

**Oktupolideformaation vaikutus
sähköisiin ja magneettisiin
dipolisiirtymävoimakkuuksiin
sekä fotoabsorbtiovaikutusalaan**

Pro gradu -tutkielma, 11.5.2024

Tekijä:

MANU KANERVA

Ohjaaja:

MARKUS KORTELAINEN



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO
FYSIKAN LAITOS

© 2024 Manu Kanerva

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

Kanerva, Manu

Oktupolideformaation vaikutus sähköisiin ja magneettisiin dipolisiirtymävoimakkuuksiin sekä fotoabsorbtiovaikutusalaan

Pro gradu -tutkielma

Fysiikan laitos, Jyväskylän yliopisto, 2024, 91 sivua

Peiliheijastussymmetrian rikkova, päärynän muotoa muistuttava oktupolideformaatio on poikkeuksellinen, varsin rajatuilla ydinkartan alueilla esiintyvä ytimen kollektiivinen ominaisuus. Toisaalla, ytimen suurempien viritysenenergioiden sähkömagneettisen vasteen tiedetään riippuvan ytimen kollektiivisista ominaisuuksista, kuten muodosta. Tässä pro gradu -tutkielmassa nämä kaksi asiaa yhdistetään ensimmäistä kertaa toisiinsa selvittämällä oktupolideformaation vaikutusta sähköisiin ja magneettisiin dipolisiirtymävoimakkuuksiin sekä jättidipoliresonanssialueen fotoabsorbtiovaikutusaloihin. Tutkimus keskittyy aktinoidialueen perustilassaan oktupolideformoituneiksi arvioituihin parillisparillisiin Th , U , Pu ja Cm -isotooppeihin massalukualueilla $A = 222-230$ ja $A = 288-290$. Teen tutkimuksen laskennallisesti käyttäen olemassa olevaa Skyrme-HFB-viitekehysten mukaista laskentaohjelmaa, jolla määritän ytimien perustilat. Määrittämieni perustilojen pohjalta selvitän ytimien sähkömagneettista vastetta lineaarisen vasteen mukaisella vakiintuneella FAM-QRPA-menetelmällä. Oktupolideformaatiolla ei tutkimuksessa kertyneiden tulosten perusteella ole vaikutusta tai vaikutus on pieni $E1$ -siirtymävoimakkuuksiin ja niiden mukaisiin fotoabsorbtiovaikutusaloihin. Laskettujen $M1$ -siirtymävoimakkuuksien perusteella oktupolideformaatiolla on vaikutusta magneettisiin siirtymävoimakkuuksiin erityisesti spin-kääntöresonanssien energia-alueella. Sivutuloksena tutkimuksessa huomataan, että mahdollistamalla laskuissa ytimelle oktupolideformoitunut perustila pienenee tai tasoittuu $E1$ -siirtymissä jättidipoliresonanssialueen suuremmilla energioilla havaittava, ylimääräiseksi tulkittava erityisesti SkM^* -Skyrme-parametrisointeihin liittyvä sähköinen siirtymävoimakkuus- ja vaikutusala-alue.

Avainsanat: Oktupolideformaatio, siirtymävoimakkuus, fotoabsorbtiovaikutusala, aktinoidi

Abstract

Kanerva, Manu

Impact of octupole deformation on electric and magnetic dipole transition strengths and photoabsorption cross section

Master's thesis

Department of Physics, University of Jyväskylä, 2024, 91 pages.

Reflection-symmetry breaking octupole-deformed pear-like nuclear shape is an extraordinary collective property of the atomic nucleus, realized in rather limited areas of the nuclear chart. In turn, the electromagnetic response of the nucleus at the higher excitation energies is well-known to be affected by collective properties, such as the shape of the nucleus. In this master's thesis, for the first time, these two aspects are connected as a survey on the impact of octupole deformation on electric and magnetic dipole transition strengths as well as on the photoabsorption cross section, primarily focusing on the giant dipole resonance energy region. Research focuses on the actinide region of the nuclear chart concerning octupole deformed even-even isotopes of Th, U, Pu, and Cm with mass numbers between $A = 222$ – 230 and $A = 288$ – 290 . The research is conducted using existing computational programs operating in the framework of Skyrme-HFB theory to determine the ground state properties of the studied isotopes. Based on the ground state solutions, nuclear electromagnetic dipole responses are examined in the framework of linear response theory using the well-established FAM-QRPA method. Octupole deformation is found to have little or no impact on $E1$ transition strengths and photoabsorption cross sections. Computed $M1$ transition strengths indicate octupole deformation having an impact on the magnetic transition strengths, especially in the spin-flip resonance region. As a side result, it is found that allowing the nucleus to have an octupole-deformed ground state may significantly decrease or flatten an artificial-seeming peak at the higher end of the giant dipole resonance region related to electric dipole transitions, apparently caused by features related to used SkM* Skyrme parametrization.

Keywords: Octupole deformation, transition strength, photoabsorption cross section, actinide

Sisällys

Tiivistelmä	3
Abstract	5
1 Johdanto	9
2 Teoreettinen viitekehys	13
2.1 Ytimen spontaani symmetriarikko ja muoto	13
2.2 Ytimen kuvaus harmonisten oskillaattorien kannassa	15
2.3 Hartree–Fock–Bogoliubov-menetelmä	17
2.3.1 HFB-aaltofunktio	18
2.3.2 HFB-yhtälöt	20
2.3.3 HFB-yhtälöiden ratkaiseminen	24
2.3.4 Rajoitetut HFB-ratkaisut	26
2.4 Ytimen energiatiheysfunktionaaliteoria	26
2.4.1 Skyrme-potentiaalienergiefunktionaali	27
2.4.2 Coulomb-energiefunktionaali	30
2.4.3 Pariliitosenergiefunktionaali	31
2.5 Ydin ulkoisessa kentässä ja FAM-QRPA-menetelmä	32
2.5.1 Ulkoinen kenttä	33
2.5.2 FAM-QRPA-yhtälöt	35
2.5.3 FAM-QRPA-yhtälöiden ratkaiseminen	38
2.5.4 Siirtymävoimakkuus ja fotoabsorbtiovaikutusala	41
3 Menetelmät	45
3.1 Ytimen perustilojen määrittäminen	46
3.2 Siirtymävoimakkuuksien ja fotoabsorbtiovaikutusalojen laskeminen	48
4 Tulokset	51
4.1 Deformaatioenergiat ja deformaatiot	51

4.2	Sähköiset dipolisiirtymävoimakkuudet	53
4.3	Fotoabsorbtiovaikutusalat	55
4.4	Magneettiset dipolisiirtymävoimakkuudet	60
5	Johtopäätökset	65
	Lähteet	66
A	FAM-QRPA-yhtälöiden johtaminen	73
B	FAM-QRPA-tiheydet	79
C	Esimerkkiparametritiedostot	83
D	Tuloskuvaajia	85

1 Johdanto

Ytimen vuorovaikuttaessa sähkömagneettisen kentän kanssa se voi virittyä absorboimalla tai käänteisesti sen viritys purkautua emittoimalla fotoneita. Viritystilojen herkkyyttä virittyä tai purkautua voidaan kuvata siirtymävoimakkuutena, joka puolestaan vaikuttaa suoraan vastaavan viritystilan ja -energian fotoabsorbtiivikutusalaan. Pienillä viritysenergioilla ytimen viritystilat ovat harvassa muodostaen diskreetin yksittäisten nukleonien tiloina ymmärrettävän jakauman, mutta tarkasteltaessa suuremmalla energialla olevia viritystiloja kasvaa niiden tilatiheys muodostaen resonansseista koostuvan jatkuvan jakauman, jota voidaan tulkita ytimen kollektiivisten ominaisuuksien myötä. [1, 2]

Kauimmin tunnettuja resonansseja ovat sähköiset (isovektori)jättidipoliresonanssit (eng. *Isovector Giant Dipole Resonance*, IVGDR), jotka esiintyvät suunnilleen viritysenergioiden 10 ja 30 MeV välillä ytimen massaluvusta riippuen. Sähköinen jättidipoliresonanssi tunnistettiin kokeellisesti 1947–1948 [3, 4] ollen yksinkertaistaen ymmärrettävissä neutronien ja protonien vastakkaisessa (IV) vaiheessa tapahtuvana kollektiivisena värähtelynä [5, 6]. Sittemmin sähköisiä ja muita resonansseja sekä niihin liittyviä siirtymävoimakkuuksia on tutkittu runsaasti [1, 7] niiden liittyessä moniin ydinfysiikan ilmiöihin.

Magneettiset jättidipoliresonanssit koostuvat pääosin sähköisiä pienemmillä, suunnilleen energian 2 ja 10 MeV välillä olevista saksimoodi- (eng. *Scissors mode*) ja spin-kääntöresonansseista (eng. *spin-flip*) [8]. Saksimoodit (2,5–4 MeV) voidaan ymmärtää [8] deformaation ytimen protonien ja neutronien ratapyörimismäärään liittyvänä saksimaisena liikkeenä, spin-kääntöresonanssien (5–10 MeV) puolestaan aiheutuessa spin-ylös ja spin-alas nukleonien vastakkaisen vaiheen värähtelystä toisiaan vasten. Saksi- ja spin-kääntöresonanssien sijainti energia-akselilla osoittaa riippuvuutta ytimen massaluvusta sekä saksiresonanssien sijainti myös ytimen deformaatiosta [8]. Lisäksi saksiresonanssien kokonaisvoimakkuuden on havaittu [9] olevan suoraan verrannollinen deformaatiota kuvaavan parametrin neliöön, eikä saksiresonansseja havaita pallosymmetrisillä ytimillä.

Muodon ollessa yksi ytimen kollektiivisista ominaisuuksista vaikuttaa se edel-

lä kuvastustikin siirtymävoimakkuuksiin ja fotoabsorbtiovaikutusaloihin. Muotoon liittyen ytimen mahdollista poikkeamaa pallosymmetrisyydestä eli deformaatiota voidaan kuvata multipolieksansiona, joista kaksi ensimmäistä ytimen fysikaalista deformaatiota kuvaavaa multipolia ovat kvadrupoli- ja oktupolideformaatio [6]. Kvadrupolideformaatio jakautuu aksiaalisymmetrisiin ytimiin keskittyttäessä prolaatti- ja oblaattideformoituneisiin muotoihin, jotka ovat määritettävissä fotoabsorbtion jäätidipoliresonanssien jakautumisesta [10]. Puolestaan oktupolideformaatio muistuttaa aksiaalisymmetrisessä tapauksessa päärynän muotoa sen rikkoessa ytimen pariteetti- eli peiliheijastussymmetrian.

Oktupolideformoituneita ytimiä on ydinkartan laajasti kattavissa tutkimuksissa [11, 12] arvioita olevan melko rajatuissa lähinnä lantanoidien ja aktinoidien joukossa esiintyvissä saarekkeissa. Kokeellisesti oktupolideformaatioon viittavia tunnusmerkkejä [13, 14] ovat parillisparillisissa ytimissä perustilan ($J^\pi = 0^+, 2^+, 4^+, \dots$) ja vastakkaisen pariteetin ($J^\pi = 1^-, 3^-, 5^-, \dots$) lähekkäisen energian rotaatiosarjat sekä pariton massalukuisissa ytimissä lähekkäiset vastakkaisen pariteetin perus- ja viritystilat sekä $E3$ -siirtymien voimistuminen ja niistä johdettavat sisäiset oktupolimomentit. Edellä mainittujen tunnusmerkkien lisäksi oktupolideformaatio vaikuttaa tai sillä voidaan selittää [15] fission liittyen asymmetrisiä fissiona ja klusteri radioaktiivisuutta (eng. *cluster radioactivity*) [16]. Erityistä kiinnostusta oktupolideformaatioon liittyen on herättänyt sen Schiff momenttia kasvattava vaikutus pariton massalukuisilla ytimillä [17–19], johtaen atomin sähköisen dipolimomentin (eng. *electric dipole moment*, EDM) kasvuun. EDM:lle on toistaiseksi kyetty mittaamaan vain ylärajoja [20], mutta ne ovat kertaluokkia suurempia, kuin hiukkasfysiikan standardi malliin (SM) liittyvän varauksen ja pariteetin (eng. *charge and parity*, \mathcal{CP}) rikon mukaiset ennusteet niiksi ovat [21]. Näin ollen EDM:n havaitseminen liittyisi SM:n ulkopuoliseen fysiikkaan mahdollisesti auttaen esimerkiksi maailmankaikkeuden materia-antimateria asymmetrian ymmärtämissä [20].

Tässä tutkielmassa pyrin selvittämään miten ytimen pariteettisymmetrian rikkova oktupolideformaatio vaikuttaa sähköisiin $E1$ - ja magneettisiin $M1$ -siirtymävoimakkuuksiin sekä $E1$ -siirtymistä laskettuun fotoabsorbtiovaikutusalaan aktinoidialueen parillisparillisissa ytimissä. Edellä mainituista resonanssien ja deformaatioiden yhteyksistä kaikki ovat liittyneet kvadrupolideformaatioon, eikä aiempaa tutkimusta oktupolideformaation vaikutuksesta näihin resonansseihin ole tehty. Tutkimuksen teen laskennallisesti käyttäen valmiina olevia laskentaohjelmia ytimien perustilojen

ja viritystilojen määrittämiseksi ulkoisissa harmonisissa $E1$ - ja $M1$ -häiriökentissä. Ytimen perustila määritetään Skyrme-HFB-viitekehyksessä [22] aksiaalisymmetrisessä harmonisessa oskillaattorikannassa HFBTHO v2.00d -laskentaohjelmalla [23]. Ytimen viritystiloja ulkoisessa sähkömagneettisessa häiriökentässä tutkin HFBTHO v2.00d -laskentaohjelman päälle rakennetulla lineaarisen vasteen (eng. *Linear Response*) teoriaan perustuvalla FAM-QRPA-ratkaisimella [24], joka määrittää siirtymävoimakkuudet, joista puolestaan lasken vaikutusalat.

Tutkielmani rakenne on seuraava. Ensimmäisenä luvussa 2 esittelen tämän tutkielman mukaiseen ytimen tutkimiseen liittyvän teoreettisen viitekehyksen, joka karkeasti jakautuu muutaman läpi tämän tutkielman esiintyvän perusasian lyhyeen esittelyyn sekä ytimen perustilan ja ajasta riippuvien viritystilojen kuvaamiseen. Tämän jälkeen luvussa 3 käyn läpi yksityiskohtaisesti, miten olen ytimen perustilat sekä siirtymävoimakkuudet ja vaikutusalat laskentaohjelmia käyttäen määrittänyt. Luvussa 4 esittelen kertyneet tulokset keskittyen niistä tehtävissä oleviin havaintoihin hieman muihin tutkimuksiin verraten sekä viimeiseksi luvussa 5 arvioin tuloksista tehtävissä olevia johtopäätöksiä ja niiden merkitystä.

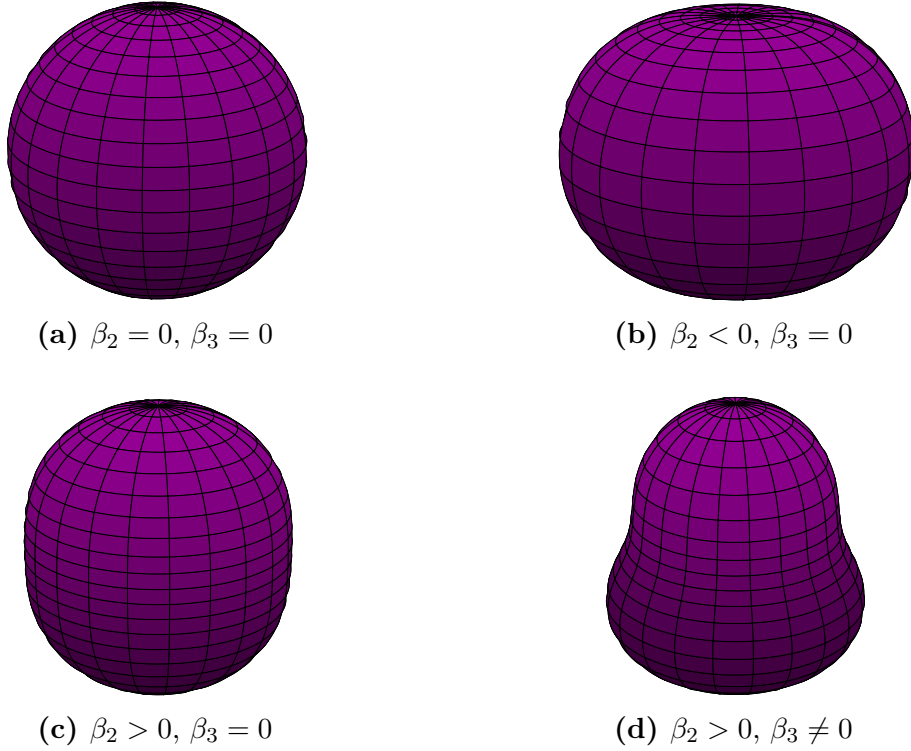
2 Teoreettinen viitekehys

Tässä osiossa esittelen ensin luvussa 2.1 lyhyesti ytimen spontaanin symmetriarikon keskittyen ytimen muotoon kollektiivisena ominaisuutena. Osiot 2.2–2.4 keskittyvät ytimen perustilan kuvaamiseen luoden samalla pohjan ytimen viritystilojen tarkastelulle. Luvussa 2.2 esitän ytimen kuvaamisen aksiaalisymmetrisessä harmonisten oskillaattorien kannassa yksi(kvasi)hiukkaskuvassa. Luvussa 2.3 esittelen Hartree–Fock–Bogoliubov (HFB) -teorian perusteet ja yhtälöt sekä luvussa 2.4 Skyrme-muotoisen energiafunktioaaliteorian, joka tässä tutkielmassa yhdistyy erityisesti HFB-yhtälöiden ratkaisemiseen. Puolestaan luku 2.5 keskittyy ulkoisessa kentässä olevan ytimen, erityisesti sen viritystilojen ja -energioiden, kuvaamiseen. Tähän liittyen annan määritelmät värähtelevälle ulkoiselle häiriökentälle, jonka jälkeen esittelen pienen amplitudin menetelmän (eng. *finite amplitude method*, FAM) yhdistettynä kvasihiukkasen satunnaisen vaiheen approksimaatioon (eng. *quasi-particle random phase approximation*, QRPA) eli FAM-QRPA-menetelmän ajasta riippuvan kollektiivisesti viritetyn ytimen kuvaamiseksi. Lopuksi esittelen vielä, miten saaduista FAM-QRPA-ratkaisuista saadaan laskettua ytimen siirtymävoimakuusfunktio sekä fotoabsorbtiovaikutusala.

2.1 Ytimen spontaani symmetriarikko ja muoto

Yksinkertaisimmillaan ydin on pallonmuotoinen tai sen sisäinen rakenne huomioiden pallosymmetrinen. Suurin osa ytimistä kuitenkin on deformatuneita eli ei-pallosymmetrisiä. Tämä johtuu ytimen spontaanista symmetriarikosta, josta laajemmin esimerkiksi lähteessä [25], jonka myötä suurin osa ytimistä saa deformatumalla lisää sidosenergiaa. Käyttämällä sidosenergialle konventiota, jossa se saa negatiivisia arvoja voidaan ytimen sanoa pyrkivän minimoimaan energiansa minimin vastatessa sen perustilaa.

Aksiaalisymmetrisen, toisin sanoen sylinterisymmetrisen ytimen pinnan muotoa



Kuva 1. Multipolieksansion (1) mukaisia eri muotoisia ytimiä. Kuvissa deformaatiot ovat (a) pallosymmetrinen, (b) oblaattideformoitunut $\beta_2 < 0$, (c) prolaattideformoitunut $\beta_2 > 0$ ja (d) oktopolideformoitunut $\beta_3 \neq 0$ prolaattideformaatiolla $\beta_2 > 0$. Kuvissa deformaatiot ovat todellisiin ytimiin nähden liioiteltuja erojen havainnollistamiseksi.

voidaan kuvata multipoliekspansiolla [6]

$$R(\theta) = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda \geq 2} \beta_\lambda Y_{\lambda 0}^*(\theta), \right) \quad (1)$$

missä β_λ on λ -asteisen multipolin deformaatioparametri, R_0 pallon muotoa vastaavan ytimen säde ja $Y_{\lambda 0}$ on palloharmoninen funktio. Ekspansiossa dipolitermi ($\lambda = 1$) on jätetty pois, sen vastatessa koko ytimen siirtämistä, ekspansion ensimmäisiksi termeiksi jääden kvadrupoli- ($\lambda = 2$) ja oktopolideformaatiot ($\lambda = 3$), joiden mukaiset ytimen deformaatiot ovat esitettynä kuvissa 1a–1d. Tässä tutkielmassa käytän deformaation mittana ytimen sisäisiä multipolimomentteja deformaatioparametrien β_λ sijaan, joskin niiden välillä on yhteys siten, että aksiaalisymmetrisessä tapauksessa kvadrupoli- ja oktopolideformaatioon liittyvät parametrit ovat [26]

$$\beta_2 = \frac{\sqrt{5\pi}}{3AR_0^2} Q_2, \quad \beta_3 = \frac{\sqrt{7\pi}}{3AR_0^3} Q_3, \quad (2)$$

missä Q_2 ja Q_3 ovat ytimen sisäisen koordinaatiston kvadrupoli- ja oktupolimomentit sekä A on ytimen massaluku. Sisäisistä multipolimomenteista $Q_2 > 0$ vastaa prolaatti- ja $Q_2 < 0$ oblaattideformaatiota. Puolestaan $Q_3 > 0$ ja $Q_3 < 0$ momenttien välillä ei ole fysikaalista eroa niiden riippuessa vain koordinaatiston orientaatiosta. Lisäksi huomioitavaa on, että sisäisen koordinaatiston multipolimomentit kuvaavat ytimen potentiaalin deformaatiota – eivät laboratoriokoordinaatistossa kokeellisesti mitattavia multipolimomentteja. Nämä tosin ovat approksimoiden liitettävissä toisiinsa lausekkeella [2, 25]

$$Q_{\lambda\mu}^{\text{sis}} = \sum_{\mu'} D_{\mu'\mu}^{\lambda} Q_{\lambda\mu'}^{\text{lab}},$$

missä $Q_{\lambda\mu}^{\text{sis}}$ ja $Q_{\lambda\mu'}^{\text{lab}}$ ovat sisäisen ja laboratoriokoordinaatiston λ -asteiset multipolimomentit sekä $D_{\mu'\mu}^{\lambda}$ on Eulerin kulmista riippuva Wignerin D -funktio.

2.2 Ytimen kuvaus harmonisten oskillaattorien kannassa

Ytimen aaltofunktion määräävät yksi(kvasi)hiukkastilat voidaan esittää harmonisen oskillaattoripotentiaalin ratkaisun mukaisten aaltofunktioiden φ_{α} ekspansiona [27]

$$\Psi_i = \chi_{q_k}(\tau) \sum_{\alpha} C_{i,\alpha} \varphi_{\alpha}, \quad (3)$$

missä $\chi_{q_k}(\tau)$ kuvaa isospin vapausastetta, eli nukleoni voi olla neutroni tai protoni. Lisäksi ekspansiossa (3) α kuvaa harmonisen oskillaattorin ratkaisuun liittyvien kvanttilukujen joukkoa ja $C_{i,\alpha}$:t ovat ekspansion kertoimia. Harmonisten oskillaattorien kanta soveltuu hyvin ytimen kuvaamiseen sitä vastaavan potentiaalin ollessa melko hyvä approksimaatio ytimestä tai toisaalta sitä realistisemmin kuvaavasta Wood-Saxon-potentiaalista ollen kuitenkin samalla laskennallisesti tehokas [2]. Seuraavaksi käyn läpi harmonisen oskillaattoripotentiaalin valinnan ja muodon, sekä sitä vastaavat aaltofunktiot φ_{α} ja näihin liittyvän kvanttilukujen joukon α määräytymisen.

