqrt{6} \hat{j}_d \hat{J} \hat{j}_c \frac{(-1)^{l_d}}{\sqrt{4\pi}} \hat{l}_d \hat{L} \hat{l}_c \begin{pmatrix} l_d & L & l_c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_d & \frac{1}{2} & j_d \\ l_c & \frac{1}{2} & j_c \\ L & 1 & J \end{Bmatrix} \mathcal{R}_{dc}^{(L)} (-1)^{\frac{1}{2}(l_c-l_d+L)},
\end{aligned} \tag{65}$$

jossa radiaalinen integraali $\mathcal{R}_{ab}^{(\lambda)}$ on määritelty seuraavasti

$$\mathcal{R}_{ab}^{(\lambda)} = \int_0^\infty g_{n_a l_a}(r) r^\lambda g_{n_b l_b}(r) r^2 dr, \tag{66}$$

jossa $g_{n_a l_a}$ ja $g_{n_b l_b}$ ovat radiaaliset aaltofunktiot. Tällöin siirtymä tilalta d tilalle c on

muotoa

$$\begin{aligned}
(c||Q_{L,J}^0||d) &= \frac{(-1)^{l_c}}{\sqrt{4\pi}} \hat{l}_c \hat{L} \hat{l}_d \begin{pmatrix} l_c & L & l_d \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_c & \frac{1}{2} & j_c \\ l_d & \frac{1}{2} & j_d \\ L & 1 & J \end{Bmatrix} \mathcal{R}_{cd}^{(L)} (-1)^{\frac{1}{2}(l_d - l_c + L)} \\
&= (-1)^{j_c + j_d + J} \sqrt{6} \hat{j}_d \hat{J} \hat{j}_c \frac{(-1)^{l_d}}{\sqrt{4\pi}} \hat{l}_d \hat{L} \hat{l}_c \begin{pmatrix} l_d & L & l_c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_d & \frac{1}{2} & j_d \\ l_c & \frac{1}{2} & j_c \\ L & 1 & J \end{Bmatrix} \mathcal{R}_{dc}^{(L)} (-1)^{\frac{1}{2}(l_c - l_d + L)} \\
&= (-1)^{j_c + j_d + J} (d||Q_{L,J}^0||c).
\end{aligned} \tag{67}$$

Eli siirtymät tilalta c tilalle d ja tilalta d tilalle c ovat yhteydessä toisiinsa seuraavasti $(d||Q_{L,J}^0||c) = (-1)^{j_c + j_d + J} (c||Q_{L,J}^0||d)$. Hyödyntämällä tätä tietoa saadaan laskettua lopullinen tulos siirtymille virtystilalta QRPA-vakuumille. Tulos on

$$(\text{QRPA}||Q_{L,J}^0||nJ^\pi) = \sum_{a < b} \mathcal{N}_{ab}(J) (a||Q_{L,J}^0||b) (v_a u_b - u_a v_b) (X_{ab}^{nJ^\pi} - Y_{ab}^{nJ^\pi}). \tag{68}$$

Nyt halutaan tietää siirtymät perustilalta viritystilalle. Tällöin tarvitsee tietää, kuinka siirtymät QRPA-vakuumilta viritystilalle ja toisinpäin ovat kytköksissä toisiinsa. Oletetaan nyt reaaliset transiioamplitudit. Tällöin

$$\begin{aligned}
(nJ^\pi||Q_{L,J}^0||\text{QRPA}) &= (nJ^\pi||Q_{L,J}^0||\text{QRPA})^\dagger \\
&= \hat{J} \sum_M (00JM|JM) \langle JM|Q_{L,J}^0|\text{QRPA} \rangle^\dagger \\
&= \hat{J} \sum_M (00JM|JM) (-1)^{J+1} (-1)^M \langle \text{QRPA}|Q_{L,J-M}^0|JM \rangle,
\end{aligned} \tag{69}$$

jossa on käytetty Wignerin-Eckartin teoreemaa ja hyödynnetty tietoa, että $(Q_{L,JM}^0)^\dagger = (-1)^{J+1} (-1)^M Q_{L,J-M}^0$. Tiedetään myös, että

$$\langle \text{QRPA}|Q_{L,J-M}^0|JM \rangle = (JMJ - M|00) (\text{QRPA}||Q_{L,J}^0||JM) \tag{70}$$

ja

$$(00JM|JM) = (JM00|JM) = 1. \quad (71)$$

Näitä tietoja käyttämällä saadaan

$$\begin{aligned} (nJ^\pi || Q_{L,J}^0 || \text{QRPA}) &= \hat{J} \sum_M (00JM|JM) (JM J - M | 00) (-1)^M (-1)^{J+1} \\ &\quad \times (\text{QRPA} || Q_{L,J}^0 || JM) \\ &= \hat{J} \sum_M (00JM|JM) (-1)^{J-M} \hat{J}^{-1} (JM00|JM) (-1)^M \\ &\quad \times (-1)^{J+1} (\text{QRPA} || Q_{L,J}^0 || JM) \\ &= \underbrace{\sum_M (00JM|JM) (00JM|JM)}_{=1} (-1)^1 (\text{QRPA} || Q_{L,J}^0 || JM) \\ &= -(\text{QRPA} || Q_{L,J}^0 || nJ^\pi). \end{aligned} \quad (72)$$

Tällöin siirtymä perustilalta viritystilalle saadaan muotoon

$$(nJ^\pi || Q_{L,J}^0 || \text{QRPA}) = - \sum_{a \leq b} \mathcal{N}_{ab}(J) (a || Q_{L,J}^0 || b) (v_a u_b - u_a v_b) (X_{ab}^{nJ^\pi} - Y_{ab}^{nJ^\pi}). \quad (73)$$

Kaavan (49) siirtymäoperaattori vastaa isoskalaarisiirtymiä. Jotta saataisiin isovektorioperaattori, täytyy isoskalaarioperaattoria kertoa τ_0 :lla, jolle pätee $\tau_0 | \text{protoni} \rangle = -1$ ja $\tau_0 | \text{neutroni} \rangle = +1$. Tällöin isoskalaarimultipolisiirtymille pätee kaava (65) ja isovektoremultipolisiirtymille tätä täytyy kertoa -1:llä protoneille.