Ydintä kuvatessa harmonisen oskillaattorin voisi valita pallosymmetriseksi tai täysin vapaa-asteiseksi oskillaattoriksi kolmessa ulottuvuudessa [28], mutta koska suurin osa ytimistä ei perustilassaan ole pallosymmetrisiä, mutta toisaalta ovat aksiaalisymmetrisiä, soveltuu aksiaalisymmetrinen harmoninen oskillaattori hyvin useimpien ytimien kuvaamiseen. Valitsemalla symmetria-akseliksi z -akselin voidaan ydintä kuvata sylinterikoordinaatistossa $\mathbf{r} = (r, \theta, z)$, jossa symmetriasta johtuen riittää koordinaa-

teiksi $\mathbf{r} = (r, z)$ eli radiaalinen koordinaatti ja z -koordinaatti. Tällöin kokonaispyörimismäärän z -komponentti \hat{J}_z tuottaa hyvän kvanttiluvun yksi(kvasi)hiukkastiloille Ψ_i siten, että $\hat{J}_z \Psi_i = \Omega_i \Psi_i$, mikä pätee myös tiloille φ_i , missä ominaisarvo Ω on ratapyörimismäärän ja spinin z -projektioiden summa $\Omega = \Lambda + \Sigma = \Lambda \pm \frac{1}{2}$ [27].

Aksiaalisymmetristä harmonista oskillaattoripotentiaalia vastaava Hamiltonin operaattori on [27]

$$\hat{H}_{\text{HO}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_{\perp}^2 r^2 + \omega_z z^2), \quad (4)$$

missä \hat{p} on liikemääräoperaattori ja m on hiukkasen eli nukleonin massa. Lisäksi ω_{\perp} ja ω_z ovat radiaalisen suunnan ja z -suunnan oskillaatiotaajuuudet. Hamiltonia (4) vastaavat ratkaisut, aaltofunktiot, ovat [27]

$$\varphi_{n_r \Lambda n_z \Sigma}(r, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{n_r}^{|\Lambda|}(r) \psi_{n_z}(z) e^{i\Lambda\varphi} \chi_{\Sigma}(\sigma), \quad (5)$$

missä $\psi_{n_r}^{|\Lambda|}(\rho)$ on radiaalinen ja $\psi_{n_z}(z)$ z -suuntainen osa aaltofunktiota, joiden määritelmät on esitetty lähteessä [27], sekä $\chi_{\Sigma}(\sigma)$ kuvaa nukleonien spin-vapausastetta. Lisäksi ratkaisussa (5) uusina esiintyvistä kvanttiluvuista n_r vastaa aaltofunktion solmujen (eng. *nodes*) lukumäärää radiaalisessa suunnassa ja n_z z -suunnassa. Aaltofunktioita (5) vastaavat energiatilat ovat [27]

$$E_{n_r \Lambda n_z \Sigma} = (2n_r + |\Lambda| + 1)\hbar\omega_{\perp} + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z.$$

Aaltofunktion (3) ekspansiossa yli summattavien kvanttilukujen joukoksi siis osoittautuu $\alpha = \{n_r, \Lambda, n_z, \Sigma\}$, jotka tunnetaan Nilssonin kvanttilukuina. Käytännön laskuja varten kyseinen ääretön ekspansio (3) täytyy katkaista jostain kohdin eli ekspansoida rajatussa kantatilajoukossa (eng. *configuration space*). Tätä ajatellen kannan koko voidaan valita ottamalla jokin luku M_0 ja asettamalla kvanttien lukumäärät kohtisuorassa tasossa ja z -suunnassa sitä pienemmäksi eli [27]

$$2n_r + \Lambda + 1 \leq M_0,$$

mitä vastaten $\Omega > 0$ -tilojen kokonaislukumääräksi tulee [27]

$$M = \frac{1}{6}(M_0 + 1)(M_0 + 2)(M_0 + 3). \quad (6)$$

Edellä $\Omega > 0$ -tilojen tarkastelu riittää tilan (3) oletetusta [27] ajankääntösymmet-

riasta johtuen, jolloin $\pm\Omega$ tilat ovat degeneroituneet.

2.3 Hartree–Fock–Bogoliubov-menetelmä

Tässä luvussa esittelen HFB-menetelmän ytimen perustilan ominaisuuksien kuvaamiseksi. Tähän liittyen käyn ensin läpi HFB-aaltofunktion perusteita, minkä jälkeen näytän HFB-yhtälöiden johdon pääkohtia sekä esittelen HFB-yhtälöt. Sitten esittelen HFB-yhtälöiden ratkaisemisen, ratkaisun ominaisuuksia sekä rajoitetut HFB-laskut, joilla voidaan pakottaa ratkaisuun haluttuja ominaisuuksia. Vielä ennen HFB-teoriaa käyn lyhyesti läpi Hartree–Fock- (HF) ja Bardeen–Cooper–Schieffer (BCS) -menetelmät sekä niiden yhdistämisen (HF+BCS) ytimen kuvaukseen liittyen, sillä HFB-menetelmässä yhdistyy monia näiden kuvaamista ilmiöistä.

HF-teorian perusajatuksena on korvata ytimessä olevien nukleonien kahdenväliset vuorovaikutukset keskeiskentällä eli potentiaalilla, jossa nukleonit liikkuvat keskenään vuorovaikuttamatta [2]. Olennaisesti tämä onnistuu muodostamalla tulomuotoinen aaltofunktio Slaterin determinanttina, missä hiukkasen luonti- ja hävitysoperaattorit (c_k^\dagger, c_k) on korvattu unitaarimuunnoksena saatavilla kanonisen kannan vastaavilla hiukkas-aukko-operaattoreilla (a_k^\dagger, a_k) , joille tulomuotoinen aaltofunktio näyttäytyy efektiivisenä tyhjiönä [2]. HF-menetelmällä saadaan muodostettua itseytyvä keskeispotentiaali Γ (eng. *self-consistent potential*) eli käytännössä edellä mainittu kenttä, jossa nukleonit itsenäisesti liikkuvat. HF-menetelmä soveltuu hyvin kuvaamaan pallosymmetrisiä eli pääosin neutroni- tai protoniluvultaan maagisia ytimiä, mutta sen huomioidessa vain hiukkas-aukko-vuorovaikutukset on sen ennustusvoima avoinkuorisilla deformatuneilla ytimillä rajallisempi.

Deformatuneiden avoinkuoristen ytimien tapauksessa olennaisia ovat nukleonien väliset hiukkas-hiukkas-vuorovaikutukset, jotka voivat saada ytimen suprajuoksevaan (eng. *superfluid*) tilaan [2]. Tätä ilmiötä voidaan käsitellä alun perin metallien suprajuoksevuuden mikroskooppisella tasolla selittäneellä BCS-mallilla [29]. Ytimien kuvauksessa BCS-malli käyttää erityisiä Bogoliubov–Valatin muunnoksella HF tai sitä vastaavista hiukkasoperaattoreista (a_k^\dagger, a_k) saatavia kanonisen kannan kvasihiukkas- ja hävitysoperaattoreineen $(\alpha_k^\dagger, \alpha_k)$, sekä näihin liittyvää efektiivisenä tyhjiönä näyttäytyvää tulomuotoista BCS-aaltofunktiota [2]. Kvasihiukkasten avulla BCS-tilassa kahden hiukkasen väliset hiukkas-hiukkas-vuorovaikutukset saadaan siis esitettyä keskenään vuorovaikuttamattomina fermionisina kvasihiukkasina, jotka kokevat kukin itsenäisesti pariliitoskentän Δ [2].

Yhdistämällä HF- ja BCS-menetelmät HF+BCS-malliksi voidaan kuvata avoin-kuorisia deformatuneita ytimiä huomioiden sekä hiukkas-aukko- että hiukkas-hiukkas-vuorovaikutukset. HF+BCS-mallin laskut voidaan tehdä suorittamalla iteratiivisesti ensin HF-lasku, jonka perusteella BCS-lasku tehdään, minkä jälkeen palataan jälleen tekemään HF-lasku ja niin edelleen, kunnes valittu konvergoitumisehto täyttyy. Tällöin hiukkas-aukko- ja hiukkas-hiukkas-vuorovaikutukset eivät tule käsitellyiksi samanaikaisesti. Samanaikaisuus voidaan kuitenkin saavuttaa HFB-menetelmässä, joka yhdistää HF- ja BCS-teorioissa esiteltyt asiat yhdeksi (variaatio)teoriaksi [2]. Erityisesti hyvin neutronirikkaiden ytimien, joiden ”viimeiset” neutronit ovat hyvin löyhästi ytimeen sitoutuneita, kuvaamisessa HF+BCS-menetelmä osoittautuu toimimattomaksi ja tällöin vain HFB-menetelmä on näistä vaihtoehdoista käyttökelpoinen [30]. Seuraavaksi esittelen HFB-teorian, joka on viitekehys, jossa ytimen ajasta riippumatonta perustilaa tässä tutkielmassa kuvataan.

2.3.1 HFB-aaltofunktio

HFB-menetelmän lähtökohtana on käyttää kvasihiukkasoperaattoreita tavallisten hiukkasoperaattorien sijaan. Kvasihiukkasten luonti- ja hävitysoperaattorit saadaan hiukkasten luonti- ja hävitysoperaattoreista c_l^\dagger ja c_l yleisellä Bogoliubov-muunnoksella [2]

$$\begin{aligned}\beta_k &= \sum_l (U_{lk}^* c_l + V_{lk}^* c_l^\dagger), \\ \beta_k^\dagger &= \sum_l (U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l),\end{aligned}\tag{7}$$

missä indeksi l käy läpi koko, esimerkiksi harmonisten oskillaattorien kantatilajoukon, puolestaan k :n voidessa vastata mitä tahansa tilaa tästä joukosta. Yhtälön (7) mukaiset kerroinmatriisit, HFB-amplitudit, U ja V määrittävät muunnoksen niiden ollessa rajoitetut siten, että saatavien kvasihiukkasoperaattoreiden tulee noudattaa tavanomaisia fermionien antikommutaatiorelaatioita eli

$$\begin{aligned}\{\beta_k, \beta_l\} &= 0 = \{\beta_k^\dagger, \beta_l^\dagger\}, \\ \{\beta_k, \beta_l^\dagger\} &= \delta_{l,k},\end{aligned}\tag{8}$$

missä $\delta_{k,l}$ on Kroneckerin delta ja antikommutaattori on

$$\{A, B\} = AB + BA. \quad (9)$$

Bogoliubov-muunnos (7) matriisimuodossa esitettynä on

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}, \quad (10)$$

missä matriisi \mathcal{W} on fermionisten antikommutaatiorelaatioiden nojalla unitaarinen eli [2]

$$\mathcal{W}\mathcal{W}^\dagger = 1 = \mathcal{W}^\dagger\mathcal{W}. \quad (11)$$

Näin ollen saadaan yhtälöstä (10) luettua käänteinen muunnos kvasihiukkasoperaattoreista hiukkasoperaattoreihin

$$\begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W} \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix}. \quad (12)$$

HFB-menetelmässä perustilaksi, jota kuvatkoon $|\Phi\rangle$, otetaan kvasihiukkahäviysoperaattoreille tyhjiönä näyttäytyvä tila, jolle pätee [2]

$$\beta_k |\Phi\rangle = 0 \quad (13)$$

kaikilla kantatilajoukon tiloilla k . Tämän mukainen $|\Phi\rangle$ muodostetaan muunnoksen (7) mukaisista kvasihiukkasoperaattoreista normitettuna tulotilana, jonka oletetaan olevan hyvä approksimaatio ytimen perustilan aaltofunktiosta, seuraavasti [2]

$$|\Phi\rangle = \mathcal{N} \prod_k^M \beta_k |0\rangle, \quad (14)$$

missä k käy läpi kaikki kantatilat tilaan M asti siten, että jos tilaa $|0\rangle$ operoitaisiin vielä yhdelläkin β_l :llä, jossa l ei kuulu joukkoon $k = 1, \dots, M$, annihiloituisi muodostettava tila yhtälön (13) mukaisesti. Lisäksi \mathcal{N} on normitustekijä huolehtien aaltofunktion normituksesta, eli ehdosta $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$. Puolestaan $|0\rangle$ on tyhjiö, joka näyttäytyy hiukkasoperaattoreille tyhjiönä eli $c_k |0\rangle = 0$ kaikilla k .

Joidenkin operaattoreiden suhteen tyhjiönä tai efektiivisenä tyhjiönä näyttäytyvään tilaan liittyen on hyödyllistä tarkastella operaattoreiden kontraktioita ja käyttää

Wickin teoremaa [31], jota tässä tutkielmassa hyödynnän lähteen [32] notaatioiden mukaisesti. Kontraktiot ja Wickin teoreema ovat hyödyllisiä myös HFB-tilan ja kvasihiukkasoperaattoreiden tapauksessa. Kvasihiukkasoperaattorien (7) kontraktiot muodostetun HFB-tilan (14) suhteen ovat [2]

$$\begin{aligned}\overline{\beta_i \beta_j^\dagger} &= \langle \Phi | \beta_i \beta_j^\dagger | \Phi \rangle = \delta_{ij}, \\ \overline{\beta_i^\dagger \beta_j} &= \overline{\beta_i} \beta_j = \overline{\beta_i^\dagger} \beta_j^\dagger = 0\end{aligned}\tag{15}$$

ollen kuten yleensäkin fermionisia antikommutaatiorelaatioita noudattaville operaattoreille niille tyhjiönä näyttäytyvän tilan suhteen on. Tämän lisäksi hiukkasoperaattoreiden suhteen, joille HFB-tila ei ole efektiivinen tyhjiö, kontraktiot ovat [28]

$$\begin{aligned}\rho_{ij} &= \overline{c_j^\dagger c_i} = \langle \Phi | c_j^\dagger c_i | \Phi \rangle, \\ \kappa_{ij} &= \overline{c_j c_i} = \langle \Phi | c_j c_i | \Phi \rangle, \\ (1 - \rho)_{ij}^* &= \overline{c_j c_i^\dagger} = \langle \Phi | c_j c_i^\dagger | \Phi \rangle, \\ \kappa_{ij}^* &= \overline{c_i^\dagger c_j^\dagger} = \langle \Phi | c_i^\dagger c_j^\dagger | \Phi \rangle.\end{aligned}\tag{16}$$

Yhtälössä (16) ρ ja κ ovat tiheysmatriisi ja pariliitostensori (eng. *pairing tensor*), jotka voidaan ilmaista myös HFB-kerroinmatriisien avulla [2]

$$\begin{aligned}\rho &= V^* V^T, \\ \kappa &= V^* U^T = -U V^\dagger.\end{aligned}\tag{17}$$

Kontraktiot yhdessä Wickin teoreeman kanssa ovat erittäin hyödyllisiä, kun (kvasi)hiukkasoperaattoreiden avulla muodostetuille operaattoreille halutaan laskea odotusarvoja HFB-tilan suhteen.

2.3.2 HFB-yhtälöt

HFB-yhtälöiden tarkoituksena on määrittää HFB-aaltofunktio eli sen kerroinmatriisit U ja V sekä tätä vastaavan ytimen perustilan energia. HFB-yhtälöt voidaan johtaa lähtien hiukkasoperaattorein esitetystä energiaoperaattorista \hat{H} tai tiheyksistä riippuvista voimista ja siten tiheysriippuvasta energiefunktionaalista $\mathcal{E}[\rho, \kappa^*, \kappa]$, joilla kummallakin päädytään samoihin HFB-yhtälöihin [2, 28]. Esittelen seuraavaksi HFB-

yhtälöiden johtamisen käyttäen hiukkasoperaattorein esitettyä Hamiltonia, vaikka yhtälöiden ratkaisuun liittyen tässä tutkielmassa käytetäänkin energiafunktionaalia.

Hamiltonin operaattoriksi, jota vastaavan perustilan hyväksi approksimaatioksi HFB-aaltofunktiota oletetaan, valitaan kahden hiukkasen väliset vuorovaikutukset huomioiva esitys, joka hiukkasoperaattoreilla ilmaistuna on [2]

$$\hat{H} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3}. \quad (18)$$

Hamiltonin (18) ensimmäinen termi liittyy hiukkasten liike-energiaan, jota liikemääräoperaattori t kuvaa, ja toinen termi kuvastaa hiukkasten välisiä vuorovaikutuksia. Toisen termin \bar{v} on antisymmetrisoitu kahden hiukkasen vuorovaikutusmatriisin elementti siten, että

$$\bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3}, \quad (19)$$

ja

$$v_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \frac{1}{2} \langle l_1 l_2 | \hat{V} | l_3 l_4 \rangle, \quad (20)$$

jossa \hat{V} on kahden hiukkasen välinen vuorovaikutus.

Koska muodostettava HFB-aaltofunktio $|\Phi\rangle$ rikkoo hiukkasluku­symmetrian, eli se ei ole hiukkaslukumäärän ominaistila, on Hamiltonin (18) sijaan käytettävä operaattoria [2]

$$\hat{H}' = \hat{H} - \sum_{q=n,p} \kappa_q N_q. \quad (21)$$

Hamiltonin (21) κ_q on kemiallinen potentiaali eli suure, joka kuvaa energian vastetta systeemin neutroni- tai protoniluvun muutoksiin. Näin esitettynä Hamiltonia (21) vastaava energian minimi löytyy neutroni- ja protoniluvuilla N_q , jotka siis ovat hiukkasluvun odotusarvoja

$$N_q = \langle \Phi | \hat{N}_q | \Phi \rangle. \quad (22)$$

Käyttämällä Hamiltonia \hat{H}' saadaan HFB-yhtälöiden ratkaisuna hiukkasluvultaan vaadittua vastaava HFB-tila, mikä on ytimien suhteellisen pienen hiukkas­määrän ($N \sim 100$) vuoksi tärkeää. Merkintöjen yksinkertaistamiseksi käytän Hamiltonin operaattorista jatkossa merkintää \hat{H} vastaten kuitenkin yhtälön (21) Hamiltonia.

Kun Hamiltonin operaattori on määritetty kuten edellä ja huomioidaan aiemmin esitetyt perusteet HFB-aaltofunktiosta, HFB-yhtälöt voidaan johtaa variaatiope­riaatteen (eng. *variational principle*) mukaisesti Thoulessin teoreeman [33] avulla

[2]. Lyhyesti kuvattuna variaatioperiaatteessa haetaan varioimalla jonkin muuttujan suhteen ratkaisua yhtälöön [2]

$$\delta \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = 0,$$

eli käytännössä derivaatan nollakohtaa energialle jonkin aaltofunktiota määrittävän muuttujan suhteen. Tarkemmin ottaen on vielä tarkistettava vastaako löytynyt nollakohta energian minimiä vai satulakohtaa (eng. *saddle point*). Variaatioperiaatteen käyttö perustuu olennaisesti tietoon, että sillä löydettävä energian arvo on suurempi tai yhtä suuri, kuin todellista perustilaa vastaava energia E_0 , eli

$$\frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \geq E_0,$$

kuitenkin olettaen, että löydetään lähellä todellista perustilan energiaa oleva tila ja siten siis hyvä approksimaatio perustilan aaltofunktioksi $|\Phi\rangle$. Thoulessin teoreeman mukaisesti voidaan muodostaa HFB-aaltofunktion suhteen ei-ortogonaalinen funktio $|\Phi'\rangle = |\Phi\rangle + \delta |\Phi\rangle$ muodossa [2]

$$|\Phi'\rangle = e^{\sum_{k < k'} Z_{kk'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger} |\Phi\rangle,$$

missä $Z_{kk'}$ ovat vapaita muuttujia. Esittämällä vielä Hamilton (21) muunnoksen (7) mukaisesti kvasihiukkasten avulla [2]

$$\hat{H} = H^0 + \sum_{kk'} H_{kk'}^{11} \beta_k^\dagger \beta_{k'} + \left(\sum_{k < k'} H_{kk'}^{20} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger + H_{kk'}^{20*} \beta_{k'} \beta_k \right) + H_{\text{int}}, \quad (23)$$

missä H_{int} sisältää H^{22} , H^{31} ja H^{40} termejä, jotka HFB-mallissa jätetään huomiotta, löydetään käyttäen muodostettua funktiota $|\Phi'\rangle$ ja Hamiltonia (23) sekä varioimalla variaatioperiaatteen mukaisesti $Z_{kk'}^*$:n suhteen, että [2]

$$\left. \frac{\partial}{\partial Z_{kk'}^*} \frac{\langle \Phi' | \hat{H} | \Phi' \rangle}{\langle \Phi' | \Phi' \rangle} \right|_{Z=0} = H_{kk'}^{20} = 0.$$

Eli perustilaa vastaavassa ratkaisussa tulee olla $H_{kk'}^{20} = 0$, mikä tosin määrittää Bogoliubov-muunnoksesta (7) vasta erityisen BCS operaattoreita $(\alpha_k^\dagger, \alpha_k)$ vastaavan osuuden [2]. Vielä diagonalisoimalla yhtälön (23) H^{11} , saadaan täysin muunnosta (7)

vastaava ratkaisu, jolloin käytännössä tulee diagonalisoitavaksi kvasihiukkaskannassa esitetty supermatriisi [2]

$$\begin{pmatrix} H^{11} & H^{20} \\ -H^{20*} & -H^{11*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \Phi | \{ [\beta_k, \hat{H}], \beta_{k'}^\dagger \} | \Phi \rangle & \langle \Phi | \{ [\beta_k, \hat{H}], \beta_{k'} \} | \Phi \rangle \\ \langle \Phi | \{ [\beta_k^\dagger, \hat{H}], \beta_{k'}^\dagger \} | \Phi \rangle & \langle \Phi | \{ [\beta_k^\dagger, \hat{H}], \beta_{k'} \} | \Phi \rangle \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Esittämällä supermatriisi (24) hiukkaskannassa muunnoksen (12) mukaisesti päädytään diagonalisointiongelmaan, jota kutsutaan yleisesti HFB-yhtälöiksi [2]

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} E_k. \quad (25)$$

Yhtälössä (25) h ja Δ ovat kvasiyksihiukkashamilton ja pariliitospotentiaali, joiden molempien dimensio on M HFB-aaltofunktion (14) mukaisesti. Wickin teoreeman avulla HFB-yhtälön (25) matriisin odotusarvojen laskeminen määrittää h :ksi ja Δ :ksi [2]

$$\begin{aligned} h &= \epsilon + \Gamma - \lambda, \\ \Delta_{l,l'} &= \frac{1}{2} \sum_{qq'} \bar{v}_{l'qq'} \kappa_{qq'}, \end{aligned} \quad (26)$$

missä ϵ on kvasiyksihiukkasenergia ja Γ on itseytyvä potentiaali, joka on sama potentiaali kuin HF-mallissakin ja sen määritelmä on

$$\Gamma_{ll'} = \sum_{qq'} \bar{v}_{lq'l'q} \rho_{qq'}. \quad (27)$$

Edellä esitettyjen perusteella kvasihiukkaskannassa esitetty Hamiltonin operaattori (23) saa nyt diagonaalisen muodon [2]

$$\hat{H}_0 = H^0 + \sum_{\mu} E_{\mu} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\mu}, \quad (28)$$

jonka ominaistilat ovat HFB-tyhjiö, yhden kvasihiukkasen viritystila, kahden kvasihiukkasen viritystila ja niin edelleen energioilla H^0 , E_l , $E_l + E_k$ ja niin edelleen. Lisäksi yhtälössä (28) olen valinnut notaatioksi \hat{H}_0 :n kuvaamaan staattista eli ajasta riippumatonta Hamiltonia sekä olen jättänyt merkitsemättä HFB-laskuissa huomiotta jätettävän termin H_{int} .

Kuten todettua HFB-yhtälöt olisi voitu myös johtaa tiheyksistä riippuvasta energiafunktionaalista, joka vastaisi normitettua odotusarvoa yhtälön (18) Hamiltonista HFB-tilan suhteen ollen [28]

$$\mathcal{E}[\rho, \kappa^*, \kappa] = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}^{\rho\rho}[\rho, \kappa] \rho_{lj} \rho_{ki} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}^{\kappa\kappa}[\rho, \kappa] \kappa_{ij}^* \kappa_{kl}. \quad (29)$$

Tällöin HFB-yhtälössä (25) esiintyvät kvasiyksihiukkashamiltonin ja pariliitospotentiaalin elementit saadaan lausekkeiden (26) sijaan varioimalla energiafunktionaalia tiheysmatriisiin ρ ja pariliitostensorin κ elementtien suhteen [2, 28]

$$\begin{aligned} h_{lk} &= \frac{\partial \mathcal{E}[\rho, \kappa^*, \kappa]}{\partial \rho_{kl}}, \\ \Delta_{lk} &= \frac{\partial \mathcal{E}[\rho, \kappa^*, \kappa]}{\partial \kappa_{lk}^*}. \end{aligned} \quad (30)$$

Energiafunktionaalin valinta ja sen muoto käytännössä määrittää sen, miten ytimessä olevien nukleonien väliset vuorovaikutukset tulevat huomioiduiksi, mistä tarkemmin luvussa 2.4.