Perustilalta viritystilalle siirtymän voimakkuus voidaan puolestaan laskea seuraavasti

$$S_{nJ^\pi}^L = |(nJ^\pi || Q_{L,J}^0 || \text{QRPA})|^2. \quad (74)$$

3 Tulokset

Tässä luvussa perehdytään tutkielmassa laskettuihin tuloksiin. Tulokset on saatu käyttämällä QRPA-menetelmää. Ensimmäisessä osassa tuloksia QRPA-menetelmä on supistettu RPA-menetelmään eli kvasihiukkasia ei ole otettu huomioon laskuissa. Tällöin protonien pariutumisoimakkuus on asetettu tarpeeksi pieneksi, jotta pariutumista ei tapahdu, vaan ainoastaan hiukkas-aukko -viritykset otetaan huomioon. Neutronien kvasihiukkasia ei oteta QRPA-menetelmässäkään huomioon, koska neutroneita on tutkittavassa ytimessä maaginen lukumäärä, 50 kappaletta. Tällöin pariutumista ei tapahdu neutroneilla suuren energia-aukon yli.

3.1 RPA-menetelmä

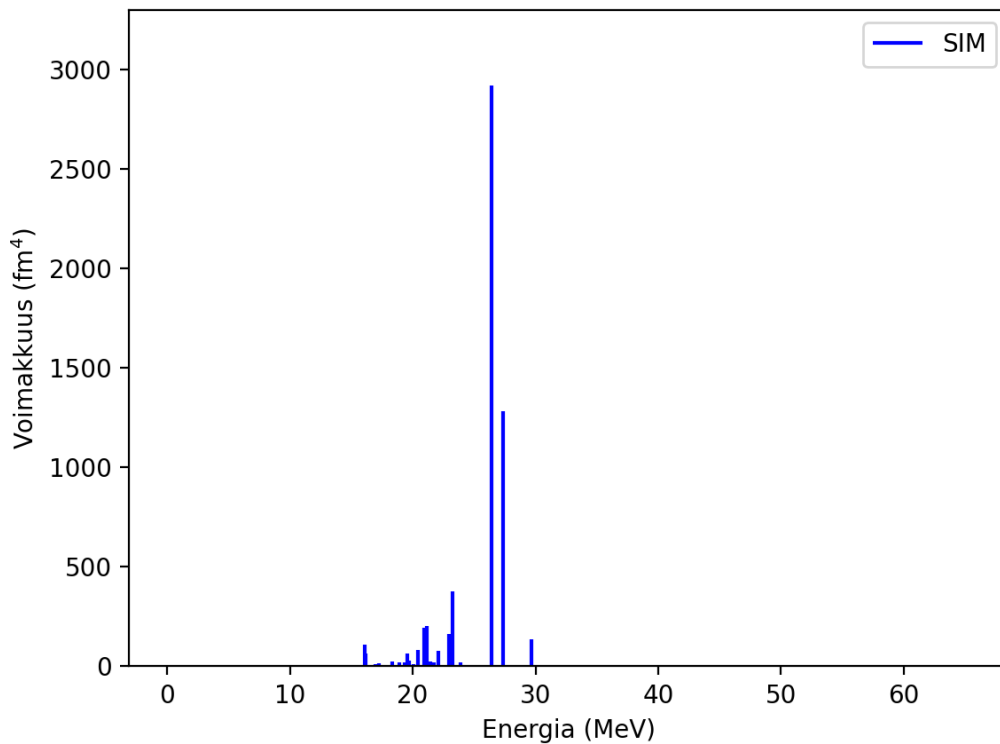
Käytetty ohjelma antaa RPA-menetelmällä saatuja tuloksia, kun asetetaan protonien ja neutronien pariutumisoimakkuudet tarpeeksi pieniksi. Kun pariutumisoimakkuutta pienennetään tarpeeksi, QRPA muuttuu RPA:ksi. Protonien ja neutronien pariutumisoimakkuudet on asetettu arvoon nolla. Hiukkas-aukkovoimakkuusparametri on asetettu vastaamaan renormalisoimatonta kaksihiukkasvuorovaikutusta, eli parametri on asetettu arvoon 1.0 [4]. Jossain tapauksissa näin suuri vuorovaikutusparametri aiheuttaa imaginaarisia alimpia tiloja. Tällaisessa tilanteessa hiukkasaukkovoimakkuusparametri on asetettu arvoon 0.5. Kuvioissa 1, 2 ja 3 on esitetty RPA-metodilla lasketut voimakkuusfunktiot SIM-, $L = 1$ - ja $L = 2$ - viritystiloille. Viritystiloilla spin-pyörimismäärä on $S = 1$. SIM-tila on lyhenne sanoista *spin isovector monopole* ja sitä vastaava operaattori on muotoa

$$Q_M^{0(\text{SIM})} = r^2[Y_0\sigma]_{1M}\tau_0. \quad (75)$$

SIM-tilat ovat siis 1^+ -tiloja.

Taulukossa 1 on ilmoitettu lasketut keskimääräiset energian arvot sekä RPA- että QRPA-menetelmällä. Keskimääräiset energiat on saatu laskettua painotetulla keskiarvolla painottamalla tilojen energiat niiden suhteellisilla voimakkuuksilla. Taulukossa on myös ilmoitettu julkaisussa [3] lasketut vastaavat arvot. Taulukoissa 2 ja 3 on

esitetty positiivisten ja negatiivisten pariteettien tilojen kokeelliset [9] ja teoreettiset energiat. Teoreettiset energiat on näissä taulukoissa laskettu RPA-menetelmää käyttämällä. Taulukoissa 2 ja 3 on kokeellisten energioiden kohdalla epävarmuutta pariteetin ja viritystilojen kanssa. Yhdellä tähdellä (*) on merkitty ne kokeellisesti määritetyt energiat, joilla ytimellä on ollut mahdollisuus virittyä myös toiselle viritystilalle. Kahdella tähdellä (**) on merkitty ne viritystilojen energiat, joilla pariteetti on epävarma.

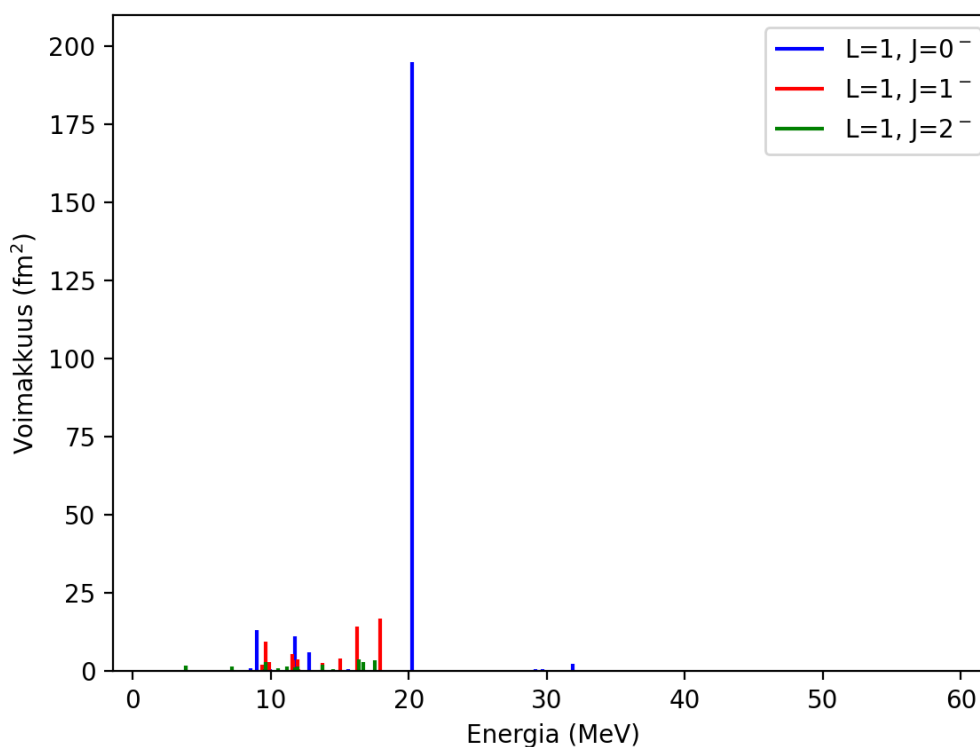


Kuvio 1. Isovektorivoimakkuudet SIM-tilalle, jolla $J = 1^+$, energian funktiona laskettuna RPA-menetelmällä.

Kuviota 1 vertaamalla lähteen [3] vastaavaan huomataan, että voimakkuusfunktiot ovat lähes vastaavat keskenään. Tässä työssä suurimmat voimakkuudet saadaan hieman alle 30 MeV:n energioilla, mutta lähteen [3] suurimmat voimakkuudet havaitaan yli 30 MeV:n energioilla. Huomataan myös taulukon 1 keskimääräisistä energioista, että tässä työssä lasketut energiat ovat noin 7 MeV:ä pienemmät kuin lähteessä [3].

Taulukon 2 kahta ensimmäistä saraketta tarkastelemalla voidaan tutkia tilan $J = 1^+$ kokeellisia ja teoreettisia energioita. Huomataan, että tulokset eivät vastaa

kokeellisia arvoja kovinkaan hyvin. Toisaalta kokeellisten energioiden arvoissa on myös hieman epävarmuutta, koska kaikki 1^+ -tilan taulukossa mainitut kokeelliset energiat ovat joko pariteetin tai muiden mahdollisten tilojen vuoksi epävarmoja. Joitakin samankaltaisia energioita kuitenkin löytyy teoreettisten arvojen loppupäästä taulukkoa.