2.3.3 HFB-yhtälöiden ratkaiseminen

HFB-yhtälöt (25) muodostavat epälineaarisen yhtälöryhmän tarkoittaen, että yhtälöt itsessään riippuvat niiden ratkaisusta. Näin ollen HFB-yhtälöt (25) on ratkaistava iteratiivisesti, minkä voi tehdä silmukassa diagonalisoimalla toistuvasti HFB-kerroinmatriisia tai iteroimalla gradienttimenetelmällä [2]. Keskityn seuraavassa esityksessä lähteessä [27] esiteltyyn ja tässä tutkielmassa käytettävässä laskentaohjelmassa [23] implementoituun tapaan, jossa HFB-matriisi diagonalisoidaan harmonisten oskillaattorien kannassa, josta saadun HFB-ratkaisun perusteella tiheysmatriisi ja pariliitostensori muodostetaan sekä potentiaalit lasketaan paikka-avaruudessa (eng. *coordinate space*).

Aksiaalisymmetrisessä tapauksessa HFB-yhtälöiden (25) ratkaiseminen voidaan aloittaa esimerkiksi ratkaisemalla Schrödingerin yhtälöstä aksiaalisymmetrisen harmonisen oskillaattoripotentiaalin mukaista Hamiltonia (4) vastaavat yksihiukkasaaltofunktiot (5) [28]. Tällöin HFB-yhtälöiden dimensioksi tulee $2M$ määritelmän (7) mukaisesti, missä M vastaa yhtälön (6) määräämää dimensiota. Ratkaistuista yksihiukkasaaltofunktioista (5) voidaan muodostaa alkuarvaus tiheyksiksi $\rho^{(0)}$ ja $\kappa^{(0)}$ [28].

Tiheyksistä puolestaan saadaan energiafunktioaali (29), jota varioimalla lausekkeen (30) mukaisesti saadaan kvasiyksihiukkashamilton h ja pariliitospotentiaali Δ . Näistä muodostetaan HFB-yhtälön (25) matriisi, joka diagonalisoimalla saadaan kerroinmatriisit $U_k^{(0)}$ ja $V_k^{(0)}$, jotka voidaan ekspansoida yhtälöä (3) vastaten harmonisten oskillaattoriyksihiukkatiilojen kannassa [34]

$$\begin{aligned} U_k^{(i)}(\mathbf{r}, \sigma, \tau) &= \chi_{q_k}(\tau) \sum_{\alpha} U_{k\alpha}^{(i)} \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}, \sigma), \\ V_k^{(i)}(\mathbf{r}, \sigma, \tau) &= \chi_{q_k}(\tau) \sum_{\alpha} V_{k\alpha}^{(i)} \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}, \sigma), \end{aligned} \tag{31}$$

missä indeksi i viittaa iteraatiokierrokseen. $U_k^{(i)}$:sta ja $V_k^{(i)}$:sta voidaan laskea uudet tiheydet $\rho^{(i+1)}$ ja $\kappa^{(i+1)}$ yhtälöiden (17) mukaisesti. Muodostunutta iteraatiosilmukkaa jatketaan, kunnes valittu konvergoitumisehto täyttyy. Käytännössä iteraation konvergoitumiseksi on sitä yleensä ”hidastettava” tai jotenkin muuten kontrolloitava [28]. Tämä tarkoittaa, että seuraavalla iteraatiokierroksella ei käytetäkään vain uusia arvoja, vaan siinä huomioidaan edellistenkin kierrosten arvot, mistä yksinkertaisempi tapa on niin kutsuttu lineaarinen sekoittaminen (eng. *linear mixing*) [28] ja yksi kehittyneempiä on Broydenin sekoittamismenetelmä [35].

Kantatilajoukon koon ollessa M ja siten HFB-yhtälöiden (25) dimension $2M$ saadaan ratkaisun tuloksena $2M$ kerroinvektoria U_k ja V_k sekä niitä vastaavat energiat E_k [2]. Osoittautuu kuitenkin, että energian arvoja on symmetrisesti M positiivista kertoimineen (U_k, V_k) ja M negatiivista kertoimineen (U_k^*, V_k^*), eli jokaista $E_k > 0$ energian arvoa kohden on yhtä suuri negatiivinen energian arvo $-E_k$ [2]. Näistä tulee valita M positiivista tai M negatiivista energiaa kertoimineen fermionisten antikommutaatiorelaatioiden täyttymiseksi tyypillisen valinnan ollessa M positiivista energiaa kertoimineen V_k ja U_k [2]. Valittujen kertoimien avulla Bogoliubov-muunnosta (7) käyttäen muodostetaan HFB-aaltofunktio $|\Phi\rangle$ eli saatu approksimaatio ytimen perustilaksi yhtälön (14) mukaisesti.

2.3.4 Rajoitetut HFB-ratkaisut

HFB-menetelmässä voidaan myös laskea ytimen perustila asettaen saatavalle ratkaisulle ehtoja, jotka saatavan HFB-aaltofunktion (7) odotusarvon on toteutettava. Odotusarvoon liittyvä ehto voi olla [2]

$$\langle \Phi | \hat{Q}_\lambda | \Phi \rangle = Q_\lambda, \quad (32)$$

missä \hat{Q}_λ voisi olla mikä tahansa yksihiukkasoperaattori, mutta joka nyt kuvaa λ -asteista multipolimomenttioperaattoria, luvussa 2.1 esitellyn mukaisesti, jonka odotusarvon on HFB-tilan suhteen oltava Q_λ . Edellä HFB-yhtälöiden johdossa asetettiinkin jo ehto hiukkasluvun odotusarvosta, jota ytimen perustilan on vastattava ja vastaavalla tavalla voidaan siis asettaa muitakin rajoituksia. Tällöin perustilaa ratkaistaan käyttäen Hamiltonia [2]

$$\begin{aligned} \hat{H}'' &= \hat{H} - \sum_{q=n,p} \kappa_q N_q - \sum_\lambda \kappa_\lambda Q_\lambda \\ &= \hat{H}' - \sum_\lambda \kappa_\lambda Q_\lambda, \end{aligned} \quad (33)$$

missä κ_λ on λ -asteiseen multipoliin liittyvä Lagrangen kerroin kemiallista potentiaalia κ_q vastaten. Asettamalla HFB-laskulle multipolimomenttiin liittyviä rajoituksia voidaan tutkia ytimen perustilan energiaa multipolien ja siten ytimen muodon funktiona.

2.4 Ytimen energiatiheysfunktionaaliteoria

HFB-yhtälöiden ratkaisemiseksi ja siten ytimen ominaisuuksien tutkimiseksi on valittava, miten nukleonien väliset vuorovaikutukset ytimessä käsitellään. HFB-teorian mukaisen keskeiskenttämallin kanssa usein käytetään ytimen energiatiheysfunktionaaliteoriaa (eng. *Energy Density Functional Theory*), jossa käytännössä yhtälön (18) kahden nukleonin välinen vuorovaikutus \hat{V} korvataan pseudovuorovaikutuksella tai muuten muodostamalla energialle funktionaali [28]. Vakiintuneita vaihtoehtoja [22] tähän ovat Gogny-vuorovaikutus [36] ja relativistiset keskeiskenttämallit [37, 38] sekä Skyrme-vuorovaikutus [39, 40], jota tässäkin tutkielmassa käytetään, joten esittelen sen mukaisen energiafunktionaalin seuraavaksi.

Ytimen Skyrme-vuorovaikutuksen mukaisessa energiatiheysfunktionaalissa yhtä-

lön (29) energiatiheys yleensä jaotellaan kineettiseen, Skyrme-potentiaali-, Coulomb- ja pariliitososaan sekä massakeskipisteen korjausosaan [22, 28]

$$\mathcal{E}[\rho, \kappa^*, \kappa] = \mathcal{E}_{\text{kin}}[\rho] + \mathcal{E}_{\text{Sk}}[\rho] + \mathcal{E}_{\text{Cou}}[\rho] + \mathcal{E}_{\text{pari}}[\rho, \kappa, \kappa^*] + \mathcal{E}_{\text{Korj}}[\rho]. \quad (34)$$

Määritelmässä (34) kaikki energiafunktioaalit kuvaavat kokonaisenergioita, jotka on saatu integroimalla kuhunkin liittyvät energiatiheydet yli avaruuden. Kun energiafunktioaali $\mathcal{E}[\rho, \kappa^*, \kappa]$ on muodostettu, saadaan siitä laskettua HFB-yhtälön kvasiyksihiukkashamilton ja pariliitospotentiaali varioimalla lausekkeiden (30) mukaisesti, mitä myöden HFB-yhtälöiden ratkaiseminen ja ytimen ominaisuuksien selvittäminen onnistuu.

Energiafunktioaalissa (34) $\mathcal{E}_{\text{kin}}[\rho]$ vastaa yhtälön (29) kineettistä osaa, joka lasketaan yksinkertaisesti integroimalla yli kineettisen tiheyden $\tau(\mathbf{r})$. Puolestaan yhtälön (34) termi $\mathcal{E}_{\text{Korj}}[\rho]$ liittyy ytimen rikkoutuneeseen translaatioinvarianssiin (eng. *translational invariance*), joka korjataan projisoimalla aaltofunktiot hyvälle massakeskipisteen liikemäärän tilalle, jotta massakeskipisteen liikemääräksi $\hat{\mathbf{P}}$ tulisi nolla $\hat{\mathbf{P}} = 0$ [22]. Korjaus tehdään usein approksimoiden [22] tai saatetaan jättää kokonaan huomiotta. Korjaus tehtäessä $\mathcal{E}_{\text{Korj}}[\rho]$ on arvoltaan negatiivinen, sillä massakeskipisteen liikemäärä tuo ytimeen ylimääräistä vääristävää (eng. *spurious*) energiaa [22]. Energiafunktioaalin lausekkeessa (34) huomioitavaa on, että Skyrme-potentiaali $\mathcal{E}_{\text{Sk}}[\rho]$ sisältää vain vahvaan vuorovaikutukseen liittyvän potentiaalin, eli protoneihin liittyvä Coulomb-potentiaali on omana terminään $\mathcal{E}_{\text{Cou}}[\rho]$. Seuraavaksi esittelen energiafunktioaalin (34) Skyrme-potentiaali-, Coulomb- ja pariliitososat tarkemmin.

2.4.1 Skyrme-potentiaalienergiafunktioaali

Skyrme-potentiaalienergiafunktioaalin $\mathcal{E}_{\text{Sk}}[\rho]$ muotoa on mahdollista perustella kahdella eri tavalla. Ensimmäinen on muodostaa se pseudovuorovaikutuksen [22, 28]

$$\hat{v}_{\text{Sk}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k}') = [\hat{v}_{\text{kesk}} + \hat{v}_{\text{LS}} + \hat{v}_{\text{tens}}](\mathbf{R}, \mathbf{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k}'), \quad (35)$$

odotusarvona HF-tilan suhteen, eli

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}[\rho] = \langle \Phi_{\text{HF}} | \hat{v}_{\text{Sk}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k}') | \Phi_{\text{HF}} \rangle, \quad (36)$$

missä HF-tila on nyt HFB-viitekehysessäkin sopiva, sillä $\mathcal{E}_{\text{Sk}}[\rho]$:ssa ei ole nyt pariitiosvuorovaikutuksia, jolloin HFB-yksinkertaistuu HF-ratkaisuksi. Pseudovuorovaikutuksessa (35) \hat{v}_{kesk} kuvaa keskistä vaikutusta, \hat{v}_{LS} spin-ratavaikutusta ja \hat{v}_{tens} tensorivaikutusta. Nämä voidaan määrittellä [28] siten, että keskinen vaikutus on

$$\begin{aligned} \hat{v}_{\text{kesk}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k}') &= t_0(1 + x_0\hat{P}_\sigma)\delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}t_1(1 + x_1\hat{P}_\sigma)\left[\overleftarrow{k}'^2\delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r})\vec{k}^2\right] \\ &+ t_2(1 + x_2\hat{P}_\sigma)\overleftarrow{k}' \cdot \delta(\mathbf{r})\vec{k} + \frac{1}{6}t_3(1 + x_3\hat{P}_\sigma)\rho^\alpha(\mathbf{R})\delta(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (37)$$

spin-ratavaikutus on

$$\hat{v}_{\text{LS}}(\mathbf{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k}') = iW_0[\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2] \cdot \overleftarrow{k}' \times \delta(\mathbf{r})\vec{k}, \quad (38)$$

ja tensorivaikutus on

$$\begin{aligned} \hat{v}_{\text{tens}}(\mathbf{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k}') &= \frac{1}{2}t_e \left\{ \left[3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{k}')(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \overleftarrow{k}') - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)\overleftarrow{k}'^2 \right] \delta(\mathbf{r}) \right. \\ &+ \left. \delta(\mathbf{r}) \left[3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \vec{k})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \vec{k}) - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)\vec{k}^2 \right] \right\} \\ &+ t_o \left[\frac{3}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{k}')\delta(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \vec{k}) + \frac{3}{2}(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \overleftarrow{k}')\delta(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \vec{k}) \right. \\ &\left. - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)\overleftarrow{k}' \cdot \delta(\mathbf{r})\vec{k} \right]. \end{aligned} \quad (39)$$

Määritelmässä (37)–(39) (t_i, x_i), W_0, t_e, t_o ja α ovat vapaita parametrejä, jotka voidaan määrittää kokeelliseen dataan sovittamalla. Yhtälöiden (37)–(39) muiden tekijöiden tarkemman käsittelyn jätän tämän tutkielman ulkopuolella, mutta lyhyesti todettuna $\vec{k} = -\frac{i}{2}(\nabla_1 - \nabla_2)$ ja \overleftarrow{k}' ovat suhteellisen liikemäärän operaattoreita, joista \vec{k} operoi oikealle ja sen hermiten konjugaatti \overleftarrow{k}' vasemmalle, ja missä $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$. $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$ on spinin vaihto-operaattori, missä $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ σ_i :n ollessa Paulin spin-matriiseja, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ on kahden hiukkasen välinen suhteellinen etäisyys ja $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ kahden hiukkasen massakeskipiste.

Toinen tapa perustella $\mathcal{E}_{\text{Sk}}[\rho]$:n muotoa on rakentaa se muodostamalla kaikki mahdolliset bilineaariset kombinaatiot lokaaleista tiheyksistä ja virroista toisen asteen derivaattoihin asti siten, että muodostettavat termit ovat invariantteja pariteetin, ajan käännön, pyörimisen, liikkeen ja isospinin muunnosten suhteen [22, 28]. Näin muodostettu potentiaalienergian tiheysfunktioaali on käytännössä sama kuin pseu-

dovuorovaikutuksesta (35) odotusarvona muodostettava funktionaalikin (36). Näin Skyrme-potentiaalienergiafunktionaaliksi tulee [28, 41]

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{\text{Sk}}[\rho] = \int d^3r \sum_{t=0,1} \left\{ & C_t^{\rho\rho} \rho_t \rho_t + C_t^{\rho\Delta\rho} \rho_t \Delta\rho_t + C_t^{\rho\tau} (\rho_t \tau_t - \mathbf{J}_t \cdot \mathbf{J}_t) \right. \\
& + C_t^{ss} \mathbf{s}_t \cdot \mathbf{s}_t + C_t^{s\Delta s} \mathbf{s}_t \cdot \Delta\mathbf{s}_t + C_t^{\rho\nabla J} (\rho_t \nabla \cdot \mathbf{J}_t + \mathbf{j}_t \cdot \nabla \times \mathbf{s}_t) \\
& + C_t^{s\nabla s} (\nabla \cdot \mathbf{s}_t)^2 + C_t^{JJ} \left(\sum_{\mu\nu} \mathbf{J}_{\mu\nu}^t \mathbf{J}_{t,\mu\nu} - \mathbf{s}_t \mathbf{T}_t \right) \\
& \left. + C_t^{J\bar{J}} \left[\left(\sum_{\mu} \mathbf{J}_{t,\mu\mu} \right) \left(\sum_{\mu} \mathbf{J}_{t,\mu\mu} \right) + \sum_{\mu\nu} \mathbf{J}_{t,\mu\nu} \mathbf{J}_{t,\nu\mu} - 2\mathbf{s}_t \cdot \mathbf{F}_t \right] \right\}, \tag{40}
\end{aligned}$$

missä tiheyksien paikkariippuvuudet on jätetty implisiittisiksi merkintöjen keventämiseksi. Yhtälön (40) kytkentävakioiden $C_t^{uu'}$ ja yhtälöiden (37)–(39) parametrien (t_i, x_i) välillä on vastaavuus [22, 28]. Lisäksi kaikki yhtälön (40) kytkentävakiot voidaan asettaa riippumaan tiheydestä, mutta yleinen valinta on, että vain $C_t^{\rho\rho}$ ja C_t^{ss} riippuvat ollen [42]

$$\begin{aligned}
C_t^{\rho\rho}[\rho_0] &= C_t^{\rho\rho}[0] + C_{tD}^{\rho\rho} (\rho_0(\mathbf{r}))^\alpha, \\
C_t^{ss}[\rho_0] &= C_t^{ss}[0] + C_{tD}^{ss} (\rho_0(\mathbf{r}))^\alpha,
\end{aligned}$$

Yhtälössä (40) indeksi t puolestaan viittaa tiheyksien isoskalaari ($t = 0$) ja isovektori ($t = 1$) luonteisiin, jotka esimerkiksi lokaalille tiheydelle ovat

$$\begin{aligned}
\rho_0 &= \rho_n + \rho_p, \\
\rho_1 &= \rho_n - \rho_p,
\end{aligned}$$

missä indeksit n ja p tarkoittavat neutronia ja protonia. Muutkin yhtälön (40) termit ovat tiheyksiä isoskalaari ja isovektori luonteen suhteen, mistä \mathbf{s} on spin-tiheys sekä τ kineettinen, \mathbf{j} virran ja \mathbf{J} spin-virran tiheys. Lisäksi \mathbf{T} on spin-kineettinen tiheys ja \mathbf{F} kineettinen-spin-tiheys-tensori. Näiden tiheyksien tarkemmat määritelmät

ovat [28, 41]

$$\begin{aligned}\rho_t(\mathbf{r}) &\equiv \rho_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}, & \mathbf{j}_t(\mathbf{r}) &\equiv -\frac{i}{2}(\nabla - \nabla')\rho_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}, \\ \mathbf{s}_t(\mathbf{r}) &\equiv \mathbf{s}_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}, & \mathbf{T}_{t,\mu}(\mathbf{r}) &\equiv \nabla \cdot \nabla' s_{t,\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}, \\ \tau_t(\mathbf{r}) &\equiv \nabla \cdot \nabla' \rho_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}, & \mathbf{J}_{t,\mu\nu}(\mathbf{r}) &\equiv -\frac{i}{2}(\nabla_\mu - \nabla'_\mu) s_{t,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}\end{aligned}$$

ja

$$\mathbf{F}_{t,\mu}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2} \sum_\nu \left(\nabla_\mu \nabla'_\nu + \nabla'_\mu \nabla_\nu \right) s_{t,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

Ajasta riippumattomia parillisparillisia ytimiä tarkasteltaessa on Skyrme-energiatiheysfunktionaalissa (40) vain ajankäännön suhteen symmetrisistä (eng. *time-even*) tiheyksistä (ρ , τ , \mathbf{J}) muodostetut osat ytimen tilan määrittämiseen vaikuttavia [22].

Skyrme-vuorovaikutuksen \hat{v}_{Sk} parametreille (t_i , x_i), W_0 , t_e , t_o ja α , ja toisaalta siten energiafunktioalain (34) kytkentävakiolle $C_t^{uu'}$ on useita parametriseintoja. Yksinkertaistaen parametriseinnit saadaan sovittamalla energiafunktioalain ennusteet kokeelliseen dataan. Eri parametriseinnien erot muodostuvat käytetystä kokeellisesta datasta, mikä osaltaan vaikuttaa miten hyvin kukin parametriseinto soveltuu mihinkin tarkoitukseen, sekä siitä mitkä kytkentävakiot tai parametrit on asetettu sovitettaessa nolliksi [28].

2.4.2 Coulomb-energiafunktioalain

Yhtälön (34) Coulomb-termi \mathcal{E}_{Cou} kuvaa protonien sähköisestä varauksesta johtuvaa repulsiivoimaa. Tätä kuvaava voima ja potentiaali ovat hyvin tunnetut, potentiaali ollen [28]

$$\hat{V}_{\text{Cou}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Laskemalla Coulomb-potentiaalin odotusarvon HFB-tilan suhteen jakautuu ratkaisu Coulomb-energiafunktioalain suoraan (eng. *direct*) ja vaihto-osaan (eng. *exchange*) [28]

$$\mathcal{E}_{\text{Cou}} = \mathcal{E}_{\text{Cou}}^{\text{suora}} + \mathcal{E}_{\text{Cou}}^{\text{vaihto}}.$$

Suoraosa riippuu ytimen lokaalista varaustiheydestä [22]

$$\mathcal{E}_{\text{Cou}}^{\text{suora}} = \frac{e^2}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho_{\text{ch}}(\mathbf{r})\rho_{\text{ch}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (41)$$

ja vaihto-osa epälokaaleista varaustiheyksistä [28]

$$\mathcal{E}_{\text{Cou}}^{\text{vaihto}} = -\frac{1}{4} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \left[\frac{\rho_{\text{ch}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_{\text{ch}}(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\mathbf{s}_{\text{ch}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{s}_{\text{ch}}(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right]. \quad (42)$$

Huomioitavaa on, että yhtälöissä (41) ja (42) esiintyvät tiheydet ovat kaikista aiemmin esiintyneistä pistenukleonitiheyksistä poiketen ytimen varaustiheyksiä (eng. *charge*, *ch*). Laskennallisesti ytimen varaustiheys saadaan pisteprotoni- ja -neutronitiheyksistä täydentämällä (eng. *folding*) ne vastaavilla varausmuototekijöillä [22]. Tällä huomioidaan, että nukleonit eivät ole pistemäisiä ja siten myös neutronilla on varausjakauma, joka vaikuttaa varaustiheyteen. Usein kuitenkin täydentäminen jätetään tekemättä ja pistetiheyksiä vain kerrotaan sähkömagneettisella kytkentävakiolla e [28].

Yleensä laskuissa Coulomb-energiafunktioalan suoraosa lasketaan tarkasti yhtälön (41) mukaisesti tai sitä vastaten, mutta epälokaali vaihto-osa approksimoiden Slaterin approksimaatiolla. Tällöin se saadaan käsiteltyä lokaalina muotona [22, 28]

$$\mathcal{E}_{\text{Cou}}^{\text{vaihto, Slater}} = -\frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \int d^3\mathbf{r} \rho_{\text{ch}}^{4/3}(\mathbf{r}), \quad (43)$$

missä jälleen varaustiheyden sijaan saatetaan käyttää kytkentävakiolla kerrottua pisteprotonitiheyttä. Käyttämällä vaihto-osalle vain lokaalin tiheyden sisältävää Slaterin approksimaatiota (43) saadaan Coulomb-energiafunktioalan numeerisesti nopeammin laskettua. Lisäksi Coulomb-vuorovaikutukseenkin liittyy pariliitosvuorovaikutus, mutta se jätetään yleensä huomiotta [22].