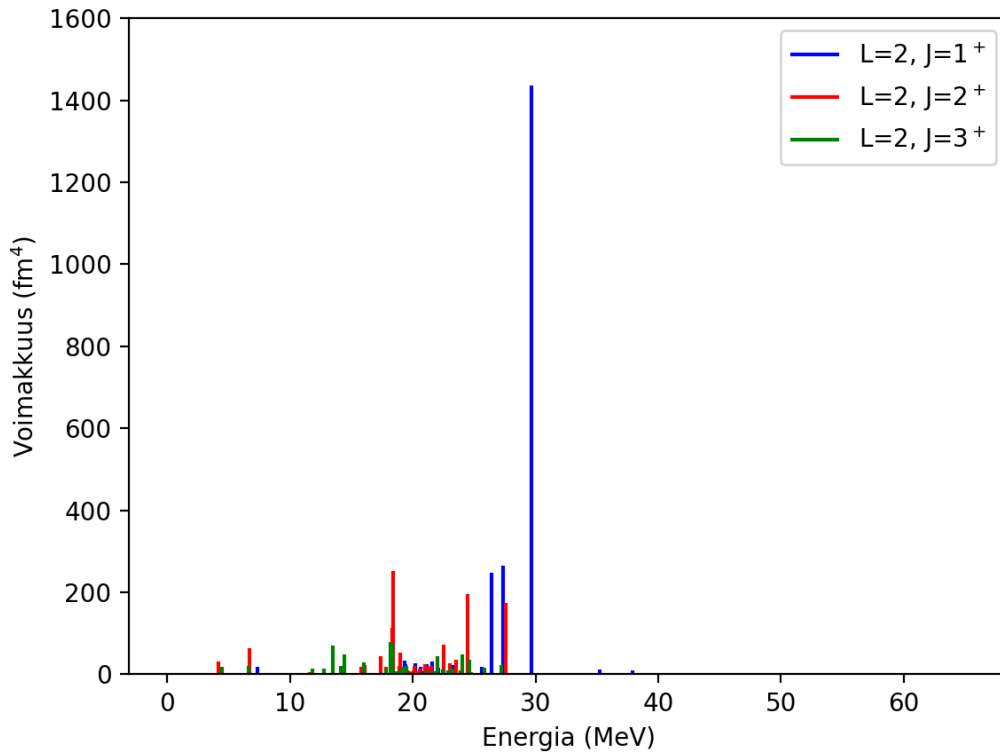


Kuvio 2. Isovektorivoimakkuudet $L = 1$ -tiloille energian suhteen RPA-menetelmällä laskettuna. Spinpyörimismäärä on $S = 1$. Sinisellä värillä on esitetty $J = 0^-$ -tilan voimakkuudet, punaisella $J = 1^-$ -tilan voimakkuudet ja vihreällä $J = 2^-$ -tilan voimakkuudet.

Vertaamalla kuviota 2 lähteen [3] vastaavaan huomataan, että piikit ovat suhteellisen samoilla alueilla kummassakin. Tässä tutkimuksessa tosin piikit asettuvat kokonaisuudessaan hieman alemmille energioille kuin lähteessä [3]. Suurin voimakkuuspiikki havaitaan tässä hieman yli 20 MeV:n energialla, jossa sitä ei lähteessä [3] ole. Tilojen keskimääräiset energiat osuvat lähelle toisiaan, ne ovat noin 4 MeV:n päässä toisistaan kaikilla $L = 1$ tiloilla.

Taulukossa 3 on ilmoitettu kokeelliset ja tässä tutkielmassa lasketut teoreetti-

set energiat negatiivisen pariteetin tiloille. Tilan 1^- kohdalla alin energiatila on luultavasti niin kutsuttu haanutila, joka aiheutuu ytimen keskipisteen vangitsemisesta origoon, jolloin ytimen massakeskipiste liikkuu ytimen fyysisen keskipisteen ympäri, mikä ei ole järkevää. Tämän takia ensimmäinen teoreettisesti laskettu 1^- energiatila on jätetty pois taulukosta 3. Tilan 0^- teoreettisesti laskettuja energioita huomataan taulukon 3 avulla olevan paljon enemmän kuin kokeellisesti määritettyjä energiatiloja. Kokeellisesti määritettyjen alimman ja ylimmän energiatilojen kanssa löytyy teoreettisesti lasketuista arvoista aika lähellä olevat arvot. Tilan 1^- energioita tarkasteltaessa taulukosta 3 huomataan, että alimmat teoreettiset energiat ovat paljon suuremmat kuin kokeellisesti määritetyt energiat. Kokeellisten energiatilojen määrittämisessä on varsinkin pariteetin kanssa huomattavasti epävarmuutta. 2^- -tilassa teoreettiset energiat vastaavat jo paljon paremmin kokeellisia, tosin niissäkin on vielä huomattavasti eroavaisuutta.



Kuvio 3. Iovektorivoimakkuusfunktiot $L = 2$ -viritystilalle energian funktiona. Voimakkuudet on laskettu RPA-menetelmällä. Tässäkin spinpyörimismäärä on $S = 1$. Sinisellä on merkitty $J = 1^+$, punaisella $J = 2^+$ ja vihreällä $J = 3^+$ pyörimismäärien voimakkuudet.

Kuviota 3 tarkastelemalla huomataan, että voimakkuusfunktio vastaa hyvin lähteen [3] vastaavaa funktiota. Kaikkien tilojen energiat ovat hieman alempia kuin verrattavassa lähteessä lasketut. Tässä tutkimuksessa on saatu kaikille tiloille voimakkuutta myös alle 10 MeV:n energioille, mutta lähteen [3] tuloksissa näin ei ole. Tämä muun muassa tekee eroa tilojen keskimääräisten energioiden välille.

Taulukossa 2 on ilmoitettu kokeelliset ja teoreettiset arvot positiivisten pariteettien tilojen alimmille energioille. Tulokset eivät vastaa toisiaan kovinkaan hyvin. Teoreettisesti lasketuissa arvoissa on kaikkien tilojen kohdalla saatu paljon pienempiä energian arvoja kuin kokeellisesti määritetyissä. Näiden energioiden jälkeen teoreettisista energian arvoista löytyy joitakin vastaavia energioita kokeellisesti määritettyjen energioiden kanssa.

Taulukko 1. Iovektori-spinmultipolisiirtymien keskimääräiset energiat RPA- ja QRPA-menetelmillä. Toisessa ja viimeisessä sarakkeessa on ilmoitettu tässä työssä saadut tulokset ja kolmannessa julkaisussa [3] saadut tulokset.

| | E_{RPA} (MeV) | Energiat [3] (MeV) | E_{QRPA} (MeV) |
|----------------------|-----------------|--------------------|------------------|
| $L = 0, J = 1$ (SIM) | 25,257 | 32,3 | 25,385 |
| $L = 1, J = 0^-$ | 19,085 | 22,7 | 19,726 |
| $L = 1, J = 1^-$ | 14,068 | 19,9 | 14,499 |
| $L = 1, J = 2^-$ | 12,750 | 16,6 | 13,311 |
| $L = 2, J = 1^+$ | 27,695 | 32,5 | 27,932 |
| $L = 2, J = 2^+$ | 20,261 | 27,7 | 20,3473 |
| $L = 2, J = 3^+$ | 18,425 | 22,8 | 18,479 |

Taulukko 2. Positiivisen pariteetin tilojen kokeelliset ja RPA-menetelmällä lasketut energiat. Yhdellä tähdellä (*) on merkitty epävarmat tilat, joilla saattaa olla muitakin mahdollisia pyörimismäärän arvoja. Kahdella tähdellä (**) on puolestaan merkitty ne epävarmat tilat, joissa lisäksi tilan pariteetti ei ole tiedossa.

| 1 ⁺ | 1 ⁺ | 2 ⁺ | 2 ⁺ | 3 ⁺ | 3 ⁺ |
|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) |
| 4,237** | 0,134 | 2,186 | 0,337 | 4,262 | 1,512 |
| 4,500* | 1,512 | 3,308 | 0,907 | 4,591 | 1,827 |
| 4,579** | 1,845 | 3,842 | 1,320 | 4,818** | 2,455 |
| 4,647** | 2,455 | 4,223 | 1,468 | 5,084** | 3,072 |
| 4,933** | 3,232 | 4,229 | 2,508 | 5,108** | 3,338 |
| 5,069** | 3,547 | 4,237* | 3,115 | 5,176** | 3,626 |
| 5,184** | 3,722 | 4,456** | 3,532 | 5,359** | 3,722 |
| 5,313** | 3,900 | 4,500* | 3,570 | 5,513** | 3,900 |
| 6,390** | 4,896 | 4,647* | 3,786 | | 4,433 |
| 6,566** | 5,465 | 4,681 | 3,964 | | 5,120 |
| 6,669** | 5,746 | 4,701 | 4,141 | | 5,465 |
| 6,960** | 7,162 | 4,796 | 4,985 | | 6,647 |
| 7,042** | 7,370 | 4,824 | 5,615 | | |

Taulukko 3. Negatiivisen pariteetin tilojen kokeelliset ja RPA-menetelmällä lasketut energiat. Lisätiedot on ilmoitettu taulukossa 2.

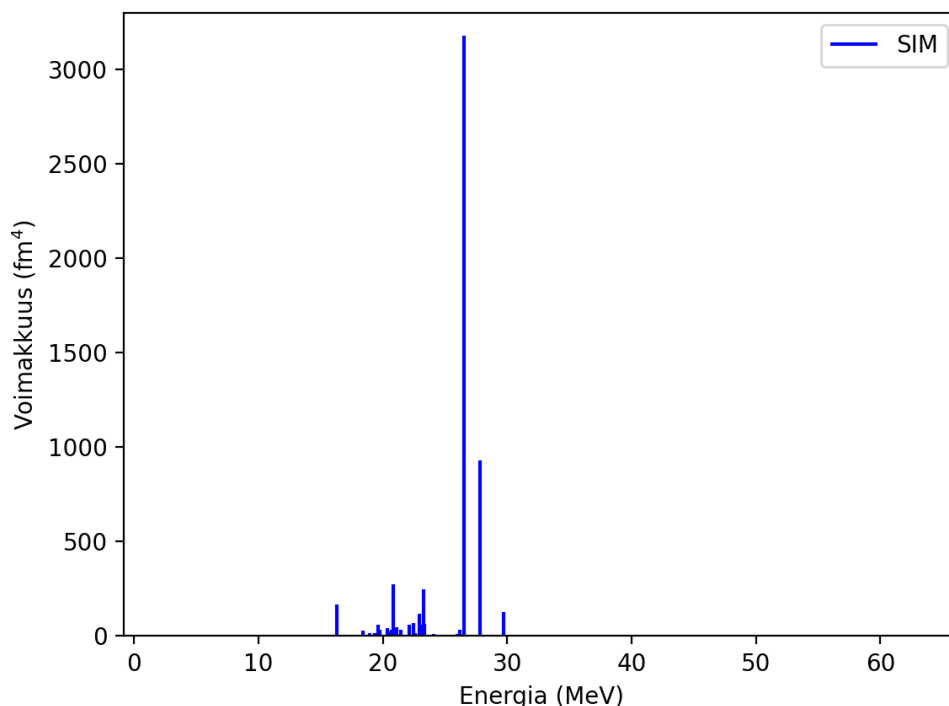
| 0 ⁻ | 0 ⁻ | 1 ⁻ | 1 ⁻ | 2 ⁻ | 2 ⁻ |
|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) |
| 7,000* | 6,717 | 4,237** | 7,405 | 4,456** | 3,828 |
| 7,110* | 7,529 | 4,579** | 7,584 | 6,020* | 6,595 |
| 14,270* | 8,544 | 4,647** | 8,211 | 6,070* | 7,061 |
| 14,878 | 8,966 | 4,933** | 8,350 | 6,200* | 7,204 |
| | 9,939 | 5,069** | 8,561 | 6,250* | 7,212 |
| | 10,084 | 5,184** | 8,725 | 6,320* | 7,904 |
| | 10,230 | 5,313** | 8,947 | 6,810* | 8,242 |
| | 11,682 | 6,020* | 9,335 | 7,160* | 8,461 |
| | 11,758 | 6,070* | 9,598 | 7,350* | 8,629 |
| | 12,509 | 6,200* | 9,716 | 7,650* | 8,646 |
| | 12,781 | 6,250* | 9,731 | 7,806 | |
| | 14,930 | 6,296 | 9,874 | 7,840* | |
| | | 6,320* | 10,297 | 7,868* | |
| | | 6,390** | | 8,032 | |
| | | 6,424 | | 8,291 | |
| | | 6,566** | | 8,316 | |
| | | 6,669** | | 8,400 | |