2.4.3 Pariliitosenergiafunktioalan

Pariliitosenergiafunktioalan käyttö energiatiheysfunktioalan (34) ei ole lainkaan tarpeen, mikäli ei haluta käsitellä nukleonien välistä pariliitosvuorovaikutusta kuten HF-mallin tapauksessa on. HFB-viitekehysessä pariliitosvuorovaikutuksella on kuitenkin olennainen osuutensa kokonaisenergiaan (34) vaikkakin merkittävästi Skyrme-potentiaalia pienempi. Periaatteessa pariliitosenergiafunktioalan muodostamiseen tulisi käyttää samaa pseudovuorovaikutusta, kuin mistä Skyrme-potentiaalienergiafunktioalan muodostetaan molempien aiheutuessa vahvasta ydinvoimasta [28]. Suurimmassa osassa Skyrme-parametrisaatioita pariliitosenergiafunktioalan ei kuitenkaan ole johdettu samasta pseudovuorovaikutuksesta tai efektiivisestä Hamiltonista, kuin mistä Skyrme-potentiaali on, mikä tulee kera

hyvien ja huonojen puoliensa [28].

Skyrme-parametrissaatiassa usein käytetty muoto pariliitosfunktionaaliksi tulee vuorovaikutuksesta [22, 28]

$$V_{\text{pari}}^q(\mathbf{r}) = \sum_{q=n,p} \frac{V_0^q}{2} (1 - \hat{P}_\sigma) \left[1 - \beta \left(\frac{\rho_0(\mathbf{r})}{\rho_{\text{sat}}} \right)^\alpha \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (44)$$

missä V_0 kuvaa pariliitoksen voimakkuutta ja voidaan säätää kokeellisen datan mukaan, \hat{P}_σ on spinin vaihto-operaattori kuten edelläkin oli sekä ρ_{sat} on ytimen saturaatiotiheys ja $\rho_0(\mathbf{r})$ isokalaaritiheys. Lisäksi yleinen valinta on $\alpha = 1$ ja $\beta = \frac{1}{2}$, joista β määrittää onko pariliitosvuorovaikutus merkittävämpi ytimen pinnalla ($\beta = 1$), läpi koko ytimen ($\beta = 0$) vai sekoitus näitä ($\beta = \frac{1}{2}$). Pariliitosvuorovaikutusta (44) vastaavaksi pariliitosenergiafunktionaaliksi tulee [22, 28]

$$\mathcal{E}_{\text{pari}}[\rho, \kappa, \kappa^*] = \sum_{q=n,p} \int d^3\mathbf{r} \frac{V_0^q}{2} \left[1 - \beta \left(\frac{\rho_0(\mathbf{r})}{\rho_{\text{sat}}} \right)^\alpha \right] \tilde{\rho}_q^*(\mathbf{r}) \tilde{\rho}_q(\mathbf{r}), \quad (45)$$

missä

$$\tilde{\rho}_q(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} (-2\sigma) \kappa_q(\mathbf{r}, \sigma; \mathbf{r}, -\sigma),$$

joka on pariliitostiheys ollen pariliitostensoriin nähden hyödyllinen sen ollessa hermiittinen ja ajankääntösymmetrinen [28, 30].

2.5 Ydin ulkoisessa kentässä ja FAM-QRPA-menetelmä

Ytimen vastetta ulkoiseen sähkömagneettiseen kenttään ja siihen liittyviä viritystiloja voidaan tutkia yksihiukkasvuorovaikutukset huomioivalla satunnaisen vaiheen approksimaatiolla (eng. *random phase approximation*, RPA) tai lisäksi pariliitosvuorovaikutuksen huomioivissa tilanteissa sen kvasihiukkaslaajennuksella eli QRPA:lla [2]. Molemmista näistä teorioista ja varsinkin QRPA:ssa deformatuneen avoin kuorisen ytimen tapauksessa päädytään hyvin suuri-dimensioiseen matriisiyhtälöön [2, 43]

$$\left[\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} - \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} X(\omega) \\ Y(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F^{20} \\ F^{02} \end{pmatrix}, \quad (46)$$

missä elementtien A ja B dimensio määräytyy HFB-mallin mukaisesti kaikista mahdollisista kaksikvasihiukkasviritystiloista [43]. Suuren dimensionsa vuoksi jo yhtälön

(46) matriisielementtien laskeminen tietokoneellakin on työlästä vaatien paljon muistia sekä erityisesti diagonalisointi paljon laskenta-aikaa. Näitä ongelmia voidaan kuitenkin välttää soveltamalla FAM-menetelmää (Q)RPA-teoriaan, jolloin laskennallisesti yhtälöä (46) vastaava lasku voidaan tehdä pienenä lisäyksenä staattisen HF(B)-ratkaisun päälle.

Alunperin FAM-menetelmä esiteltiin RPA-ongelman ratkaisemiseksi staattisen HF-ratkaisun päälle tehtynä lisäyksenä [44] ja myöhemmin se sai kvasihiukkaslaajennuksensa QRPA-ongelman ratkaisemiseksi [43]. FAM-menetelmässä ratkaistaan täysin vastaavaa yhtälöä kuin (Q)RPA-menetelmässäkin, mutta siinä sitä ei kirjoiteta matriisimuotoon, eikä tiettyjä osia ekspansoida eksplisiittisesti, vaan ne saadaan laskettua tunnetuista staattisista HF- tai HFB-ratkaisuista [43, 44]. Tästedes kutsum QRPA-teoriaan sovellettua FAM-menetelmää FAM-QRPA-menetelmäksi. Ennen FAM-QRPA-menetelmän tarkempaa esittelyä näytän määritelmät ulkoisille sähköiselle ja magneettiselle kentälle, johon ydin tässä tutkielmassa laskennallisesti asetetaan. Tämän jälkeen esittelen FAM-QRPA-yhtälöiden johtamisen lineaarisen vasteen pienen amplitudin tavalla, jolla myös QRPA-yhtälöt saisi johdettua, sekä FAM-QRPA-yhtälöiden ratkaisemisen mielivaltaisen aksiaalisymmetrisen ytimen tapauksessa. Lopuksi esittelen FAM-QRPA-tuloksista laskettavan siirtymävoimakkuusfunktion ja fotoabsorbtiovaikutusalan.

2.5.1 Ulkoinen kenttä

Ajasta riippuva sähkömagneettinen kenttä, jota tässä tutkielmassa tarkastellaan lineaarisena häiriökenttänä voidaan kuvata ekspansiona yhtälöllä [28, 43]

$$F(t) = \eta \left\{ F(\omega) e^{-i\omega t} + F^\dagger(\omega) e^{i\omega t} \right\}, \quad (47)$$

missä η on pieni, mutta äärellinen vakio pitäen huolen häiriön amplitudin pienuudesta. Kentän pienuus ja siten η eivät ole välttämättömiä vaatimuksia, mutta tässä tutkielmassa keskitytään vain pieniamplitudisen kentän ytimeen aiheuttamaan pieneen häiriöön. Puolestaan $F(\omega)$ on tyypillinen Fock-avaruuden yksihiukkasoperaattori,

joka esitetään muodossa [43]

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu}(\omega) c_\mu^\dagger c_\nu \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^\dagger & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(\omega) & 0 \\ 0 & -f^T(\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (48)$$

missä $f(\omega)$ tämän tutkielman osalta on joko sähköisen tai magneettisen dipoliooperaattorin matriisielementti ytimen yksihiukkastilojen välillä $f_{\mu\nu} = \langle \mu | \hat{F} | \nu \rangle$.

Ytimen sähköisiin isovektori dipolisiirtymiin ($E1$) liittyvä matriisielementti voidaan esittää paikka-avaruudessa muodossa [24]

$$f_{1K}^{E,IV} = \sum_{i=1}^A e_{\tau_i}^{IV} \tau_i r Y_{1K}(\hat{\mathbf{r}}_i), \quad (49)$$

missä $e_{\tau_i}^{IV}$ on efektiivinen isovektorivaraus sekä $\tau_i = +1(-1)$ neutroneille (protoneille). Lisäksi Y_{1K} :t ovat palloharmonisia funktioita ja $K = 0, \pm 1$ on magneettinen kvanttiluku. Puolestaan magneettisille dipolisiirtymille ($M1$) matriisielementti koordinaattiavaruudessa esitettynä on [2, 45]

$$f_{1K}^M = \mu_N \sum_{i=1}^A \left(g_s^{(i)} \mathbf{s}^i + g_l^{(i)} \mathbf{l}^i \right) \cdot \nabla_i \left(r_i Y_{1K}(\hat{\mathbf{r}}_i) \right) \quad (50)$$

missä μ_N on ydinmagnetonin ja g_s ja g_l ovat gyromagneettisia vakioita, jotka saavat eri arvot protoneille ja neutroneille.

Käyttämällä esitystä (12) Bogoliubov-muunnokselle saadaan yhtälön (48) $F(\omega)$ ilmaistua kvasihiukkasoperaattoreilla matriisi muodossa

$$F(\omega) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \beta^\dagger & \beta \end{pmatrix} W^\dagger \begin{pmatrix} f(\omega) & 0 \\ 0 & -f^T(\omega) \end{pmatrix} W \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix}, \quad (51)$$

josta määritellään [43]

$$\begin{pmatrix} F^{11}(\omega) & F^{20}(\omega) \\ -F^{02}(\omega) & -F^{11T}(\omega) \end{pmatrix} = W^\dagger \begin{pmatrix} f(\omega) & 0 \\ 0 & -f^T(\omega) \end{pmatrix} W. \quad (52)$$

Yhtälön (52) määritelmillä $F(\omega)$:ksi saadaan muodoltaan täysin vastaava lauseke kvasihiukkaskannassa esitettyyn Hamiltonin operaattoriin (23) nähden, joskin ilman

\hat{H}_{int} -termiä vastaavaa osaa. Esitän tässä kohtaa kuitenkin tämän kvasihiukkasin ilmaistun operaattorimuodon muodostumisen, joka on

$$\begin{aligned}
F(\omega) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \beta^\dagger & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F^{11}(\omega) & F^{20}(\omega) \\ -F^{02}(\omega) & -F^{11T}(\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left\{ F_{\mu\nu}^{11}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu + F_{\mu\nu}^{20}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu^\dagger - F_{\mu\nu}^{02}(\omega) \underbrace{\beta_\mu \beta_\nu}_{=-\beta_\nu \beta_\mu} - F_{\nu\mu}^{11}(\omega) \underbrace{\beta_\mu \beta_\nu^\dagger}_{=\delta_{\mu\nu} - \beta_\nu^\dagger \beta_\mu} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left\{ F_{\mu\nu}^{11}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu + F_{\mu\nu}^{20}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu^\dagger + F_{\mu\nu}^{02}(\omega) \beta_\nu \beta_\mu + \underbrace{F_{\nu\mu}^{11}(\omega) \beta_\nu^\dagger \beta_\mu}_{=F_{\mu\nu}^{11}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu} \right\} - \frac{1}{2} \sum_{\mu} \underbrace{F_{\mu\mu}^{11}(\omega)}_{\equiv F^{00}(\omega)} \\
&= F^{00}(\omega) + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left\{ F_{\mu\nu}^{20}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu^\dagger + F_{\mu\nu}^{02}(\omega) \beta_\nu \beta_\mu \right\} + \sum_{\mu\nu} F_{\mu\nu}^{11}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu.
\end{aligned} \tag{53}$$

Määritelmässä (53) olennaisiksi termeiksi seuraavaksi esitettävässä FAM-QRPA-menetelmässä osoittautuvat vain $F_{\mu\nu}^{20}(\omega)$ ja $F_{\mu\nu}^{02}(\omega)$, mutta pidän ne silti selvyuden vuoksi esillä alkuperäisestä [43] FAM-QRPA-menetelmän esityksestä poiketen.

2.5.2 FAM-QRPA-yhtälöt

FAM-QRPA-yhtälöt voi johtaa esimerkiksi suoraan liikeyhtälöistä tai lineaarisen vasteen teorialla [28], joista jälkimmäiseen esitykseni perustuu. Seuraava FAM-QRPA-yhtälöiden johto on pääpiirteissään alkuperäisen esityksen [43] mukainen siten, että tähän osioon olen kerännyt johdon olennaisimmat lähtökohdat sekä keskeisimmät tuloksen eli FAM-QRPA-yhtälöt. Lisäksi liitteessä A olen esittänyt johtoon liittyviä yksityiskohtia.

Ottamalla FAM-QRPA-yhtälöiden johtamisen lähtökohdaksi ajasta riippumattoman HFB-yhtälön ratkaisun voidaan kvasihiukkasille antaa aikariippuvuus esittämällä niiden operaattorit aikariippuvina. Ajasta riippuvan kvasihiukkasoperaattorin aikariippuvuus on kerroinmatriiseissa U ja V , joten ajasta riippuvaksi kvasihiukkasluontioperaattoriksi tulee [43]

$$\beta_k^\dagger(t) = \sum_l \left\{ U_{lk}(t) c_l^\dagger + V_{lk}(t) c_l \right\}. \tag{54}$$

Ajasta riippuvan kvasihiukkasoperaattorin aikakehitys, kun se on ulkoisessa yksihiukkahäiriökentässä (eng. *one-body perturbation field*), saadaan ajasta riippuvasta

HFB-yhtälöstä eli kvasihiukkasen likeyhtälöstä [43]

$$i\frac{\partial\beta_k(t)}{\partial t} = [H(t) + F(t), \beta_k(t)], \quad (55)$$

missä $H(t)$ on ajasta riippuva Hamiltonin operaattori ja $F(t)$ yhtälön (47) mukainen ulkoinen kenttä. Lisäksi yhtälössä (55) ja jatkossakin käytetään yksikkövalintaa $\hbar = 1$, mihin liittyen on hyvä huomata, että taajuudella ω ja energialla on sama yksikkö eli ulkoisen kentän taajuus rinnastuu suoraan sen energiaksi. Yhtälöstä (55) FAM-QRPA-yhtälöiden johtaminen on melko suoraviivaista, kun $F(t)$, $H(t)$ ja $\beta_k(t)$ on määritelty ja sopivassa muodossa esitetty.

Ulkoinen kenttä $F(t)$ ei ole välttämätön aikariippuvuuden tuomiseksi HFB-yhtälöiden mukaiseen ratkaisuun. Tässä tapauksessa sen voi kuitenkin sanoa aiheuttavan systeemin aikariippuvuuden värähtelynä tasapainoaseman ympärillä, joten se olennaisesti määrittää myös $H(t)$:ta ja $\beta_k(t)$:ta. Ulkoisen kentän, häiriön, ollessa harmoninen [28] ja taajuuden ω , voidaan se esittää lausekkeen (47) mukaisesti. Ulkoisen kentän aiheuttama värähtely ytimelle lasketun HFB-perustilan ympärillä tapahtuu kentän kanssa samalla taajuudella ω siten, että Hamiltonin operaattori voidaan esittää muodossa [43]

$$H(t) = H_0 + \delta H(t). \quad (56)$$

Tässä H_0 on staattisen HFB-yhtälön ratkaisu yhtälön (28) mukaisesti ja $\delta H(t)$ on kentän Hamiltoniin aiheuttama häiriö, joka voidaan ulkoisen kentän tavoin ekspansoida muotoon

$$\delta H(t) = \eta \left\{ \delta H(\omega) e^{-i\omega t} + \delta H^\dagger(\omega) e^{i\omega t} \right\}, \quad (57)$$

missä $\delta H(\omega)$ yksihiukkas-hävitys- ja luontiooperaattorien sekä kvasiyksihiukkas-hamiltonin ja pariliitospotentiaalin avulla matriisimuodossa ilmaistuna on [43]

$$\delta H(\omega) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^\dagger & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta h(\omega) & \delta \Delta^{(+)}(\omega) \\ -\delta \Delta^{(-)*}(\omega) & -\delta h^T(\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Hyödyntämällä jälleen esitystä (12) Bogoliubov-muunnokselle, kuten kentällekin

tehtiin, saadaan Hamiltonin häiriö (58) ilmaistua kvasihiukkasoperaattoreilla

$$\delta H(\omega) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \beta^\dagger & \beta \end{pmatrix} W^\dagger \begin{pmatrix} \delta h(\omega) & \delta \Delta^{(+)}(\omega) \\ -\delta \Delta^{(-)*}(\omega) & -\delta h^T(\omega) \end{pmatrix} W \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix}, \quad (59)$$

mistä ulkoista kenttää vastaten määritellään

$$\begin{pmatrix} \delta H^{11}(\omega) & \delta H^{20}(\omega) \\ -\delta H^{02}(\omega) & -(\delta H^{11})^T(\omega) \end{pmatrix} = W^\dagger \begin{pmatrix} \delta h(\omega) & \delta \Delta^{(+)}(\omega) \\ -\delta \Delta^{(-)*}(\omega) & -\delta h^T(\omega) \end{pmatrix} W. \quad (60)$$

Sijoittamalla nyt määritelmä (60) yhtälöön (59) saadaan täysin häiriökentän määrittelyä (53) vastaten Hamiltonin häiriöksi

$$\delta H(\omega) = \delta H^{00}(\omega) + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left\{ \delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu^\dagger + \delta H_{\mu\nu}^{02}(\omega) \beta_\nu \beta_\mu \right\} + \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{11}(\omega) \beta_\mu^\dagger \beta_\nu. \quad (61)$$

Pienessä värähtelyssä voidaan kvasihiukkasoperaattoritkin jakaa ytimen perustilaa kuvaavaan HFB-tilaa vastaavaan osaan ja sen ympärillä tapahtuvaan värähtelyyn [43]

$$\beta_k(t) = \left\{ \beta_k + \delta \beta_k(t) \right\} e^{iE_k t}, \quad (62)$$

missä värähtelyyn liitettävä osa $\delta \beta(t)$ jälleen ekspansoidaan siten, että [43]

$$\delta \beta_k(t) = \eta \sum_{\mu} \beta_\mu^\dagger \left\{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \right\}, \quad (63)$$

missä merkille pantavaa on ekspansointi vain kvasihiukkasluontiooperaattorien suhteen, sillä muuten kyseessä olisi vain muunnos kvasihiukkasista kvasihiukkasiin. Lisäksi yhtälön eteen- ja taaksepäin FAM-QRPA-amplitudien X ja Y täytyy olla antisymmetrisiä fermionisten antikommutaatiorelaatioiden toteutumiseksi [43].

Nyt kun $H(t)$, $F(t)$, ja $\beta_k(t)$ ovat hyvin ja sopivasti määritelty, voidaan ne sijoittaa ajasta riippuvaan HFB-yhtälöön (55) ja johtaa FAM-QRPA-yhtälöt. Määritelyjen operaattorien sijoittamisen yhtälöön (55) ja siitä seuraavan muodon ajasta riippuvan HFB-yhtälön muodostumiseksi olen esittänyt yksityiskohtaisesti liitteessä A. Sijoittamisen ja yhtälön sieventämisen jälkeen ajasta riippuvaksi HFB-yhtälöksi saadaan

$$i \frac{\partial \delta \beta_k(t)}{\partial t} = E_k \left(\beta_k + \delta \beta_k(t) \right) + \left[H_0, \delta \beta_k(t) \right] + \left[H_0 + \delta H(t) + F(t), \beta_k \right]. \quad (64)$$

Hieman tätä yhtälöä (64) manipuloimalla ja olennaisesti ottamalla siitä odotusarvo ajasta riippumattoman HFB-tilan suhteen, minkä yksityiskohdat myös olen esittänyt liitteessä A, saadaan FAM-QRPA-yhtälöiksi [43]

$$\begin{aligned} (E_k + E_l - \omega)X_{lk}(\omega) + \delta H_{lk}^{20}(\omega) &= -F_{lk}^{20}(\omega) \\ (E_k + E_l + \omega)Y_{lk}(\omega) + \delta H_{lk}^{02}(\omega) &= -F_{lk}^{02}(\omega). \end{aligned} \quad (65)$$

FAM-QRPA-yhtälöt (65) muodostavat epälineaarisen yhtälöryhmän, joka kuvaa ytimen lineaarista vastetta ulkoiseen häiriökenttään ja siten myös ytimen viritystiloja. FAM-QRPA-yhtälö (65) täytyy epälineaarisuudesta johtuen ratkaista iteratiivisesti perusidealtaan melko vastaavasti HFB-yhtälöiden ratkaisemiseen verrattuna.

2.5.3 FAM-QRPA-yhtälöiden ratkaiseminen

FAM-QRPA-yhtälöt (65) ratkaistaan erikseen kullekin valitulle viritysenergialle ω , jolle yhtälöitä ratkaistaessa voidaan [43] antaa kompleksinen osa $\omega \rightarrow \omega = \omega_0 + i\gamma$, missä γ on levittäytymisleveys (eng. *smearing width*), joka on liitettävissä siirtymävoimakkuusfunktion tai fotoabsorptiovaikutusalojen Lorentz-jakauman leveyteen. FAM-QRPA-yhtälöistä saadaan ratkaistua FAM-QRPA-amplitudit

$$X_{lk}(\omega) = -\frac{\delta H_{lk}^{20}(\omega) + F_{lk}^{20}(\omega)}{E_k + E_l - \omega}, \quad (66)$$

$$Y_{lk}(\omega) = -\frac{\delta H_{lk}^{02}(\omega) + F_{lk}^{02}(\omega)}{E_k + E_l + \omega}. \quad (67)$$

E_k ja E_l ovat energiatiloja, jotka saadaan HFB-ratkaisusta sekä ω on valittu viritysenergia. Ulkoiseen kenttään liittyviksi $F_{lk}^{20}(\omega)$:ksi ja $F_{lk}^{02}(\omega)$:ksi saadaan luettua yhtälöstä (52)

$$F_{lk}^{20}(\omega) = \{U^\dagger f(\omega)V^* - V^\dagger f^T(\omega)U^*\}_{lk}, \quad (68)$$

$$F_{lk}^{02}(\omega) = \{U^T f^T(\omega)V - V^T f(\omega)U\}_{lk}, \quad (69)$$

eli ne saadaan laskettua staattista HFB-ratkaisua sekä kentän f määritelmiä (49) ja (50) käyttäen. Lisäksi $\delta H_{lk}^{20}(\omega)$:lle ja $\delta H_{lk}^{02}(\omega)$:lle lausekkeet saadaan luettua yhtälöstä (60) niiksi tullen

$$\delta H_{lk}^{20}(\omega) = \{U^\dagger \delta h(\omega)V^* - V^\dagger \delta \Delta^{(-)*}(\omega)V^* + U^\dagger \delta \Delta^{(+)}(\omega)U^* - V^\dagger \delta h^T(\omega)U^*\}_{lk}, \quad (70)$$

$$\delta H_{lk}^{02}(\omega) = \{-V^T \delta h(\omega) U + U^T \delta \Delta^{(-)*}(\omega) U - V^T \delta \Delta^{(+)}(\omega) V - U^T \delta h^T(\omega) V\}_{lk}, \quad (71)$$

joissa U ja V ovat tiedetyt staattiset HFB-kerroinmatriisit. Tämän lisäksi $\delta H_{lk}^{20}(\omega)$ ja $\delta H_{lk}^{02}(\omega)$ kuitenkin riippuvat ulkoisen kentän aiheuttamista indusoiduista värähtelyistä $\delta h(\omega)$, $\delta \Delta^{(+)}(\omega)$ ja $\delta \Delta^{(-)}(\omega)$ staattisten kvasiyksihiukkashamiltonin ja pariliitospotentiaalin ympärillä. FAM-QRPA-amplitudien X ja Y laskemiseksi on siis vielä määritettävä miten $\delta h(\omega)$, $\delta \Delta^{(+)}(\omega)$ ja $\delta \Delta^{(-)}(\omega)$ lasketaan.