3.2 QRPA-menetelmä

Seuraavaksi laskettiin QRPA-menetelmän avulla $L = 1$, $L = 2$ ja SIM tilojen voimakkuudet. Tässä tapauksessa otetaan huomioon protonien pariutumisoimakkuudet. Näiden voimakkuuksien selvittämiseen täytyy ensin laskea protonien pariaukon energia. Käytetään kolmipisteyhtälöitä selvittämään pariaukot. Yhtälöt on kirjoitettu protoneille ja neutroneille ja ne ovat muotoa [4]

$$\begin{aligned}\Delta_p(A, Z) &= \frac{1}{4}(-1)^{Z+1}[S_p(A+1, Z+1) - 2S_p(A, Z) + S_p(A-1, Z-1)] \\ \Delta_n(A, Z) &= \frac{1}{4}(-1)^{A-Z+1}[S_n(A+1, Z) - 2S_n(A, Z) + S_n(A-1, Z)],\end{aligned}\tag{76}$$

joissa $S_p(A, Z)$ ja $S_n(A, Z)$ ovat separaatioenergiat protoneille ja neutroneille tietyille ytimille, joiden järjestysluku on Z ja massaluku A . Separaatioenergiat on saatu lähteestä [10]. Pariaukot ytimelle ^{90}Zr ovat nyt $\Delta_p = 1119$ keV ja $\Delta_n = 1856$ keV. Koska kyseisellä ytimellä on maaginen lukumäärä neutroneja, niiden välillä pariutumisesta tapahtuu niin vähän, että sitä ei oteta huomioon. Kun nyt tiedetään pariaukko protoneille, voidaan selvittää niiden pariutumisoimakkuus. Tarkoituksena on asettaa protonien pariutumisoimakkuus sellaiseksi, että pienin yksihiukkasenergia protoneille on yhtä suuri kuin niiden pariaukko. Protonien pariutumisoimakkuudeksi saadaan nyt 0,7705. Tätä pariutumisoimakkuutta käyttämällä on saatu laskettua voimakkuusfunktioita SIM-, $L = 1$ - ja $L = 2$ -tiloille QRPA-menetelmää käyttämällä. Voimakkuusfunktioita on esitetty kuvissa 4, 5 ja 6. Näistä kuvaajista on saatu myös laskettua viritystilojen keskimääräiset energiat, jotka on ilmoitettu taulukossa 1. Kokeellisia ja teoreettisia viritysenegian arvoja on ilmoitettu taulukoissa 4 ja 5 samoin kuin RPA-menetelmän kohdalla.



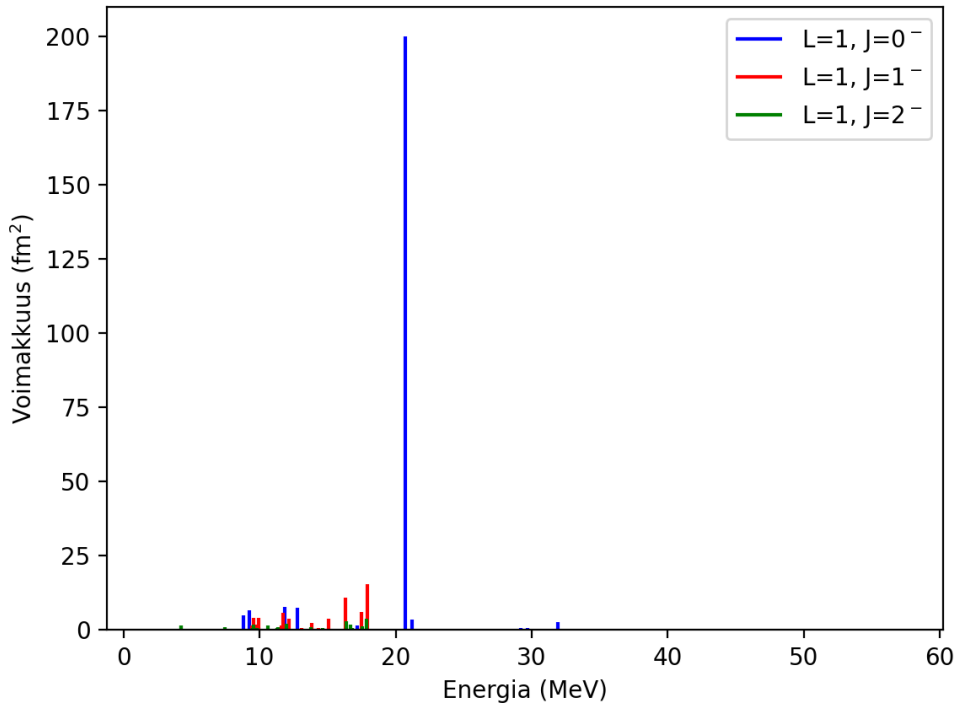
Kuvio 4. Isovektorivoimakkuusfunktio SIM-tilalle energian funktiona QRPA-menetelmällä laskettuna.

SIM-tilojen voimakkuusfunktioita RPA- ja QRPA-menetelmillä voidaan vertailla kuvioista 1 ja 4. Vertaamalla taulukossa 1 olevia keskimääräisiä energian arvoja huomataan, että QRPA-menetelmällä saadaan hiukan suurempi keskimääräinen energia SIM-tilalle, mutta ero ei ole suuri.

Tarkastelemalla taulukkoa 4 huomataan, että 1^+ -tilan kokeellisesti ja teoreettisesti määritetyt energiat vastaavat ensimmäisten laskettujen ja kokeellisten energioiden jälkeen hyvin toisiaan. Noin 4,7 MeV:n jälkeen teoreettiset tulokset ovat hyvin lähellä kokeellisia arvoja.

Tilan $L = 1$ voimakkuuksia voidaan vertailla kuvioista 2 ja 5. Tarkastelemalla tilojen keskimääräisiä energioita taulukosta 1 huomataan, että QRPA-menetelmällä lasketut energiat vastaavat hyvin RPA-menetelmällä laskettuja energioita. QRPA-menetelmällä lasketut energiat ovat vain hieman RPA-menetelmän energioita suurempia.