Indusoituneet kentät, niiden värähtely, voidaan laskea joko HFB-aaltofunktioiden kerroinmatriiseista U ja V tai tiheyksistä ρ ja κ [43], joista seuraavaksi esitän ratkaisun tiheyksiä käyttäen. FAM-QRPA-menetelmässä pienen lineaarisen värähtelyn myötä indusoituneet kentät saadaan lausekkeista [43]

$$\delta h(\omega) = \frac{h[\rho_\eta, \kappa_\eta^{(+)}, \kappa_\eta^{(-)*}] - h[\rho_0, \kappa_0, \kappa_0^*]}{\eta}, \quad (72)$$

$$\delta \Delta^{(+)}(\omega) = \frac{\Delta[\rho_\eta, \kappa_\eta^{(+)}, \kappa_\eta^{(-)*}] - \Delta[\rho_0, \kappa_0, \kappa_0^*]}{\eta}, \quad (73)$$

ja

$$\delta \Delta^{(-)}(\omega) = \frac{\Delta[\rho_\eta^\dagger, \kappa_\eta^{(-)}, \kappa_\eta^{(+)*}] - \Delta[\rho_0, \kappa_0, \kappa_0^*]}{\eta}, \quad (74)$$

joissa η :n lineaarista korkeammat termit on jätetty huomiotta. Yhtälöissä (72)–(74) tiheydet ρ_0 , κ_0 ja κ_0^* viittaavat staattisen HFB-ratkaisun mukaisiin tiheyksiin ja niistä riippuvat kentät h ja Δ ovat siten staattisen ratkaisun mukaiset kentät. Puolestaan tiheyksiä ρ_η , $\kappa_\eta^{(+)}$ ja $\kappa_\eta^{(-)}$ voi kutsua FAM-QRPA-tiheyksiksi ja ne viittaavat pienen värähtelyn mukaisiin tiheyksiin staattisen ratkaisun ympärillä ollen staattisen ratkaisun mukaisen kentän ja siihen aiheutuneen muutoksen summa. Yhtälöin ilmaistuna tiheydet ρ_η , $\kappa_\eta^{(+)}$ ja $\kappa_\eta^{(-)}$ ovat [24, 43]

$$\begin{aligned} \rho_\eta &= \rho_0 + \eta \delta \rho(\omega) \\ &= V^* V^T + \eta (U X V^T + V^* Y^T U^\dagger), \end{aligned} \quad (75)$$

$$\begin{aligned} \kappa_\eta^{(+)} &= \kappa_0 + \eta \delta \kappa^{(+)}(\omega) \\ &= -V^* U^T + \eta (U X U^T + V^* Y^T V^\dagger) \end{aligned} \quad (76)$$

ja

$$\begin{aligned}\kappa_\eta^{(-)} &= \kappa_0 + \eta\delta\kappa^{(-)}(\omega) \\ &= -V^*U^T + \eta(V^*X^\dagger V^\dagger + UY^*U^T),\end{aligned}\tag{77}$$

joiden muodon olen perustellut tarkemmin liitteessä B.

Kun halutaan laskea FAM-QRPA-yhtälöistä ratkaisuja tilanteelle, jossa kentän magneettinen kvanttiluku ei ole nolla ($K \neq 0$), täytyy yhtälöiden (72)–(74) kentät h ja Δ linearisoida eksplisiittisesti, jottei eri K :n arvoja vastaavat tiheydet sekoitu [24]. Tällöin indusoituneeksi kvasiyksihiukkashamiltoniksi tulee [24]

$$\begin{aligned}\delta h(\omega) &= \frac{h[\rho_\eta, \kappa_\eta^{(+)}, \kappa_\eta^{(-)*}] - h[\rho_0, \kappa_0, \kappa_0^*]}{\eta} \\ &= \frac{h[\rho_0 + \eta\delta\rho(\omega), \kappa_0 + \eta\delta\kappa^{(+)}(\omega), \kappa_0^* + \eta\delta\kappa^{(-)*}(\omega)] - h[\rho_0, \kappa_0, \kappa_0^*]}{\eta} \\ &= \frac{h[\rho_0, \kappa_0, \kappa_0^*] + \eta h[\delta\rho(\omega), \delta\kappa^{(+)}(\omega), \delta\kappa^{(-)*}(\omega)] - h[\rho_0, \kappa_0, \kappa_0^*]}{\eta} \\ &= h[\delta\rho(\omega), \delta\kappa^{(+)}(\omega), \delta\kappa^{(-)*}(\omega)].\end{aligned}\tag{78}$$

Vastaavasti indusoituneet pariliitospotentiaalit ovat

$$\delta\Delta^{(+)}(\omega) = \Delta[\delta\rho(\omega), \delta\kappa^{(+)}(\omega)]\tag{79}$$

ja

$$\delta\Delta^{(-)}(\omega) = \Delta[\delta\rho^\dagger(\omega), \delta\kappa^{(-)}(\omega)].\tag{80}$$

Yhtälöiden (78)–(80) määritelmiä käyttäen saadaan nyt yhtälöiden (70) ja (71) mukaiset $\delta H_{lk}^{20}(\omega)$ ja $\delta H_{lk}^{02}(\omega)$ laskettua, joten kaikki FAM-QRPA-amplitudien laskemiseen lausekkeissa (66) ja (67) vaadittu on nyt määriteltynä.

FAM-QRPA-yhtälöiden riippuessa ratkaisusta itsestään muodostavat ne epälineaarisen yhtälöryhmän. Tämä on ratkaistava HFB-yhtälöitä vastaten iteratiivisesti, joskaan nyt ratkaisua ei tehdä matriisimuodossa diagonalisointineen. Käytännössä FAM-QRPA-yhtälöt (65) voidaan ratkaista ottamalla alkuarvaukset FAM-QRPA-amplitudeiksi X ja Y , joiden perusteella indusoituneet kentät, ja siten δH^{20} ja δH^{02} lasketaan [43]. Tämän jälkeen ratkaistaan FAM-QRPA-yhtälöistä (66) ja (67) seuraavat arvot X :lle ja Y :lle. Tätä iteraatiosykliä jatketaan, kunnes valittu konvergoitumisehto täyttyy. HFB-yhtälöiden iteratiivista ratkaisua vastaten myös

FAM-QRPA-yhtälöiden ratkaisun konvergoitumista voidaan parantaa esimerkiksi Broydenin menetelmällä [35].

2.5.4 Siirtymävoimakkuus ja fotoabsorbtiovaikutusala

FAM-QRPA-laskun tuloksena saaduista FAM-QRPA-amplitudeista voidaan laskea ulkoisen kentän energiaa, ja siten ytimen viritysentergiaa vastaava siirtymävoimakkuus. Suorittamalla FAM-QRPA-laskut usealle viritysenterialle muodostuu lasketuista siirtymävoimakkuuden arvoista jatkuvana jakaumana näyttäytyvä siirtymävoimakkuusfunktio. Siirtymävoimakkuuden lausekkeen muodostamiseen ja erityisesti miten se FAM-(Q)RPA-tapauksessa lasketaan voi tutustua tarkemmin FAM-RPA-menetelmän esityksen alkuperäisestä lähteestä [44]. FAM-QRPA-tapauksessa siirtymävoimakkuuden lausekkeeksi tulee [24, 43, 44]

$$\begin{aligned} \frac{dB(\omega, \hat{F})}{d\omega} &= \sum_n |\langle \Phi_n | \hat{F}(\omega) | \Phi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - E_n) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{ImTr} \left[f(\omega) (UXV^T + V^*Y^TU^\dagger) \right], \end{aligned} \quad (81)$$

missä Φ_n on HFB-ratkaisun viritystila kuvaten ytimen viritystilaa viritysenterialla E_n . Vastaavasti Φ_0 kuvaa perustilaa, johon liittyvä energia on oletettu nolllaksi ($E_0 = 0$). Lausekkeen (81) ylemmän rivin odotusarvojen, jotka voidaan tulkita matriisielementteinä, neliöt kuvaavat käytännössä viritystilan Φ_n herkkyyttä virittyä perustilasta tai purkautua perustilaan kenttää kuvaavaan operaattoriin $\hat{F}(\omega)$ liittyen lausekkeen huomioidessa summaamalla ja Kroneckerin deltalla siirtymävoimakkuuteen kaikki energiaa ω vastaavat viritystilat. Alemman rivin yhtäsuuruus puolestaan kertoo, miten laskuteknisesti siirtymävoimakkuus FAM-QRPA-yhtälöiden ratkaisusta lasketaan.

Matriisimuotoisen QRPA-menetelmän (46) ratkaisuna saataisiin ominaistilat ja -arvot eli QRPA-amplitudit ja ominaisenergiat muodostaen ominaistiloille diskreetin jakauman, jota vastaten voidaan laskea ominaisenergioita vastaavat siirtymävoimakkuudet. Puolestaan FAM-QRPA-menetelmässä lasketaan siirtymävoimakkuus valitulle kompleksiselle energialle ($\omega = \omega_0 + i\gamma$), mistä saadaan valittua energiaa vastaava jakauma, jonka keskikohta on ω_0 jakauman leveyden määrittäessä energian kompleksiosasta γ , joka vaikuttaa myös jakauman korkeuteen eli saatavaan siirtymävoimakkuuden suuruuteen. Näin laskemalla FAM-QRPA-menetelmällä useita

siirtymävoimakkuuden arvoja lähekkäisillä energioilla ω_0 muodostuu niistä jatkuva siirtymävoimakkuusfunktio.

Periaatteessa matriisimuotoisen QRPA-menetelmän ratkaisujen ja siten niistä saatavien siirtymävoimakkuusarvojen ollessa todellisia ytimiä vastaten diskreettejä voisi sitä pitää FAM-QRPA-menetelmää tarkempana tapana ytimen siirtymävoimakkuuksien määrittämiseksi. Pienillä viritysenenergioilla ytimen tilatiheyden ollessa pieni diskreettien tilojen tietäminen onkin olennaista, mutta suuremmilla energioilla ytimien tilatiheyden ollessa tyypillisesti suuri, ylittävät ne kokeellisten mittausten erottelukyvyn tuottaen kokeellisissakin mittauksissa jatkuvana jakaumana näyttäytyvän siirtymävoimakkuusfunktion, jota voidaan siten pitää hyvin FAM-QRPA-menetelmällä saatavaan verrattavana. Tämän lisäksi FAM-QRPA-menetelmä ei matalillakaan energioilla käyttökelpoisuuttaan menetä, sillä sen antamista tuloksista on mahdollista laskea [46] kompleksitason polkuintegraalimenetelmillä diskreetit matriisimuotoista QRPA-menetelmää vastaavat ratkaisut, mutta tässä tutkielmassa tarkastellaan vain FAM-QRPA-ratkaisuja sekä yhtälön (81) mukaisia siirtymävoimakkuuksia.

FAM-QRPA:n mukaisesta siirtymävoimakkuudesta voidaan laskea kutakin energiaa vastaava fotoabsorbtiivaikutusala $\sigma_{\text{abs}}(\omega)$. Fotoabsorbtiivaikutusalan suuruuden määrää kaikkien sähköisten ja magneettisten multipolien summa, mutta tyypillisesti sähköisiin dipolisiirtymiin verrattuna muiden vaikutus on merkittävästi pienempi. Näin ollen fotoabsorbtiivaikutusaloja voikin olla järkevää laskea ja tarkastella erikseen eri sähköisille ja magneettisille multipoleille. Tässä tutkielmassa keskityessani fotoabsorbtiivaikutusalojen osalta vain $E1$ -siirtymien vaikutukseen voidaan fotoabsorbtiivaikutusala laskea lausekkeella [2, 47]

$$\sigma_{\text{abs}}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\hbar c} \omega \sum_{K=0,\pm 1} \frac{dB(\omega, \hat{F}_{E1}(K))}{d\omega}, \quad (82)$$

jossa ulkoisen kentän \hat{F}_{E1} alaindeksi viittaa vain sähköisten dipolisiirtymien, $E1$, huomiointiin. Lisäksi vaikutusalaan summataan lausekkeen (82) mukaisesti ulkoisen kentän eri magneettisiin kvanttilukuihin K liittyvät siirtymävoimakkuudet. Lausekkeen (82) muotoa fotoabsorbtiivaikutusosalalle ja siten se käytettävyyttä ytimen ja sähköisen kentän välisen vuorovaikutuksen kuvaamiseen voidaan perustella Siegertin teoreemalla [48], jonka mukaisesti nyt ytimen ja sähkömagneettisen kentän välistä vuorovaikutusta voidaan approksimoiden käsitellä huomioimalla (varaus)tiheyden, ja siten oleellisesti sähköisen dipolimomentin, virrantiheyksien sijaan. Tämä approksi-

maatio on käytävissä nukleonien epärelativistisella ja kentän ytimen kokoon nähden pitkän aallonpituuden rajalla, jotka nyt käytetyssä teoreettisessa viitekehyksessä ja energioiden suuruusluokissa toteutuvat.

3 Menetelmät

Tutkin oktupolideformaation vaikutusta aktinoidialueen ytimien siirtymävoimakkuuksiin ja fotoabsorbtiion vaikutusalaan käyttäen valmiina olleita toiminnaltaan edellisen luvun 2 teorioiden ja mallien mukaisia laskentaohjelmia. Laskentaohjelmilla kartoitin aluksi HFB-menetelmän mukaisesti ydin kerrallaan ytimen deformaatioenergiaa kvadrupoli- ja oktupolideformaatioiden eli kvadrupoli- ja oktupolimomenttien funktiona. Deformaatioenergiaksi olen tässä tutkielmassa määrittelyt eron deformatuneen ja pallosymmetrisen ytimen kokonaisenergioiden ($E_{\text{kok}} < 0$) välillä

$$E_{\text{def}}(Q_2, Q_3) = E_{\text{kok}}(Q_2, Q_3) - E_{\text{kok,sym}}, \quad (83)$$

jonka mukaisesti ytimen perustilassa deformaatioenergia E_{def} on minimissään. Toisinaan tässä tutkielmassa ytimen perustilan määrittely vastaa deformaatioenergian minimoivan deformaation löytämistä. Olennaisesti pyrin löytämään kaksi deformaatioenergian minimiä ja siten kaksi erilaista ytimen perustilaa, jotka ovat oktupolideformoitumattomaan tilaan rajoitetun ytimen perustila deformaatioenergialla $E_{\text{def}}(Q'_2, 0)$ sekä rajoittamaton perustila deformaatioenergialla $E_{\text{def}}(Q_2, Q_3)$.

Määritettyjen perustilojen pohjalta etenin ytimen viritystilojen tutkimiseen ulkoisessa kentässä FAM-QRPA-menetelmän mukaisin laskentaohjelman laskuin, joista sain tuloksena ytimien eri deformaatioita vastaavat siirtymävoimakkuudet, joista laskin sähköisille siirtymille fotoabsorbtiovaikutusalat. Siirtymävoimakkuuksia ja vaikutusaloja ajatellen olen lisäksi määrittelyt kvadrupolideformaation muutokseksi kvadrupoli- ja oktupolideformoituneen sekä vain kvadrupolideformoituneen muodon välillä

$$\Delta Q_2 = Q_2 - Q'_2, \quad (84)$$

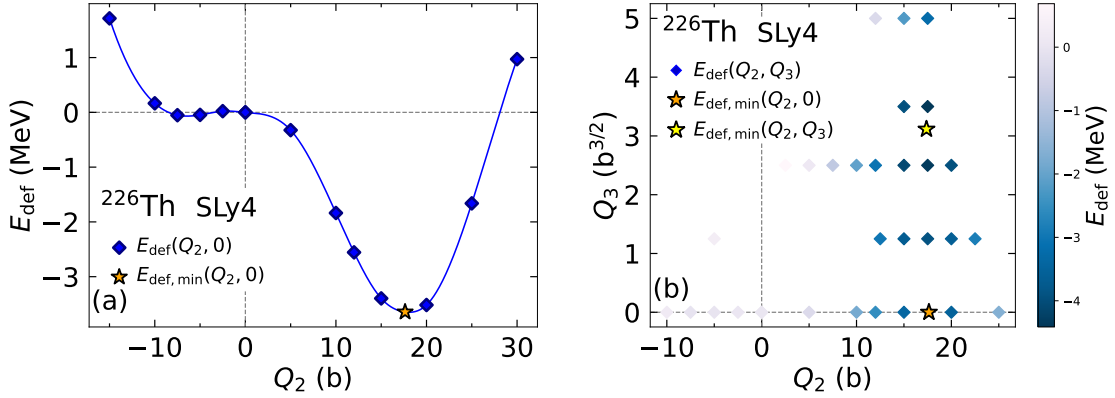
jonka tarkoituksena on tuoda esiin mahdollisen kvadrupolideformaation muutoksen vaikutus siirtymävoimakkuuksissa ja vaikutusaloissa esiintyviin eroihin oktupolideformoituneen ja -deformoitumattoman muodon välillä. Seuraavaksi esittelen tarkemmin edellä kuvatut tutkimuksen vaiheet.

3.1 Ytimen perustilojen määrittäminen

Sopivien, eli todennäköisemmin perustilassaan oktapolideformoituneiden aktinoidien valitsemisessa hyödynsin lähteen [12] tuloksia, jotka kattavat laajasti arviot muun muassa aktinoidialueen ytimien oktapolideformaatioista tätä tutkielmaa vastaavassa Skyrme-HFB-viitekehelyksessä viidellä eri Skyrme-parametrisaatiolle laskettuna. Kullekin tutkitulle ytimelle selvitin ensin aksiaalisymmetrisessä harmonisten oskillaattorien kannassa toimivalla HFBTHO v2.00d -laskentaohjelmalla [23], jota tästedes kutsun lyhyesti HFBTHO:ksi, ytimen rajoitetun ja rajoittamattoman perustilan kvadrupoli- ja oktapolideformaatioiden suhteen. Idealtaan HFBTHO:n toiminta ja HFB-yhtälöiden ratkaisu ovat kuten luvuissa 2.2–2.4 olen menetelmiä kuvannut, mutta sen yksityiskohtiin ja laskuteknisiin asioihin voi tutustua vielä tarkemmin ohjelman [23] sekä sen aiemman version [34] dokumenteista.

HFBTHO:lla etsin ensin ytimen deformaatioenergian minimin oktapolideformoitumattomaan ($Q_3 = 0$) muotoon rajoitetulla ytimellä kvadrupolideformaation funktiona yhtälössä (83) määrittelemäni mukaisesti olettaen tutkittujen ytimien energiaminimien olevan prolaattideformaatiolla ($Q_2 > 0$), mikä lähteen [49] perusteella on hyvä oletus. Tästä sain kuvan 2a mukaisia deformaatioenergian kuvaajia. Deformaatioenergian minimin löydyttyä Q_2 :n funktiona kartoitin tätä vastaavan kvadrupolideformaation ympäristössä deformaatioenergiaa Q_2 :n ja Q_3 :n funktiona, josta sain kuvan 2b mukaisia deformaatioenergian karttoja ytimille kvadrupoli- ja oktapolimomenttien funktiona. Kuvassa 2b kaksi tähdellä merkittyä deformaatiota ^{226}Th :lle vastaavat oktapolideformoitumattomaan muotoon rajoitettua ja todellista perustilaa, edustaen esimerkinomaisesti kahta eritavalla deformoitua ydintä, joille tässä tutkielmassa siirtymävoimakkuudet ja fotoabsorbtiovaikutusalat halutaan laskea.

Edellä kuvatut laskut tein HFBTHO-laskentaohjelman HFB-laskun alustavaa parametritiedostona annettavaa parametrilistaa, josta esimerkki liitteessä C, muuttelamalla. Tarkemmin eri parametrien merkityksiin voi tutustua laskentaohjelman dokumentista [23], mutta esitän seuraavaksi tässä tutkielmassa olennaisimmat parametrit ja niille käyttämäni arvot. Alustusparametrein valitsin kulloinkin tutkittavan ytimen asettamalla protoni- ja neutroniluvut (*proton_number* ja *neutron_number*) tutkittavaa ydintä vastaaviksi. Harmonisten oskillaattorien kannan koon määräävänä oskillaattorikuorien pääkvanttilukuna (*number_of_shells*) käytin arvoa $M_0 = 20$,



Kuva 2. Ytimen ^{226}Th deformaatioenergioita SLy4 Skyrme-parametrisaatiolla laskettuna. Kuvassa (a) on määritettyä deformaatioenergia oktopolideformoitumattomalle muodolle kvadrupolideformaation funktiona sekä oranssilla tähdellä merkittynä vastaava deformaatioenergian minimi. Kuvassa (b) on deformaatioenergia määritettyä kvadrupoli- ja oktopolideformaatioiden funktiona sekä merkittynä oranssilla ja keltaisella tähdellä deformaatioenergian minimi ainoastaan kvadrupolideformoituneella sekä kvadrupoli- ja oktopolideformoituneella muodolla laskettuna.

joka määrittää laskussa käytettävän kannan koon yhtälön (6) mukaisesti. Kaikissa laskuissa käytin oskillaattorin pituutena (*oscillator_length*) negatiivista arvoa tarkoittaen, että HFBTHO määrittä sen tutkittavan ytimen massaluvun perusteella. Skyrme-vuorovaikutukselle (*functional*) käytin SkM* [50] -parametrisaatiota yhtä ^{226}Th -ytimelle tehtyä vertailulaskua lukuun ottamatta, missä käytin SLy4 [51] -parametrisaatiota. Coulomb-vuorovaikutukselle (*type_of_coulomb*) käytin kaikissa laskuissa parametrin arvoa 2 eli ohjelma huomioi energiefunktionaalissa Coulombin suoran ja vaihtotermin, joista jälkimmäisen Slaterin approksimaationa. Lisäksi kaikissa laskuissa olin pakottamatta pariteettisymmetriaa eli käytin sille (*force_parity*) arvoa F , mikä oktopolideformaation tapauksessa oli välttämätöntäkin. Iteraation konvergoitumisehtoa eli HFB-laskun tarkkuutta (*accuracy*) muuttelin deformaatioenergiaa kartoittaessani jonkin verran laskenta-aikojen pienentämiseksi kuitenkin käyttäen aina lopullisessa deformaatioenergian minimin määränneessä laskussa tarkkuutta 10^{-7} , joka HFBTHO:ssa tarkoittaa kahden peräkkäisen iteraatiokierroksen tulosten HFB-matriisin normin eroa.

Ytimen multipolimomenteille, joita määritettiin liitteen C esimerkkiparametri-tiedostossa otsikon `@HFBTHO_CONSTRAINTS` alla olevasta osuudesta, ja siten käytännössä ytimen deformaatiolle käytin rajoituksia siten, että dipolimomentin ra-

joitin aina nolnaan ($Q_1 = 0$), mutta heksadekapolin Q_4 ja sitä suurempien multipolien annoin vapaasti hakeutua kaikissa laskuissa energiaminimiä vastaaviin arvoihinsa. Näiden lisäksi käytin parametrilistassa rajoituksia kvadrupoli- ja oktupolimomenteille Q_2 ja Q_3 siten, että deformaatioenergiakarttaa kartoittaessani rajoitin näitä molempia haluamiini arvoihin ja absoluuttisia deformaatioenergia minimejä laskiessani annoin niiden vapaasti hakeutua minimiä vastaaviin arvoihinsa – paitsi vain kvadrupolideformaation sallineissa laskuissa pakotin oktupolimomentin nolnaan ($Q_3 = 0$). Muut ytimen ominaisuuksiin liittyvät parametrien arvot olivat kaikissa tekemisissäni laskuissa liitteen C esimerkkietiedoston mukaisia ja muita laskujen tekniseen toteutukseen liittyneitä parametreja muutin tarpeen mukaan.

Määritettyäni ytimien perustilojen deformaatiot HFBTHO-laskentaohjelmalla Q_2 :n ja Q_3 :n suhteen etenin ytimien, joiden deformaatioenergiat toteuttivat ehdon

$$E_{\text{def}}(Q_2, Q_3) < E_{\text{def}}(Q'_2, 0) < 0, \quad (85)$$

osalta FAM-QRPA-menetelmän mukaisiin laskuihin määrittääkseni siirtymävoimakkuudet. Puolestaan ytimet, joiden deformaatioenergian minimi ei ollut oktupolideformaatiolla, tai jotka eivät muuten toteuttaneet edellä esitettyä ehtoa, hylkäsinkin jatkotarkastelusta, enkä niille siirtymävoimakkuuksia laskenut.

3.2 Siirtymävoimakkuuksien ja fotoabsorbtiovaikutusalojen laskeminen

FAM-QRPA-laskut tein HFBTHO:n päälle rakennetulla FAM-QRPA-ratkaisimella, jota ensimmäisen kerran nykyisessä muodossaan käytettiin lähteessä [24], ja joka tämän tutkielman näkökulmasta olennaisesti antoi tuloksena yhtälön (81) mukaiset siirtymävoimakkuusfunktiot. FAM-QRPA-laskujen aluksi HFBTHO-laskentaohjelma laski ytimen halutulla tavalla rajoitetun tai rajoittamattoman perustilan eli HFB-ratkaisun, jonka perusteella FAM-QRPA-laskentaohjelma ratkaisi FAM-QRPA-yhtälöt (65). Suoritettavaa FAM-QRPA-laskua varten täytyi määritellä ulkoiseen kenttään liittyneet asiat sekä muita laskuteknisiä asioita, jotka laskentaohjelmalle annetaan liitteessä C esitetyn mukaisella parametritiedostolla.

Tässä tutkimuksessa määritin ulkoisen kentän aina joko sähköiseksi tai magneettiseksi dipolikentäksi z -projektiolla K . FAM-QRPA-laskut alustavassa liitteessä C esitetyssä parametritiedostossa kenttää määrittäviä parametreja ovat O , T , L ja

K , joista O määrittää kentäksi sähköisen ($O = 1$) tai magneettisen ($O = 3$). Parametri T liittyy ulkoiseen kenttään siten, että sähköisen kentän osalta sen arvona käytin isovektori kenttää ($T = 1$), ja magneettisen kentän yhtälössä (50) oleville gyromagneettisille vakioille käytin arvoja $g_s^{p(n)} = 5.586(-3.826)$ ja $g_l^{p(n)} = 1$ (0) ($T = 2$). Ulkoisen kentän multipolin määrää parametri L , jona kaikissa laskuissa käytin dipolikenttää ($L = 1$). Puolestaan K on multipolin L z-projektio, joten sen arvoina käytin arvoja $K = 0$ tai $K = 1$, missä arvon $K = -1$ käyttö ei ollut tarpeen sillä se tuottaa $K = 1$ -tapauksen kanssa identtiset voimakkuusfunktiot [24]. Tässä tutkimuksessa siten O , T ja K ovat FAM-QRPA-laskujen ainoat parametrit, joiden arvoja eri laskujen välillä muutin.

Muita FAM-QRPA-laskujen alustuksessa olennaisia parametriarvoja ovat yhtälön (65) mukaiset energian arvot ω , joissa FAM-QRPA-lasku suoritetaan. Tässä tutkimuksessa laskin kaikki ytimet suorittamalla FAM-QRPA-laskut energian reaali-osan ($\omega = \omega_0 + i\gamma$) osalta 0,3 MeV:n välein 128:lla energian arvolla lähtien nolasta eli $\omega_0 \in [0; 38,1]$ MeV. Puolestaan kentän energian imaginääriosana käytin arvoa $\gamma = 0.5$ MeV, joka pysyi aina samana. Nämä kentän energiaan liittyneet parametrit määritettiin parametritiedoston riveillä *line parameters* ja *qrpa_points* liitteessä C esitetyn esimerkkiedoston mukaisesti. FAM-QRPA-yhtälöiden ratkaisun konvergoitumisehtona ja siten tarkkuutena (*qrpa_eps*) käytin arvoa 4×10^{-7} sekä konvergoitumisen todennäköisyyteen ja tehokkuuteen liittyvinä Broydenin menetelmän [35] parametreina käytin esimerkkiparametritiedoston mukaisia arvoja (*qrpa_nBroyden* = 30 ja *qrpa_alphamix* = 0,33).

FAM-QRPA-laskuista saadut siirtymävoimakkuudet piirsin kuvaajiksi, ja tarkistettiin oliko FAM-QRPA-ratkaisin ehtinyt laskea kaikki energian arvot sillä olleessa aikarajassa. Lisäksi laskin sähköisistä dipolisiirtymävoimakkuuksista ytimille niihin liittyvät fotoabsorptiovaikutusalat yhtälön (82) mukaisesti ja piirsin nekin kuvaajiksi.

4 Tulokset

Tässä luvussa käyn läpi tutkimieni ytimiin liittyvät tulokset. Ensimmäisenä esittelen luvussa 4.1 perustilassaan oktapolideformoituneiksi ja muutenkin ehdon (85) mukaisiksi löytämieni ytimien kvadrupoli- ja oktapolideformaatioiden suuruudet kvadrupoli- ja oktapolimomentteina sekä vastaavat deformaatioenergiat. Suorittamieni $E1$ - ja $M1$ -siirtymävoimakkuuslaskujen sekä $E1$ -siirtymävoimakkuuksien perusteella määrittämieni fotoabsorbtiovaikutusalojen tulokset esittelen luvuissa 4.2–4.4 kuvaajien ja niihin liittyvien havaintojen muodossa hiukan myös aiempiin teoreettisissa ja kokeellisissa tutkimuksissa saatuihin tuloksiin tai yleisiin havaintoihin verraten.

4.1 Deformaatioenergiat ja deformaatiot

Tutkimistani aktinoidialueen ytimistä energiainimi oktapolideformaatiolla löytyi taulukossa 1 listatuilta ytimiltä. Taulukossa on esitettyä näille ytimille HFBTHO:lla lasketut kokonaisenergiat sekä määritelmän (83) mukaiset deformaatioenergiat vain kvadrupolideformoidulle sekä kvadrupoli- ja oktapolideformoiduille muodoille. Lisäksi taulukossa on vastaavien deformaatioiden suuruudet kvadrupoli- ja oktapolimomentteina. Tulosten perusteella aktinoidialueella kokeellisestikin saavutettavien ytimien joukossa on useita potentiaalisesti oktapolideformoituneita ytimiä sekä ainakin muutama kokeellisesti saavuttamattomissa olevien erittäin neutronirikkaiden aktinoidien joukossa, mikä vastaa aiempia arvioita [11, 12].

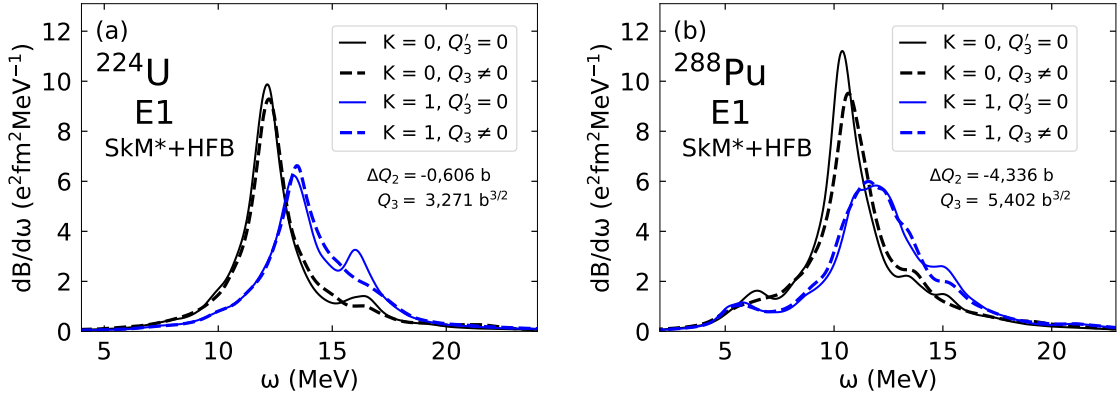
Taulukon 1 ytimistä lähes kaikilla on pelkkään kvadrupolideformaatioon verrattuna huomattava energiainimi oktapolideformoituneella muodolla. Selvimmän poikkeuksen tähän kuitenkin tekevät ^{228}Th , ^{228}U ja ^{230}Pu , joilla kaikilla ero on alle 0,5 MeV ollen erityisen pieni ^{230}Pu :lla, jolle siten päädyin laskemaan vain $E1$ -siirtymävoimakkuudet ja niiden mukaiset fotoabsorbtiovaikutusalat. Lisäksi ^{222}Th :lla ja ^{288}Pu :lla energiaero pallosymmetrisestä muodosta vain kvadrupolideformoituneeseen muotoon on melko pieni ollen alle 0,5 MeV, mutta nämä ovat joka tapauksessa vain rajoitettujen HFB-laskujen määräämiä deformaatioita, eikä niillä siten ole varsinaisesti fysikaalista merkitystä.

Taulukko 1. Ytimien, joille tein siirtymävoimakkuuslaskuja, pallosymmetrisen muodon kokonaisenergia ja vain kvadrupolideformoituneen sekä kvadrupoli- ja oktupolideformoituneiden muotojen deformaatioenergiat ja kvadrupoli- ja oktupolimomentit. Kaikki tulokset ovat SkM* -parametrisaatiolla saatuja, jos ei ole toisin mainittu.

Ydin	$E_{\text{kok,sym}}$ (MeV)	Q'_2 (b)	$E_{\text{def}}(Q'_2, 0)$ (MeV)	Q_2 (b)	Q_3 (b ^{3/2})	$E_{\text{def}}(Q_2, Q_3)$ (MeV)
²²² Th	-1694,913	10,521	-0,218	11,125	3,106	-1,837
²²⁴ Th	-1706,764	15,239	-1,944	15,242	3,559	-3,467
²²⁶ Th	-1718,329	18,802	-4,117	17,734	3,620	-4,901
²²⁶ Th, SLy4	-1718,599	17,635	-3,644	17,376	3,115	-4,401
²²⁸ Th	-1729,738	21,004	-6,036	20,406	3,090	-6,199
²²⁴ U	-1698,813	12,347	-0,812	11,741	3,271	-2,460
²²⁶ U	-1711,545	17,556	-2,969	16,236	3,692	-4,225
²²⁸ U	-1724,000	21,106	-5,555	19,360	3,678	-5,921
²²⁶ Pu	-1701,531	13,774	-1,161	11,869	3,402	-2,679
²²⁸ Pu	-1715,074	19,776	-3,698	16,988	3,725	-4,532
²³⁰ Pu	-1728,244	22,713	-6,607	21,176	3,371	-6,650
²²⁸ Cm	-1702,875	14,887	-1,456	11,699	3,513	-2,782
²⁸⁸ Pu	-1992,639	20,266	-0,190	15,931	5,402	-1,628
²⁹⁰ Pu	-1995,316	28,325	-1,956	22,099	5,798	-2,465
²⁹⁰ Cm	-2014,944	32,332	-0,860	13,996	5,551	-2,176

Kaikille oktupolideformoituneiksi löydetyille ytimille deformaatioon liittyvän oktupolimomentin arvo on samaa suuruusluokkaa poikkeuksena erittäin neutronirikkaat ytimet. Toisaalta multipolimomenttien suuruudet riippuvat muodon lisäksi ytimen koosta, kuten yhtälö (2) osoittaa, joten taulukoitujen oktupolimomenttien perusteella ei voi erittäin neutronirikkaidenkaan ytimien sanoa olevan muita tutkituja ytimiä deformoituneempia. Puolestaan kvadrupolideformaatioiden suuruudet eri ytimien välillä vaihtelivat merkittävästikin. Lisäksi lähes kaikilla ytimillä kvadrupolideformaation suuruus hieman pienenee siirryttäessä oktupolideformoitumattomasta oktupolideformoituneeseen ytimeen, mille poikkeuksena ²²²Th ja ²²⁴Th, joilla kvadrupolideformaatio oli lähes yhtä suuri tai hieman suurempi oktupolideformoituneella ytimellä, sekä erittäin neutronirikkaat ytimet, joilla puolestaan kvadrupolideformaatio saattoi muuttua hyvinkin paljon vain kvadrupolideformoidun sekä kvadrupoli- ja oktupolideformoidun muodon välillä.

Taulukossa 1 esitettyjen ytimien lisäksi tutkimissani ytimissä ei muita HFBTHO-laskujen perusteella perustilassaan oktupolideformoituneita ytimiä ollut tai ne eivät

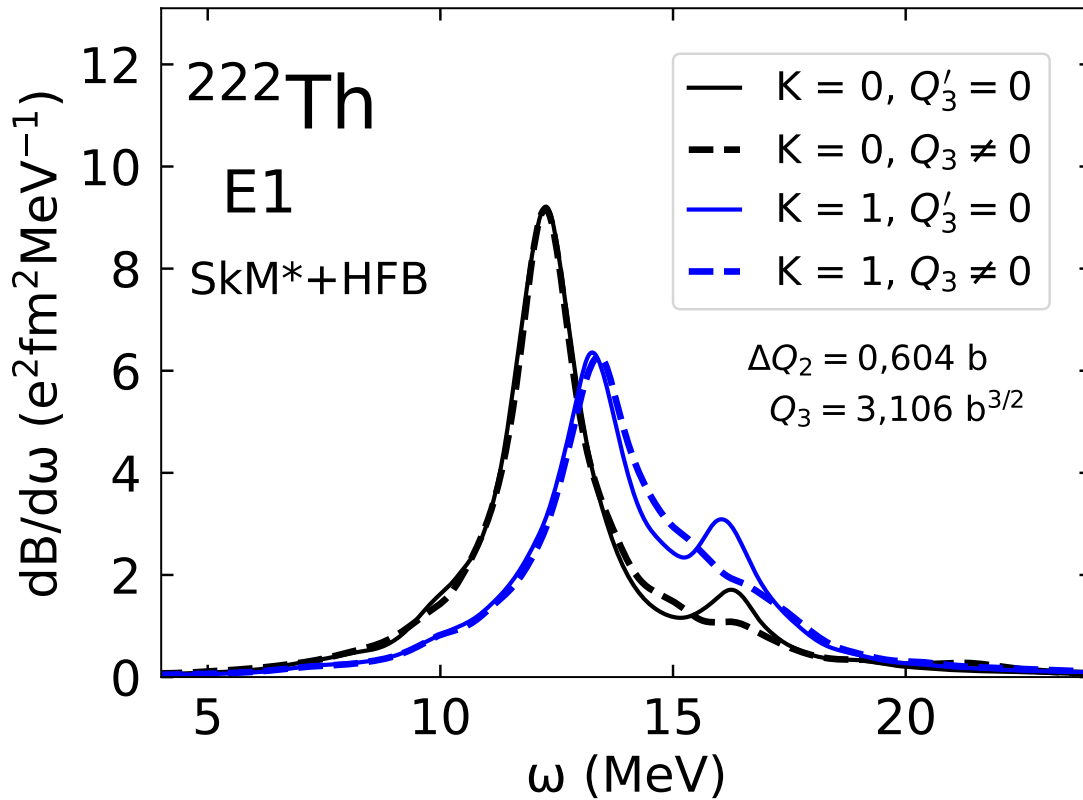


Kuva 3. Ytimien (a) ^{224}U ja (b) ^{288}Pu sähköiset dipolisiirtymävoimakkuusfunktiot vain kvadrupolideformoituneella (yhtenäinen viiva) sekä kvadrupoli- ja oktopolideformoituneella (katkoviiva) muodolla erikseen $K = 0$ (musta) ja $K = 1$ (sininen) -moodeille piirrettynä saaduista FAM-QRPA-laskujen tuloksista.

täyttäneet muita asettamiani ehtoja (85). Näistä ^{230}U , ^{232}Cf ja ^{234}Fm -ytimillä ei ollut oktopolideformoitunutta perustilaa. Puolestaan ytimillä ^{220}Th ja ^{222}U oli oktopolideformoitunut perustila, mutta ilman oktopolideformaatiota niiden energian minimi oli pallosymmetrisellä muodolla.

4.2 Sähköiset dipolisiirtymävoimakkuudet

Kuvassa 3 on FAM-QRPA-laskujen tuloksista saadut sähköiset $E1$ -siirtymävoimakkuusfunktiot ytimille ^{224}U ja ^{288}Pu koko lasketun energiavälin $\omega = 0,0\text{--}38,1$ MeV sijaan keskittyen alueeseen, jossa on suurempia siirtymävoimakkuuksia. Edellä, täs- tedes ja kaikissa kuvaajissa energialla viitataan aina sen reaaliosaan ω_0 , minkä olen kuitenkin jättänyt implisiittiseksi. Kuvaajiin erikseen piirretyistä $K = 0$ ja $K = 1$ -moodeista jälkimmäinen sisältää identtistä $K = \pm 1$ -moodeista vain toisen. Kuvassa 3a näkyy ^{224}U :n suurempien siirtymävoimakkuuksien jakautuminen suunnilleen energiavälille $\omega = 10\text{--}18$ MeV, kun taas kuvan 3b huomattavasti massaluvultaan suuremmalla erittäin neutronirikkaalla ^{288}Pu :lla suuremmat siirtymävoimakkuudet ovat suunnilleen energiavälillä $\omega = 6\text{--}17$ MeV. Kuvan 3, kuten kaikkien muidenkin tutkittujen kuvassa 4 ja liitteessä D esitettyjen ytimien kuvaajissa näkyy siirtymävoimakkuusfunktioiden $K = 0$ ja $K = 1$ -moodien erottuminen selvästi erillisiksi voimakkuusfunktioikseen kvadrupolideformaatiosta johtuen $K = 1$ -moodin ollessa siirtyneenä suuremmalla energialle $K = 0$ -moodiin nähden, kuten prolaattideformaatiossa odottaisikin [1, 10].



Kuva 4. Ytimen ^{222}Th sähköinen dipolisiirtymävoimakkuusfunktio kuvan 3 mukaisin selityksin.

$K = 0$ -moodin siirtymävoimakkuusfunktiossa on kuvan 3a ^{224}U :lla siirtymävoimakkuuspiikki energian $\omega \approx 12 \text{ MeV}$ kohdalla. Vastaavasti $K = 1$ -moodin siirtymävoimakkuusfunktiossa on suuri siirtymävoimakkuuspiikki energialla $\omega \approx 13,5 \text{ MeV}$. Kuvan 3a perusteella näiden piikkien suuruuksissa on eroa vain kvadrupolideformoidun sekä kvadrupoli- ja oktapolideformoidun muodon välillä, mutta tämän eron oktapolideformaation sijaan voisi tulkita johtuvan ennemmin kvadrupolideformaation muutoksesta eri muotojen välillä. Näin voi päätellä kvadrupolideformaation suuruuden pienenemisestä ^{224}U :lla siirryttäessä vain kvadrupolideformoituneesta oktapolideformoituu muotoon, mikä saisi $K = 0$ ja $K = 1$ -moodien piikit siirtymään toisiaan lähemmäksi niiden energiakohtaan ja siirtymävoimakkuuksiin liittyen tietäen moodien erottumisen liittyvän kvadrupolideformaation suuruuteen. Huomioimalla muutkin kuvissa 3b ja 4 sekä liitteessä D esitetyt $E1$ -siirtymävoimakkuuskuvaajat on niissä havaittavissa samaa ilmiötä siirtymävoimakkuuspiikkien eroihin ja kvadrupolideformaation muutokseen liittyen. Tästä erityisesti huomion arvoinen on kuvassa

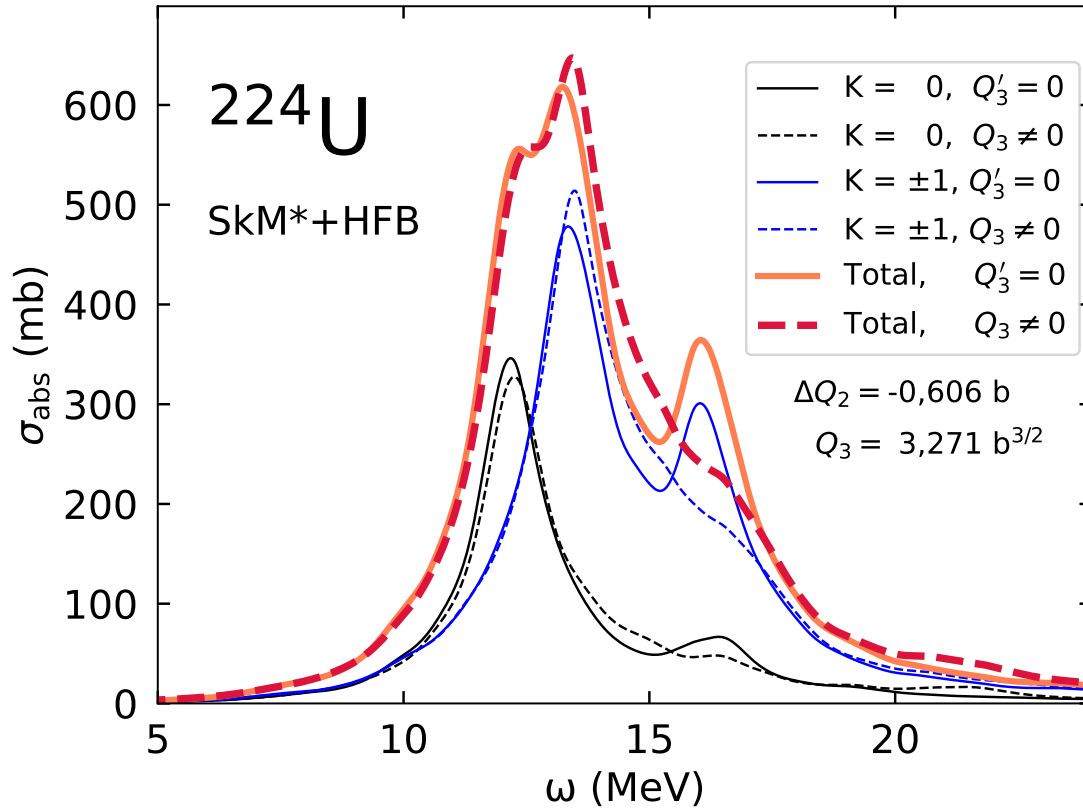
4 esitetty ^{222}Th , jolla poikkeuksellisesti muihin tutkittuihin ytimiin nähden kvadrupolideformaatio kasvoi ($\Delta Q_2 > 0$) oktupolideformoituu muotoon siirryttäessä, ja jolla myös siirtymävoimakkuuspiikeissä havaittavat erot ovat päinvastaisia joskin pieniä muihin ytimiin nähden.

Edellä käsiteltyjen siirtymävoimakkuuspiikkien lisäksi kuvien 3 ja 4, sekä liitteen D siirtymävoimakkuuskuvaajissa on havaittavissa $K = 1$ -moodilla selvempi ja $K = 0$ -moodilla pienempi enemmän kumpua muistuttava siirtymävoimakkuuspiikki energian $\omega \approx 16$ MeV kohdalla – paitsi erittäin neutronirikkailla ytimillä hieman pienemmällä energialla. Kuvaajien perusteella tähän siirtymävoimakkuuspiikkiin liittyen oktupolideformaatiolla vaikuttaisi olevan selvä pienentävä tai jopa täysin häivyttävä vaikutus vain kvadrupolideformoituu muotoon verrattuna. Tähän liittyviä syitä arvioin tarkemmin seuraavaksi esittämäni fotoabsorbtiotilavaikutusalan tulosten yhteydessä niiden kummutessa suoraviivaisesti $E1$ -siirtymävoimakkuudesta, ja niille ollessa paremmin aiempia tutkimuksia, joihin tuloksia suoraan verrata.

4.3 Fotoabsorbtiotilavaikutusalat

Sähköisistä dipolisiirtymävoimakkuuksista yhtälön (82) mukaisesti lasketuissa ja siten sähköisen jättidipoliresonanssin kuvaamiseen keskittyneissä fotoabsorbtiotilavaikutusalan kuvaajissa esiintyy kosolti osiossa 4.2 esitetyjä ilmiöitä. Ytimen ^{224}U vaikutusalan kuvaajassa 5, kuten kaikissa lopuissakin vaikutusalan kuvaajissa kuvissa 6 ja 7 sekä liitteessä D on erikseen piirrettynä $K = 0$ ja $K = \pm 1$ -moodien vaikutusalat, $K = \pm 1$ sisältäen summan identtisistä $K = 1$ ja $K = -1$ -moodeista, sekä kaikkien moodien summasta muodostuva kokonaisvaikutusala (kuvissa *Total*). ^{224}U :n kuvaajasta voi huomata $K = 0$ ja $K = \pm 1$ -moodien ensimmäisten piikkien olevan niin lähellä toisiaan, että ne muodostavat kokonaisvaikutusalassa yhden leveän lähes yhtenäisen piikin, josta kuitenkin kahden osapiikin osatkin ovat havaittavissa. Kaikilla tutkituilla ytimillä on vaikutusalan kuvaajissa havaittavissa samanlaista eroa $K = 0$ ja $K = \pm 1$ -moodien ensimmäisissä piikeissä, ja siten kokonaisvaikutusalan kahdessa ensimmäisessä piikissä, vain kvadrupolideformoituneen sekä kvadrupoli- ja oktupolideformoituneiden muotojen välillä, kuin mitä oli $E1$ -siirtymävoimakkuuksillakin havaittavissa, minkä oletin johtuvan kvadrupolideformaation muutoksista.