Tarkastelemalla taulukossa 5 ilmoitettuja energioita, voidaan verrata kokeellisia ja QRPA-menetelmää käyttäen laskettuja teoreettisia energioita toisiinsa. Samoin

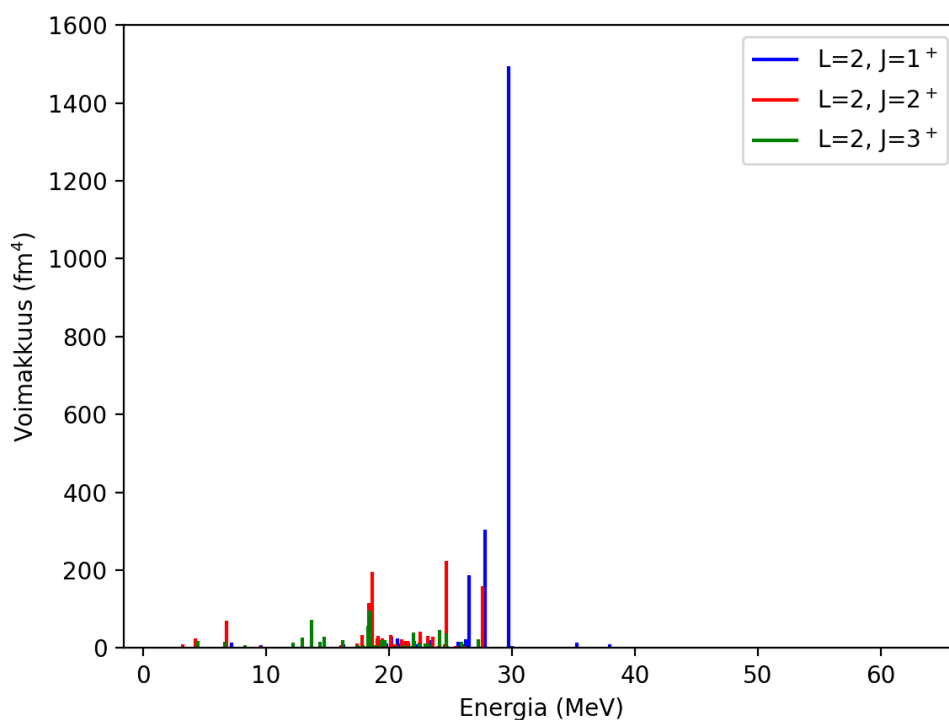


Kuvio 5. Isovektorivoimakkuusfunktiot $L = 1$ -tiloille energian funktiona laskettuna QRPA-menetelmällä. Lisätiedot kuvioista 2.

kuin RPA-menetelmän tuloksissa, myös täällä tilan 1^- ensimmäinen energia on todennäköisesti haamutila, joten tässäkin tapauksessa sitä ei ole mainittu taulukossa 5. Tilan 0^- tapauksessa kokeelliset ja teoreettiset tulokset eivät juurikaan vastaa toisiaan. Tilan 1^- tapauksessa havaitaan jo paljon enemmän samankaltaisia energioiden arvoja kokeellisten ja teoreettisten välillä. Tilan 2^- kohdalla huomataan taas samankaltaisia energioita, mutta teoreettiset energiat eivät vastaa kovin hyvin kokeellisia.

Tilan $L = 2$ voimakkuusfunktioita RPA- ja QRPA-menetelmillä laskettuina voidaan verrata kuvioista 3 ja 6. Kuten näistä kuvioista ja taulukosta 1 nähdään, ovat tilojen keskimääräiset energiat ovat hyvin samansuuruiset. Tässä tapauksessa RPA- ja QRPA-menetelmät antavat toisiaan lähempänä olevia tuloksia kuin SIM ja $L = 1$ -tapauksissa.

Tarkastelemalla taulukossa 4 ilmoitettuja kokeellisia ja teoreettisia alimpia energioita huomataan, että ne vastaavat todella hyvin toisiaan. Teoreettisesti saadaan jokaiselle tilalle laskettua muutama alempi energian arvo kuin kokeellisesti on määritetty, mutta näiden jälkeen teoreettiset arvot vastaavat lähes täysin kokeellisia



Kuvio 6. Isovektorivoimakkuusfunktiot $L = 2$ -viritystilalle energian funktiona QRPA-menetelmällä laskettuna. Lisätiedot löytyvät kuviosta 3.

tuloksia.

Tuloksista huomataan, että positiivisen pariteetin tiloille saadaan teoreettisesti määritettyä paremmin kokeellisia tuloksia vastaavat energian arvot kuin negatiivisen pariteetin tiloille. Voimakkuusfunktiot RPA- ja QRPA-menetelmillä laskettuina ovat lähestulkoon identtiset, mutta alimpien energioiden arvoissa huomataan jopa suuria eroavaisuuksia.

Taulukko 4. Positiivisen pariteetin tilojen energiat QRPA-menetelmällä laskettuna. Lisätiedot on ilmoitettu taulukossa 2.

| 1 ⁺ | 1 ⁺ | 2 ⁺ | 2 ⁺ | 3 ⁺ | 3 ⁺ |
|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) |
| 4,237** | 2,238 | 2,186 | 1,512 | 4,262 | 2,598 |
| 4,500* | 2,598 | 3,308 | 2,529 | 4,591 | 3,516 |
| 4,579** | 3,156 | 3,842 | 2,911 | 4,818** | 3,531 |
| 4,647** | 3,577 | 4,223 | 3,206 | 5,084** | 4,428 |
| 4,933** | 4,677 | 4,229 | 4,243 | 5,108** | 4,766 |
| 5,069** | 4,887 | 4,237* | 4,294 | 5,176** | 4,887 |
| 5,184** | 4,997 | 4,456** | 4,336 | 5,359** | 4,997 |
| 5,313** | 5,159 | 4,500* | 4,512 | 5,513** | 5,076 |
| 6,390** | 5,236 | 4,647* | 4,720 | | 5,159 |
| 6,566** | 6,900 | 4,681 | 4,932 | | 5,342 |
| 6,669** | 7,175 | 4,701 | 5,536 | | 6,617 |
| 6,960** | 7,469 | 4,796 | 5,968 | | |
| 7,042** | 7,749 | 4,824 | 6,700 | | |