Kuvassa 5 on ^{224}U :lla havaittavissa fotoabsorbtiotilavaikutusalassa vain kvadrupolideformoidulla muodolla kolmas piikki energian $\omega \approx 16$ MeV kohdalla, mikä oktupolideformoituneella muodolla vaikuttaisi häivyttäneen pois. Puolestaan pienemmällä



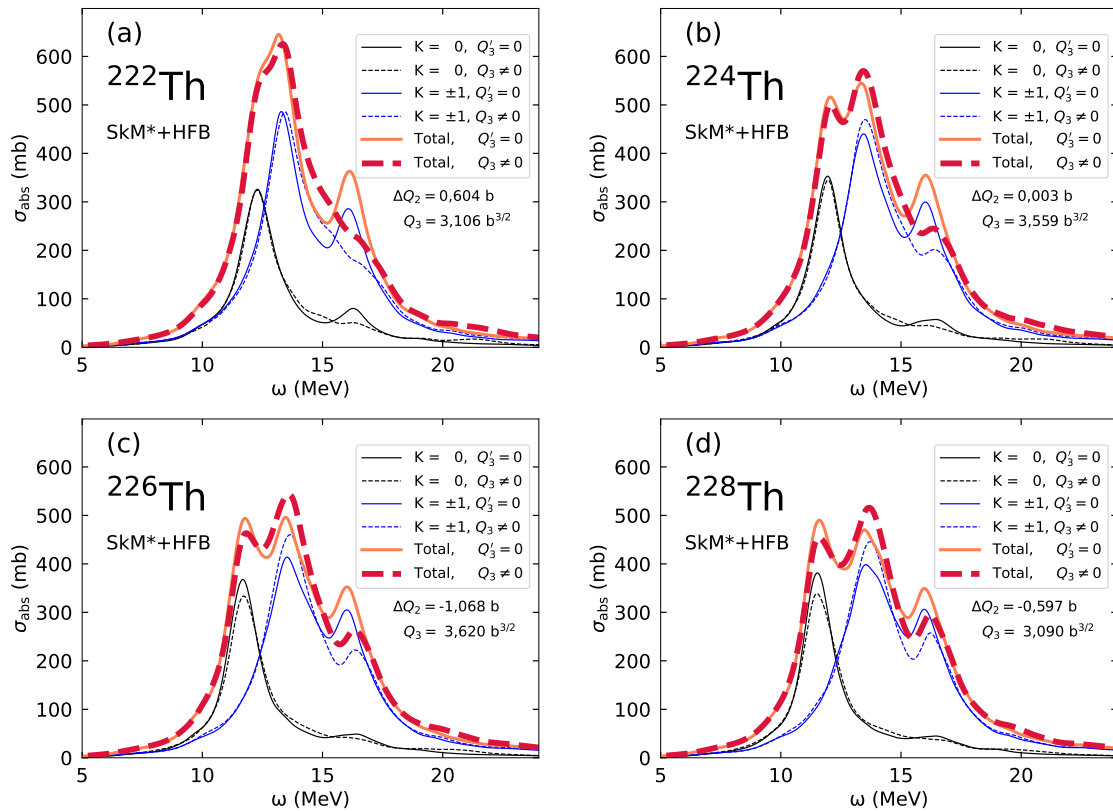
Kuva 5. Ytimelle ^{224}U lasketut fotoabsorbtiivaikutusalat vain kvadrupolideformoituneella (yhtenäinen viiva) sekä kvadrupoli- ja oktopolideformoituneella (katkoviiva) muodolla, erikseen $K = 0$ (musta) ja $K = \pm 1$ (sininen) -moodeille piirrettynä jälkimmäisen ollen summa identtisistä $K = -1$ ja $K = 1$ -moodeista. Lisäksi punaisen sävyillä on piirrettynä kaikkien moodien summasta koostuva fotoabsorbtiion kokonaisvaikutusala (kuvassa *Total*).

energialla suunnilleen 15 MeV kohdalla vain kvadrupolideformoituneella muodolla vaikutusalan suuruudet ovat hieman pienempiä kvadrupoli- ja oktopolideformoituneeseen muotoon verrattuna. ^{224}U :n kuvaajasta 5 voisi näin ollen tulkita vain kvadrupolideformoidulla muodolla vaikutusalaa siirtyneen hieman pienemmältä energialta suuremmalle muodostaen vaikutusalassa kolmannen $\omega \approx 16$ MeV kohdalle esiintyvän piikin. Edellä kuvatut havainnot ovat myös nähtävissä vastaavalla tavalla tai maltillisemmin muillakin ytimillä kuvissa 6 ja 7 sekä liitteessä D, maltillisemmän tavan tarkoittaessa vain kvadrupolideformoituneessa muodossa tapahtuvaa piikin pienenemistä sekä kvadrupoli- ja oktopolideformoituneessa muodossa havaittavaa piikin ilmaantumista ja kasvua.

Kokeellisissa $E1$ -siirtymiin liittyvissä fotoabsorbtiivaikutusalan mittauksissa [1]

on pienemmillä ytimillä vaikutusalan kuvaajissa nähtävissä jonkinlaista melko pientä edellä kuvaamaani kolmatta piikkiä vastaavaa rakennetta sekä mahdollisesti hyvin pieninä havaittavissa nyt tutkimiani suuremmille ^{232}Th ja ^{238}U -aktinoideille tehdyissä mittauksissa [52]. Näihin verraten vain kvadrupolideformoituun muotoon rajoitettujen ytimien laskuissa ilmaantuva merkittävä kolmas vaikutusalan piikki näyttäytyy ylimääräisenä ilmestyvältä vaikutusalan piikiltä, eikä siten aiheuta syytää olettaa, että ytimen oktapolideformaatio pienentäisi kolmatta vaikutusalan piikkiä, kun sitä ei vain kvadrupolideformoituneella muodoillakaan pitäisi olla. Puolestaan aiemmin tehdyissä laskennallisissa tutkimuksissa [53] on havaittu joidenkin Skyrme, erityisesti SkM^* , -parametrisaatioiden tuottavan hyvin suuren kolmannen vaikutusalan piikin, joka on laskettu [54] SkM^* -parametrisaatiolla olevaksi myös pallosymmetrisellä ^{208}Pb -isotoopilla. Näin ollen voidaan olettaa nyt tekemissäni laskuissa erityisesti vain kvadrupolideformoituun muotoon rajoitetuilla ytimillä ilmestyvän kolmannen vaikutusalanpiikin liittyvän valittuun SkM^* -parametrisaatioon. Toisaalta on silti kiinnostavaa, että miksi ytimen oktapolideformoituneen perustilan salliminen laskuissa hävittää tai pienentää kolmatta vaikutusalan piikkiä. Tarkemman syyn arvioiminen vaatisi tarkempaa ytimille laskettujen perustilojen analyysia ja tulkintaa Skyrme-parametrisointeihin liittyen sekä FAM-QRPA-laskuissa indusoituneiden tiheyksien kuten lausekkeen (B.21) $\delta\rho(\omega)$:n tulkintaa eri muotojen välillä.

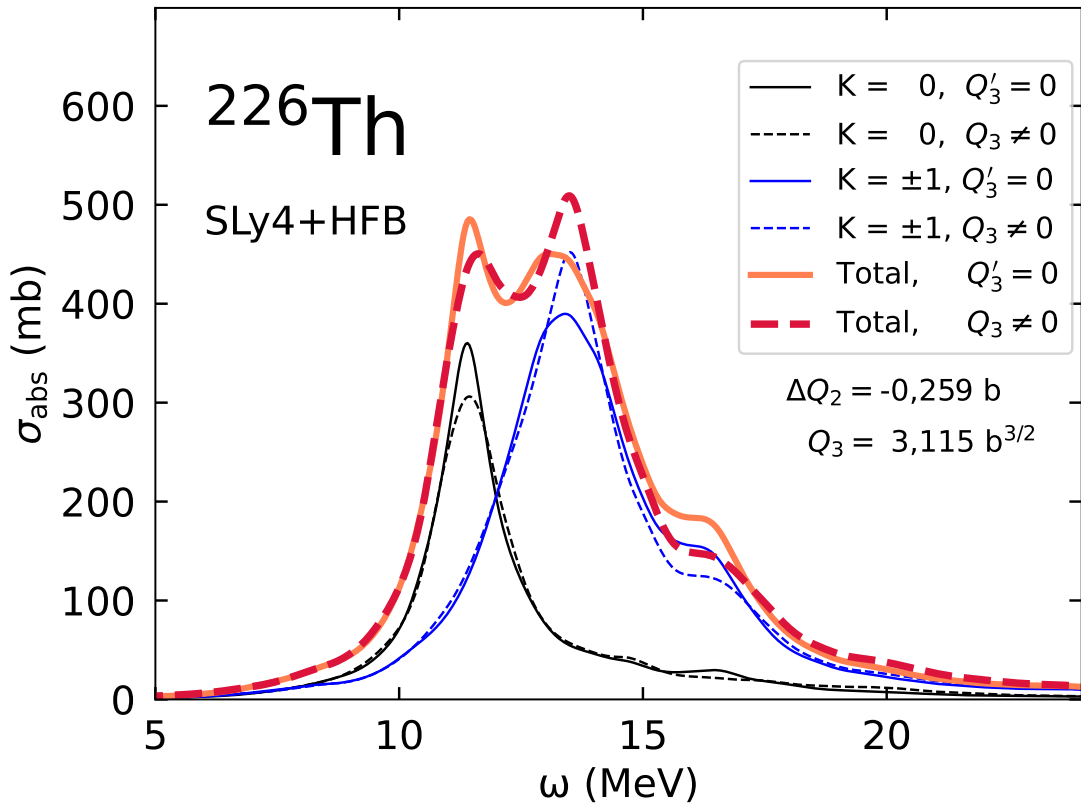
Kuvissa 6a–6d on esitettyä torium $^{222-228}\text{Th}$ isotooppiketjun SkM^* -parametrisaatiolla lasketut fotoabsorptiovaikutusalat. Isotooppiketjusta on havaittavissa kahden ensimmäisen vaikutusalanpiikin muodostuminen selvemmin omiksi piikeikseen neutroniluvun kasvaessa. Tämä on odotettua taulukossa 1 esitettyjen kvadrupolideformaation arvojen kasvaessa neutroniluvunkin kasvaessa tällä isotooppiketjulla. Pois lukien erittäin neutronirikkaat isotoopit, vastaava ilmiö on havaittavissa muidenkin tutkittujen ytimien isotooppiketjuissa huomioiden kuvan 5 ja liitteen D kuvaajat, joissa niin ikään kvadrupolideformaatiot kasvavat neutroniluvun kasvaessa. Kuvista 6a–6d on torium-isotooppiketjulle selvästi myös nähtävissä oktapolideformaation kolmatta piikkiä häivyttävän vaikutuksen pieneminen neutroniluvun kasvaessa, ja toisaalta myös vain kvadrupolideformoituun muotoon liittyvän piikin pieneminen neutroniluvun kasvaessa. Sama muutos on havaittavissa myös muiden kuvassa 5 ja liitteessä D esitettyjen ytimien muodostamissa isotooppiketjuissa, kun erittäin neutronirikkaita ja neutroniköyhempiä ytimiä ei verrata keskenään. Näin ollen isotooppiketjuihin tehtyjen havaintojen perusteella oktapolideformaation kolmatta



Kuva 6. Isotooppien $^{222-228}\text{Th}$ fotoabsorbtiovaikutusalat kuvan 5 mukaisin selityksin.

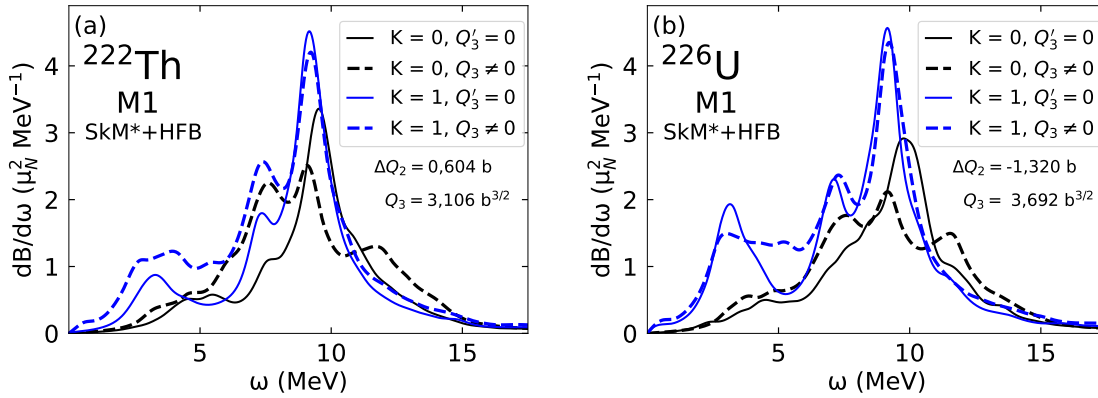
piikkiä häivyttävä, ja toisaalta pelkkään kvadrupolideformaation rajoitetun muodon piikkiä kasvattava vaikutus voidaan liittää ainakin isotooppiketjuissa neutroniluvun tai kvadrupolideformaation kasvuun. Lisäksi taulukon 1 deformaatioenergioita tarkastelemalla voi huomata myöskin oktupolideformaatioon liittyvän energiahyödyn, deformaatioenergian, suhteessa pallosymmetriseen ja vain kvadrupolideformoituu ytimeen kasvavan, deformaatioenergian pienenevän, neutroniluvun kasvaessa eli tämäkin laskettu suure muuttuu systemaattisesti, joskaan silläkään on vaikea selittää kolmannen piikin eroja. Toisaalta isotooppiketjuissa voinee olettaakin ytimeen liittyvien suureiden muuttuvan ainakin jokseenkin systemaattisesti, eli sitä vasten ei ole järkevääkään liittää kaikkia muuttuvia asioita toisiinsa.

Kuvassa 7 on esitettyä ytimelle ^{226}Th SLy4 -parametrisaatioilla laskettuna saatu fotoabsorbtiovaikutusalan kuvaaja. Vertaamalla sitä SkM* -parametrisaatiolla laskettuun kuvaajaan kuvassa 6c huomataan, että eri parametrisaatioilla saadut kuvaajat vastaavat pääpiirteissään hyvin toisiaan, mikä jokseenkin parantaa yleisesti ottaen saatujen tulosten luotettavuutta, joskaan ei paljoa vertailun kohdistuessa vain



Kuva 7. Ytimen ^{226}Th SLy4 -parametrisaatiota käyttäen laskettu fotoabsorbtiivivaikutusala kuvan 5 mukaisin selityksin.

yhteen ytimeen. Olennaista kuitenkin SLy4 ja SkM* -parametrisaatiolla lasketuissa ^{226}Th :n kuvaajissa on kolmanteen vaikutusalan piikkiin liittyvä ero, joka on SLy4 -parametrisaatiolla oktapolideformoitumattomaan muotoon rajoitetulla muodolla selvästi SkM* -parametrisaation vastaavaa pienempi lähinnä hieman suurempana vaikutusalanä näyttävä tasanne. Tämä havainto on linjassa edellä esittämiini pohdintoihin ja tutkimuksen [53] arvioihin eri Skyrme-parametrisaatioiden eroista kolmanteen piikkiin liittyen, joskaan siinä ei ollut tutkittu SLy4 -parametrisaatiota.

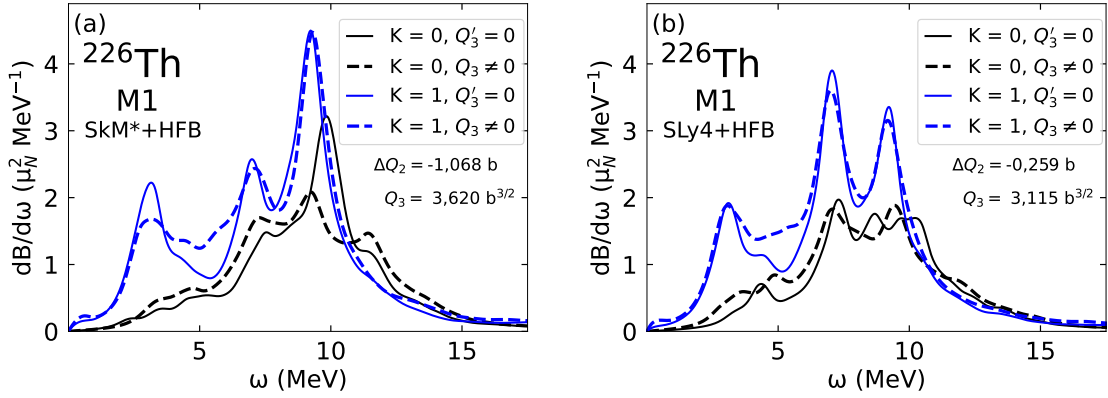


Kuva 8. Ytimien (a) ^{222}Th ja (b) ^{226}U magneettiset dipolisiirtymävoimakkuusfunktiot vain kvadrupolideformoituneella (yhtenäinen viiva) sekä kvadrupoli- ja oktopolideformoituneella (katkoviiva) muodolla erikseen $K = 0$ (musta) ja $K = 1$ (sininen) -moodeille piirrettynä saaduista FAM-QRPA-laskujen tuloksista.

4.4 Magneettiset dipolisiirtymävoimakkuudet

Magneettisten dipolisiirtymävoimakkuuksien kuvaajissa kuvissa 8–10 sekä liitteessä D esitetyissä kuvaajissa näkyy suurempia siirtymävoimakkuuksia suunnilleen energian välillä $\omega \approx 2\text{--}14$ MeV osan kuvista keskittyessä tälle energia välille ja liitteen D kuvien näyttäessä lähes koko lasketun energiavälin $\omega = 0,0\text{--}38,1$ MeV. Kaikkiin kuvaajiin on jo aiemmin esiteltyjä sähköisiä dipolisiirtymävoimakkuuksia vastaten piirretty erikseen $K = 0$ ja $K = 1$ -moodit jälkimmäisen sisältäessä toisen identtisistä $K = \pm 1$ -moodeista. Kaikkien tutkittujen ytimien kuvaajissa on selvästi havaittavissa suurimpia siirtymävoimakkuuksia saksiresonanssi- sekä spin-kääntöenergia-alueella molempien ollessa moodista riippuen hyvinkin erilaisia vain kvadrupolideformoidun sekä kvadrupoli- ja oktopolideformoidun muodon välillä.

Saksiresonanssien energia-alueella on muilla ytimillä hieman yli 3 MeV ja erittäin neutronirikkailla ytimillä melko tarkalleen 3 MeV kohdalla $K = 1$ -moodiin liittyvä siirtymävoimakkuuden piikki, jonka sijainnin ero massalukuun liittyen on kuten odottaisikin olevan. Havaittavat saksiresonanssiipiikit ovat suurimmalle osalle ytimiä selvästikin suurempia vain kvadrupolideformoituneille muodoille, mitä voinee selittää jälleen kvadrupolideformaation pieneminen oktopolideformaation myötä kokonaisvaikutukseltaan saksiresonanssin ollessa neliöllisesti verrannollinen kvadrupolideformaation parametrien suhteen [9]. Tätä tukee myös kuvien 8a ja 8b havainnollistus, joista kuvassa 8a poikkeuksellisesti ^{222}Th :lle oktopolideformaatiolla on suurempi piikki sillä kvadrupolideformaation suurentuessa oktopolideformoituneen muodon myötä, kun

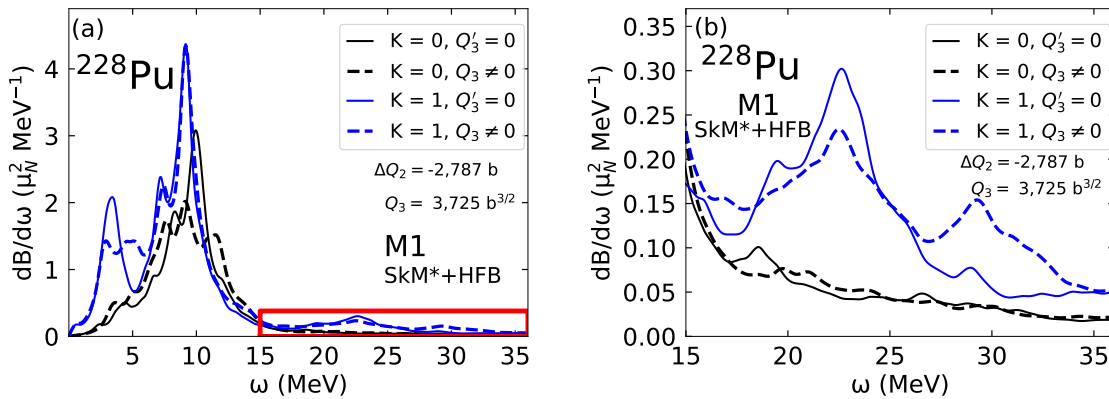


Kuva 9. Ytimen ^{226}Th magneettiset dipolisiirtymävoimakkuusfunktiot (a) SkM* ja (b) SLy4 -parametrisaatioilla laskettuna kuvan 8 mukaisin selityksin.

taas ^{226}U :lla on päinvastoin vastaten edellä kuvattua yleisempää tapausta. Toisaalta liitteessä D esitetyistä ytimestä ^{224}U sekä kuvassa 9b SLy4 parametrisaatiolla laskettu ^{226}Th ovat jokseenkin poikkeuksia saksiresonanssialueen siirtymävoimakkuuksien ollessa melko tarkasti yhtä suuret oktapolideformoitumattomalle ja -deformoituneelle muodolle huolimatta pienentyneestä kvadrupolideformaatiosta.

Laskettujen magneettisten dipolisiirtymävoimakkuuksien $K = 1$ -moodin saksiresonansseissa huomioitavaa myös on, että oktapolideformoituneella muodolla saksiresonanssit eivät kuvaajien perusteella muodosta kovin selvää piikkiä, vaan siitä siirryttäessä suuremmille viritysenenergioille kohti spin-kääntöresonanssialuetta havaittavissa on selvää siirtymävoimakkuutta kaikilla kuvissa 8–10 sekä liitteessä D esitetyillä ytimillä. Verrattuna kokeellisiin tuloksiin [55], esimerkiksi suuremmalla ^{238}U :lla spin-kääntöalueen levittäytyessä tai siirtyessä tälle alueelle voi tällä energiavälillä odottaakin olevan siirtymävoimakkuutta, mutta toisaalta on vaikea arvioida miksi oktapolideformoitumattomalla muodolla siirtymävoimakkuus on selvästi pienempää ^{238}U :kin ollessa oletetusti oktapolideformoitumaton [12]. Tähän liittyen tulokset ovat kuitenkin samanlaiset ^{226}Th :n kuvassa 9 esitetyillä SkM* ja SLy4 -parametrisoinneilla laskettuna, joten eron voisi ajatella liittyvän fysikaalisestikin oktapolideformaatioon, joskin jälleen yllättävämpi tulos liittyy oktapolideformoitumattomaan muotoon rajoitettuihin ytimiin, joten tällä kertaa ”puuttuva” siirtymävoimakkuus voisi kummuta jostain laskuissa tapahtuvastakin.