Taulukko 5. Negatiivisen pariteetin tilojen energiat laskettuna QRPA-menetelmällä. Lisätiedot on ilmoitettu taulukossa 2.

| 0 ⁻ | 0 ⁻ | 1 ⁻ | 1 ⁻ | 2 ⁻ | 2 ⁻ |
|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) | kok. (MeV) | teor. (MeV) |
| 7,000* | 6,884 | 4,237** | 7,534 | 4,456** | 4,234 |
| 7,110* | 7,795 | 4,579** | 7,683 | 6,020* | 6,929 |
| 14,270* | 8,826 | 4,647** | 8,403 | 6,070* | 7,294 |
| 14,878 | 9,244 | 4,933** | 8,477 | 6,200* | 7,474 |
| | 9,909 | 5,069** | 8,873 | 6,250* | 8,023 |
| | 11,656 | 5,184** | 8,973 | 6,320* | 8,366 |
| | 11,844 | 5,313** | 9,407 | 6,810* | 8,366 |
| | 12,234 | 6,020* | 9,587 | 7,160* | 8,667 |
| | 12,792 | 6,070* | 9,695 | 7,350* | 8,670 |
| | 13,452 | 6,200* | 9,904 | 7,650* | 8,799 |
| | 13,686 | 6,250* | 10,215 | 7,806 | 9,216 |
| | 15,579 | 6,296 | | 7,840* | 9,484 |
| | | 6,320* | | 7,868* | 9,569 |
| | | 6,390** | | 8,032 | |
| | | 6,424 | | 8,291 | |
| | | 6,566** | | 8,316 | |
| | | 6,669** | | 8,400 | |

4 Päätäntö

Tässä tutkielmassa tarkasteltiin ytimen 90-zirkonium energioita isovektorispinmultipoli virityksissä. Viritystilojen energiat laskettiin käyttämällä RPA- ja QRPA-menetelmiä. Tuloksia verrattiin aiemmin tehtyyn RPA-menetelmällä laskettuihin tuloksiin sekä kokeellisesti määritettyihin viritystilojen energioihin.

RPA-menetelmällä saatuja tuloksia voidaan tarkastella kuvioista 1, 2 ja 3 sekä taulukoista 1, 2 ja 3. Taulukosta 1 huomataan, että RPA-menetelmällä saadaan kaikille tiloille keskimääräisiksi energioiksi pienemmät arvot kuin lähteessä [3]. Tämä aiheutuu osittain siitä, että viritystiloille saadaan tässä tutkimuksessa voimakkuutta pienemmillä energioilla kuin verrattavassa lähteessä, mikä nähdään kuvioista 1, 2 ja 3. RPA-menetelmällä lasketut alimmat energiatilat eivät kovin hyvin vastaa kokeellisesti määritettyjä viritystilojen alimpia energioita, kuten taulukoista 2 ja 3 huomataan.

QRPA-menetelmällä saatuja tuloksia voidaan puolestaan tarkastella kuvioista 4, 5 ja 6 sekä taulukoista 1, 4 ja 5. Voimakkuusfunktioiden kuvaajista ja tilojen keskimääräisistä energioista huomataan, että QRPA-menetelmällä saadut tulokset ovat hyvin samankaltaiset kuin RPA-menetelmällä saadut. Kuitenkin QRPA-menetelmällä lasketut alimmat energian arvot vastaavat paljon paremmin kokeellisesti määritettyjä energian arvoja kuin RPA-menetelmällä saadut tulokset. Huomataan myös, että positiivisen pariteetin tiloille tulokset sekä RPA- että QRPA-menetelmillä ovat paljon lähempänä kokeellisesti määritettyjä energian arvoja kuin negatiivisen pariteetin tiloille.

Lähteet

- [1] F. Osterfeld. "Nuclear spin and isospin excitations". *Rev. Mod. Phys.* 64 (2 huhtikuu 1992), s. 491–557. DOI: 10.1103/RevModPhys.64.491.
- [2] J. Isaak ym. "The concept of nuclear photon strength functions: A model-independent approach via $(\vec{\gamma}, \gamma' \gamma'')$ reactions". *Physics Letters B* 788 (2019), s. 225–230. ISSN: 0370-2693. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2018.11.038>.
- [3] N. Auerbach ja A. Klein. "Structure of isovector spin excitations in nuclei". *Phys. Rev. C* 30 (3 syyskuu 1984), s. 1032–1043. DOI: 10.1103/PhysRevC.30.1032.
- [4] J. Suhonen. *From nucleons to nucleus : concepts of microscopic nuclear theory*. Toim. J. Suhonen. Theoretical and mathematical physics. Berlin: Springer, 2007.
- [5] D. J. Rowe. "Equations-of-Motion Method and the Extended Shell Model". *Rev. Mod. Phys.* 40 (1 tammikuu 1968), s. 153–166. DOI: 10.1103/RevModPhys.40.153.
- [6] J. Bardeen, L. N. Cooper ja J. R. Schrieffer. "Theory of Superconductivity". *Phys. Rev.* 108 (5 joulukuu 1957), s. 1175–1204. DOI: 10.1103/PhysRev.108.1175.
- [7] M. Tinkham. *Introduction to superconductivity*. Toim. M. Tinkham. 2nd ed. New York: McGraw-Hill, 1996.
- [8] D. Bohm ja D. Pines. "A Collective Description of Electron Interactions. I. Magnetic Interactions". *Phys. Rev.* 82 (5 kesäkuu 1951), s. 625–634. DOI: 10.1103/PhysRev.82.625.
- [9] <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/chartNuc.jsp>. (Viitattu 30.08.2021).
- [10] M. Wang ym. "The Ame2012 atomic mass evaluation". *Chinese Physics C* 36.12 (joulukuu 2012), s. 1603–2014. DOI: 10.1088/1674-1137/36/12/003.