Kaikki kuvissa 8–10 sekä liitteessä D esitetyt ytimet huomioiden spin-kääntöresonanssien energiavälillä, $\omega \approx 5 - 10 \text{ MeV}$ M1-siirtymävoimakkuuksissa on piikkejä sekä $K = 1$ että $K = 0$ -moodeilla jakautuneena kyseiselle energiavälille, kuten defor-



Kuva 10. Ytimen ^{228}Pu magneettinen dipolisiirtymävoimakkuusfunktio piirrettyä (a) lähes koko lasketulla energian alueella sekä (b) suurennettuna kuvan (a) punaisella laatikolla rajattuun alueeseen muutoin kuvan 8 mukaisin selityksin.

moituneilla ytimillä yleensäkin. Pääosin $K = 1$ -moodilla ollen ensin yksi pienempi piikki suunnilleen energian 7 MeV ja suurempi 9 MeV kohdalla, näiden ollessa melko samat oktapolideformoidulle ja -deformoitumattomalle muodolle. $K = 0$ -moodilla tällä välillä oktapolideformoitumattomalla muodolla on pääsääntöisesti yksi isompi siirtymävoimakkuuspiikki suunnilleen energialla 10 MeV ja mahdollisesti pienempi piikki tai kumpuilu pienemmällä energialla. Puolestaan kvadrupoli- ja oktapolideformoidun $K = 0$ -moodin voimakkuusfunktio osoittaa jonkinlaista kumpuulua spin-kääntöresonanssialueella, mutta ei selkeitä piikkejä. Näin ollen $K = 0$ -moodin oktapolideformoituneella ja -deformoitumattomalla muodolla siirtymävoimakkuudet ovat hyvinkin erilaiset – poikkeuksena SLy4 -parametrisaatiolla laskettu ^{226}Th -ydin kuvassa 9b, jolla molempien deformaatioiden mukaiset kuvaajat ovat melko samantapaiset ollen edellä kuvatuista molemmat kvadrupoli- ja oktapolideformoituneen muodon mukaisia. Näin ollen spin-kääntöalueella oktapolideformaatiolla voinee olla siirtymävoimakkuuksiin suurtakin vaikutusta, mutta sen yksiselitteiseen toteamiseen liittyy suurehkoa epävarmuutta esimerkiksi Skyrme-parametrisointien eroavien tulosten myötä. Energian mennessä yli 10 MeV:n $M1$ -siirtymävoimakkuudet laskevat $K = 0$ ja $K = 1$ -moodeilla melko nopeasti pieniksi lähelle nollaa, kuitenkin osoittaen sitäkin suuremmilla energioilla jälleen hieman suurempiakin voimakkuuksia.

Edellä mainittujen havaintojen lisäksi kaikilla ytimillä on $K = 1$ -moodiin liittyen jonkin verran siirtymävoimakkuuden suuruutta energian 22,5 MeV kohdalla pienemmällä isotoopeille ja 20 MeV paikkeilla erittäin neutronirikkailla isotoopeilla osoittaen jälleen selvää massalukuriippuvuutta. Suurempi $M1$ -siirtymävoimakkuus

näkyä pienenä kumpuna kuvan 10a ^{228}Th :lle sekä muilla ytimillä liitteen D kuvaajissa. ^{228}Th :lle laskettua magneettista dipolisiirtymävoimakkuusfunktion rakennetta on esitelty tarkemmin kyseisellä energia-alueella kuvassa 10b. Viritysenergian 20 MeV paikkeilla on arvioitu [8] olevan isovektoriäyttikvadrupoliresonanssia liittyen ytimen $\Delta K = 1^+$ siirtymiin, joten tämä voisi tulkita olevan siihen liittyvää voimakkuutta. Tämän alueen voimakkuuskuvaajat näyttävät myös erilaisina oktupolideformoidulla ja -deformoitumattomalla muodolla molemmat kuitenkin esittäen nollasta eroavaa siirtymävoimakkuutta.

5 Johtopäätökset

Tässä tutkielmassa selvitin laskennallisesti oktopolideformaation vaikutusta sähköisiin ja magneettisiin dipolisiirtymävoimakkuuksiin sekä $E1$ -siirtymistä saatuihin jättidipoliresonanssialueen fotoabsorbtiovaikutusaloihin aktinoidialueen parillisparillisilla ytimillä. Oktopolideformaatiolla ei voinut havaita olevan yksiselitteisesti siitä johtuvaa fysikaaliseksi tunnistettavaa vaikutusta FAM-QRPA-laskuista saatuihin sähköisiin dipolisiirtymävoimakkuuksiin tai niistä laskettuihin fotoabsorbtiovaikutusaloihin. Vaikka $K = 0$ ja $K = \pm 1$ -moodien lasketuissa fysikaalisiksikin tunnistettavissa $E1$ -siirtymävoimakkuus- ja vaikutusalapiikkien suuruuksissa oli havaittavissa systemaattisesti esiintyviä eroja oktopolideformoituneen ja -deformoitumattoman muodon välillä, erot vaikuttivat todennäköisemmin johtuneen eri deformaatioiden välillä muuttuneesta kvadrupolideformaatiosta.

Nyt lasketuissa magneettisissa dipolisiirtymävoimakkuuksissa oktopolideformaatiolla näyttäisi olevan merkittävä vaikutus siirtymävoimakkuuksien suuruuteen viritysongian eri alueilla. Merkittävimpinä eroina ovat $K = 0$ -moodilla oktopolideformoituneen muodon spin-kääntöenergia-alueella esiintyvä siirtymävoimakkuuden kumpuilu verrattuna oktopolideformoitumattomaan muotoon, jolla puolestaan on havaittavissa selvemmat siirtymävoimakkuuden piikit. Toisena selvänä erona on havaittavissa $K = \pm 1$ -moodien suurempana esiintyvät siirtymävoimakkuudet oktopolideformoidulla muodolla saks- ja spin-kääntöresonanssien välisellä viritysongian alueella, joskin tällä alueella havaitut siirtymävoimakkuudet vain kvadrupolideformoituu, eli ei ytimen todellista perustilaa vastaavaan muotoon rajoitetulla muodolla olivat pikemminkin yllättävän pieniä. Lisäksi $K = \pm 1$ -saksiresonanssiin liittyvän siirtymävoimakkuuspiikin suuruus on tässä tutkielmassa saaduissa tuloksissa pääosin pienempi oktopolideformoituneella muodolla, mutta tämäkin vaikutti johtuneen oktopolideformaatiota todennäköisemmin pienentyneestä kvadrupolideformaatiosta oktopolideformoituu ytimeen siirryttäessä.

Vaikkakaan sähköisten dipolisiirtymävoimakkuuksien ja niiden mukaisten fotoabsorbtiovaikutusalojen kuvaajiin oktopolideformaatiolla ei näyttänyt olevan tämän tutkielman tulosten perusteella fysikaaliseksi tunnistettavaa vaikutusta, on sillä

havaittavissa selvä vaikutus ilmeisesti Skyrme-parametrisaatioon liittyvään [53] ylimääräiseltä vaikuttavaan kolmanteen siirtymävoimakkuus- tai vaikutusalapiikkiin suuremmilla viritysenenergioilla. Aiempien, joskin hieman eri laskennallisessa viitekehäyksessä tehtyjen tutkimusten [53, 54] mukaan erityisesti SkM* -parametrisaatiolla lasketuissa $E1$ -siirtymien jättidipoliresonansseissa ilmenee merkittävä, jopa pallosymmetrisillä ytimillä havaittava kolmas vaikutusalan piikki. Tämän tutkielman tulosten perusteella ytimelle oktupolideformoituneen muodon salliminen jopa täysin häivyttää tai vähintään pienentää kolmatta piikkiä, joskin ainoastaan kvadrupolideformoituneen sekä kvadrupoli- ja oktupolideformoituneiden muotojen välisen eron pienenentyessä isotooppiketjuittain neutroniluvun kasvaessa. Puolestaan SLy4-parametrisaatiolla tehdyssä vertailulaskussa ^{226}Th :lle kolmannen piikin kohdalta siirtymävoimakkuuksien ja vaikutusalojen suuruudet pienevät oktupolideformoidulla muodolla jonkin verran säilyttäen kuitenkin vain kvadrupolideformoituneelakin muodolla olleen tasannemaisen muotonsa.

$E1$ -siirtymiin ilmeisesti käytetystä Skyrme-parametrisoinnista kummunneen kolmannen vaikutusalapiikin pienenemisellä oktupolideformaation myötä ei voine tulkita olevan ainakaan suoraan fysikaalista merkitystä. Tästä huolimatta piikin pieneneminen laskuissa oktupolideformaatioon liittyen on kiinnostavaa ja kutsuu tutkimaan sen syitä tarkemmin esimerkiksi tutkimalla ytimen perustilan HFB-ratkaisua tai FAM-QRPA-laskuissa indusoituvia tiheyksiä tarkemmin, tai tekemällä vertailevia laskuja vielä muilla Skyrme-parametrisoinneilla ja korkeammilla sähköisen multipolin siirtymillä. Puolestaan tutkittujen $M1$ -siirtymävoimakkuuksien osoittaessa todennäköisemmin ytimen fysikaalisiin ominaisuuksiin liittyvää eroavaisuutta oktupolideformaatioon liittyen, voisi niille esimerkiksi eri Skyrme-parametrisaatioilla tehtävien lisälaskujen tekeminen olla hyödyllistä nytkin saatujen tulosten perusteella sen ollessa selvin yksittäinen tuloksiin epävarmuutta aiheuttanut tekijä.

Lähteet

- [1] B. L. Berman ja S. C. Fultz. "Measurements of the giant dipole resonance with monoenergetic photons". *Reviews of Modern Physics* **47** (3 1975), s. 713–761. DOI: 10.1103/RevModPhys.47.713.
- [2] P. Ring ja P. Schuck. *The Nuclear Many-body Problem*. New York: Springer-Verlag, 1980.
- [3] G. C. Baldwin ja G. S. Klaiber. "Photo-Fission in Heavy Elements". *Physical Review* **71** (1 1947), s. 3–10. DOI: 10.1103/PhysRev.71.3.
- [4] G. C. Baldwin ja G. S. Klaiber. "X-Ray Yield Curves for $\gamma - n$ Reactions". *Physical Review* **73** (10 1948), s. 1156–1163. DOI: 10.1103/PhysRev.73.1156.
- [5] M. Goldhaber ja E. Teller. "On Nuclear Dipole Vibrations". *Physical Review* **74** (9 1948), s. 1046–1049. DOI: 10.1103/PhysRev.74.1046.
- [6] A. Bohr ja B. R. Mottelson. *Nuclear Structure. Vol 2, Nuclear Deformations*. Reading, Massachusetts: Advanced Book Program, W.A., 1975.
- [7] S. Goriely ym. "Reference database for photon strength functions". *European Physical Journal A* **55**.10 (2019). DOI: 10.1140/epja/i2019-12840-1.
- [8] K. Heyde, P. von Neumann-Cosel ja A. Richter. "Magnetic dipole excitations in nuclei: Elementary modes of nucleonic motion". *Reviews of Modern Physics* **82** (3 2010), s. 2365–2419. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.2365.
- [9] W. Ziegler ym. "Orbital magnetic dipole strength in $^{148,150,152,154}\text{Sm}$ and nuclear deformation". *Physical Review Letters* **65** (20 1990), s. 2515–2518. DOI: 10.1103/PhysRevLett.65.2515.
- [10] K. Okamoto. "Intrinsic Quadrupole Moment and the Resonance Width of Photonuclear Reactions". *Physical Review* **110** (1 1958), s. 143–153. DOI: 10.1103/PhysRev.110.143.

- [11] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev ja P. Ring. "Octupole deformation in the ground states of even-even nuclei: A global analysis within the covariant density functional theory". *Physical Review C* **93** (4 2016), s. 044304. DOI: 10.1103/PhysRevC.93.044304.
- [12] Y. Cao ym. "Landscape of pear-shaped even-even nuclei". *Physical Review C* **102** (2 2020), s. 024311. DOI: 10.1103/PhysRevC.102.024311.
- [13] P. A. Butler ja W. Nazarewicz. "Intrinsic reflection asymmetry in atomic nuclei". *Reviews of Modern Physics* **68** (2 1996), s. 349–421. DOI: 10.1103/RevModPhys.68.349.
- [14] P. A. Butler. "Pear-shaped atomic nuclei". *Proceedings of the Royal Society A* **476** (2020), s. 20200202. DOI: 10.1098/rspa.2020.0202.
- [15] N. Schunck ja L. M. Robledo. "Microscopic theory of nuclear fission: a review". *Reports on Progress in Physics* **79**.11 (2016), s. 116301. DOI: 10.1088/0034-4885/79/11/116301.
- [16] J. Egido ja L. Robledo. "A mean field view of some clustering phenomena in light and heavy nuclei". *Nuclear Physics A* **738** (2004), s. 31–37. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2004.04.008>.
- [17] N. Auerbach, V. V. Flambaum ja V. Spevak. "Collective T- and P-Odd Electromagnetic Moments in Nuclei with Octupole Deformations". *Physical Review Letters* **76** (23 1996), s. 4316–4319. DOI: 10.1103/PhysRevLett.76.4316.
- [18] V. Spevak, N. Auerbach ja V. V. Flambaum. "Enhanced T-odd, P-odd electromagnetic moments in reflection asymmetric nuclei". *Physical Review C* **56** (3 1997), s. 1357–1369. DOI: 10.1103/PhysRevC.56.1357.
- [19] J. Engel, J. L. Friar ja A. C. Hayes. "Nuclear octupole correlations and the enhancement of atomic time-reversal violation". *Physical Review C* **61** (3 2000), s. 035502. DOI: 10.1103/PhysRevC.61.035502.
- [20] T. E. Chupp ym. "Electric dipole moments of atoms, molecules, nuclei, and particles". *Reviews of Modern Physics* **91** (1 2019), s. 015001. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.015001.
- [21] N. Yamanaka ja E. Hiyama. "Standard model contribution to the electric dipole moment of the deuteron, ^3H , and ^3He nuclei". *Journal of High Energy Physics* **2016**.67 (2 2016). DOI: 10.1007/JHEP02(2016)067.

- [22] M. Bender, P.-H. Heenen ja P.-G. Reinhard. "Self-consistent mean-field models for nuclear structure". *Reviews of Modern Physics* **75** (1 2003), s. 121–180. DOI: 10.1103/RevModPhys.75.121.
- [23] M. Stoitsov ym. "Axially deformed solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (II) hfbtho v2.00d: A new version of the program". *Computer Physics Communications* **184.6** (2013), s. 1592–1604. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2013.01.013>.
- [24] M. Kortelainen, N. Hinohara ja W. Nazarewicz. "Multipole modes in deformed nuclei within the finite amplitude method". *Physical Review C* **92** (5 2015), s. 051302. DOI: 10.1103/PhysRevC.92.051302.
- [25] S. Frauendorf. "Spontaneous symmetry breaking in rotating nuclei". *Reviews of Modern Physics* **73** (2 2001), s. 463–514. DOI: 10.1103/RevModPhys.73.463.
- [26] M. Chen ym. "Microscopic origin of reflection-asymmetric nuclear shapes". *Physical Review C* **103** (3 2021), s. 034303. DOI: 10.1103/PhysRevC.103.034303.
- [27] D. Vautherin. "Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. II. Axially Deformed Nuclei". *Physical Review C* **7** (1 1973), s. 296–316. DOI: 10.1103/PhysRevC.7.296.
- [28] N. Schunck, toim. *Energy Density Functional Methods for Atomic Nuclei*. Bristol, UK: IOP Publishing, 2019. DOI: 10.1088/2053-2563/aae0ed.
- [29] J. Bardeen, L. N. Cooper ja J. R. Schrieffer. "Theory of Superconductivity". *Physical Review* **108** (5 1957), s. 1175–1204. DOI: 10.1103/PhysRev.108.1175.
- [30] J. Dobaczewski, H. Flocard ja J. Treiner. "Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line". *Nuclear Physics A* **422** (1 1984), s. 103–139. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(84\)90433-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(84)90433-0).
- [31] G. C. Wick. "The Evaluation of the Collision Matrix". *Physical Review* **80** (2 1950), s. 268–272. DOI: 10.1103/PhysRev.80.268.
- [32] J. Suhonen. *From nucleons to nucleus: Concepts of microscopic nuclear theory*. Berlin: Springer, 2007.
- [33] D. Thouless. "Stability conditions and nuclear rotations in the Hartree-Fock theory". *Nuclear Physics* **21** (1960), s. 225–232. ISSN: 0029-5582. DOI: [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(60\)90048-1](https://doi.org/10.1016/0029-5582(60)90048-1).

- [34] M. Stoitsov ym. "Axially deformed solution of the Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis. The program HFBT-HO (v1.66p)". *Computer Physics Communications* **167.1** (2005), s. 43–63. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005.01.001>.
- [35] A. Baran ym. "Broyden's method in nuclear structure calculations". *Physical Review C* **78** (1 2008), s. 014318. DOI: [10.1103/PhysRevC.78.014318](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.78.014318).
- [36] J. Dechargé ja D. Gogny. "Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the D1 effective interaction on spherical nuclei". *Physical Review C* **21** (4 1980), s. 1568–1593. DOI: [10.1103/PhysRevC.21.1568](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.21.1568).
- [37] P. Ring. "Relativistic mean field theory in finite nuclei". *Progress in Particle and Nuclear Physics* **37** (1996), s. 193–263. ISSN: 0146-6410. DOI: [https://doi.org/10.1016/0146-6410\(96\)00054-3](https://doi.org/10.1016/0146-6410(96)00054-3).
- [38] J. Meng ym. "Relativistic continuum Hartree Bogoliubov theory for ground-state properties of exotic nuclei". *Progress in Particle and Nuclear Physics* **57.2** (2006), s. 470–563. ISSN: 0146-6410. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ppnp.2005.06.001>.
- [39] T. H. R. Skyrme. "CVII. The nuclear surface". *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* **1.11** (1956), s. 1043–1054. DOI: [10.1080/14786435608238186](https://doi.org/10.1080/14786435608238186).
- [40] T. Skyrme. "The effective nuclear potential". *Nuclear Physics* **9.4** (1958), s. 615–634. ISSN: 0029-5582. DOI: [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(58\)90345-6](https://doi.org/10.1016/0029-5582(58)90345-6).
- [41] E. Perlińska ym. "Local density approximation for proton-neutron pairing correlations: Formalism". *Physical Review C* **69** (1 2004), s. 014316. DOI: [10.1103/PhysRevC.69.014316](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.69.014316).
- [42] M. Kortelainen ym. "Nuclear energy density optimization". *Physical Review C* **82** (2 2010), s. 024313. DOI: [10.1103/PhysRevC.82.024313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.82.024313).
- [43] P. Avogadro ja T. Nakatsukasa. "Finite amplitude method for the quasiparticle random-phase approximation". *Physical Review C* **84** (1 2011), s. 014314. DOI: [10.1103/PhysRevC.84.014314](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.014314).

- [44] T. Nakatsukasa, T. Inakura ja K. Yabana. "Finite amplitude method for the solution of the random-phase approximation". *Physical Review C* **76** (2 2007), s. 024318. DOI: 10.1103/PhysRevC.76.024318.
- [45] H. Sasaki, T. Kawano ja I. Stetcu. "Noniterative finite amplitude methods for $E1$ and $M1$ giant resonances". *Physical Review C* **105** (4 2022), s. 044311. DOI: 10.1103/PhysRevC.105.044311.
- [46] N. Hinohara, M. Kortelainen ja W. Nazarewicz. "Low-energy collective modes of deformed superfluid nuclei within the finite-amplitude method". *Physical Review C* **87** (6 2013), s. 064309. DOI: 10.1103/PhysRevC.87.064309.
- [47] T. Oishi, M. Kortelainen ja N. Hinohara. "Finite amplitude method applied to the giant dipole resonance in heavy rare-earth nuclei". *Physical Review C* **93** (3 2016), s. 034329. DOI: 10.1103/PhysRevC.93.034329.
- [48] A. J. F. Siegert. "Note on the Interaction Between Nuclei and Electromagnetic Radiation". *Physical Review* **52** (8 1937), s. 787–789. DOI: 10.1103/PhysRev.52.787.
- [49] J. Erler ym. "The limits of the nuclear landscape". *Nature* **486** (2012), s. 509–512. DOI: 10.1038/nature11188.
- [50] J. Bartel ym. "Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces: A critical study of the SkM force". *Nuclear Physics A* **386.1** (1982), s. 79–100. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(82\)90403-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(82)90403-1).
- [51] E. Chabanat ym. "A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities". *Nuclear Physics A* **635** (1–2 1998), s. 231–256. DOI: 10.1016/S0375-9474(98)00180-8.
- [52] D. Filipescu ym. "Giant dipole resonance photofission and photoneutron reactions in ^{238}U and ^{232}Th ". *Physical Review C* **109** (4 2024), s. 044602. DOI: 10.1103/PhysRevC.109.044602.
- [53] V. O. Nesterenko ym. "Giant dipole resonance in deformed nuclei: Dependence on skyrme forces". *International Journal of Modern Physics E* **16.02** (2007), s. 624–633. DOI: 10.1142/S0218301307006071.
- [54] V. O. Nesterenko, J. Kvasil ja P.-G. Reinhard. "Separable random phase approximation for self-consistent nuclear models". *Physical Review C* **66** (4 2002), s. 044307. DOI: 10.1103/PhysRevC.66.044307.

- [55] A. Richter. "Probing the nuclear magnetic dipole response with electrons, photons and hadrons". *Progress in Particle and Nuclear Physics* **34** (1995), s. 261–284. DOI: [https://doi.org/10.1016/0146-6410\(95\)00022-B](https://doi.org/10.1016/0146-6410(95)00022-B).

A FAM-QRPA-yhtälöiden johtaminen

Tässä liitteessä teen yksityiskohtaisesti luvuissa 2.5.1 ja 2.5.2 määriteltyjen $F(t)$:n, $H(t)$:n ja $\beta_k(t)$:n sijoittaminen ajasta riippuvaan HFB-yhtälöön (55). Lisäksi näin muodostetusta yhtälöstä johdan yksityiskohtaisesti FAM-QRPA-yhtälöt (65) [43].

Sopivan muotoisen ajasta riippuvan HFB-yhtälön muodostus voidaan aloittaa sijoittamalla yhtälöissä (56), (47) ja (62) määritellyt $H(t)$, $F(t)$, ja $\beta_k(t)$ yhtälöön (55), jonka jälkeen esitystä muokataan, kunnes odotusarvon laskeminen HFB-tilan suhteen käy sujuvasti. Sijoittamalla määritelmät yhtälöön (55) sen vasemmasta puolesta tulee

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \beta_k(t)}{\partial t} &= i \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \beta_k + \delta \beta_k(t) \right\} e^{iE_k t} \\ &= e^{iE_k t} \left\{ i \frac{\partial \delta \beta_k(t)}{\partial t} - E_k (\beta_k + \delta \beta_k(t)) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Vastaavasti sijoittamalla yhtälön (55) oikeasta puolesta, kun jätetään η :n suhteen lineaarista suuremmat termit pois, mitä ajatellen olen merkinnyt seuraavassa yhtälössä funktioiden mahdolliset suoraan verrannollisuudet η :n suhteen yläindekseinä jättäen merkinnän ensimmäisellä ja viimeisellä rivillä pois, ja kun ei vielä kirjoiteta auki ajasta riippuvaa kenttää $F(t)$, tulee

$$\begin{aligned} &[H(t) + F(t), \beta_k(t)] \\ &= [H_0 + \delta H^\eta(t) + F^\eta(t), \beta_k + \delta \beta_k^\eta(t)] e^{iE_k t} \\ &= \left\{ [H_0, \beta_k] + [H_0, \delta \beta_k^\eta(t)] + [\delta H^\eta(t), \beta_k] \right. \\ &\quad \left. + [\delta H^\eta(t), \delta \beta_k^\eta(t)] + [F^\eta(t), \beta_k] + [F^\eta(t), \delta \beta_k^\eta(t)] \right\} e^{iE_k t} \\ &= \left\{ [H_0, \beta_k] + [H_0, \delta \beta_k^\eta(t)] + [\delta H^\eta(t), \beta_k] + [F^\eta(t), \beta_k] \right\} e^{iE_k t} + \mathcal{O}(\eta^2) \\ &= \left\{ [H_0, \delta \beta_k(t)] + [H_0 + \delta H(t) + F(t), \beta_k] \right\} e^{iE_k t} + \mathcal{O}(\eta^2). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Sijoittamalla yhtälöiden (A.1) ja (A.2) mukaiset vasen ja oikea puoli ajasta riippuvaan

HFB-yhtälöön (55) saadaan

$$e^{iE_k t} \left\{ i \frac{\partial \delta \beta_k(t)}{\partial t} - E_k (\beta_k + \delta \beta_k(t)) \right\} = \left\{ [H_0, \delta \beta_k(t)] + [H_0 + \delta H(t) + F(t), \beta_k] \right\} e^{iE_k t}, \quad (\text{A.3})$$

mistä uudelleen järjestelemällä termejä ja supistamalla eksponenttifunktio saadaan

$$i \frac{\partial \delta \beta_k(t)}{\partial t} = E_k (\beta_k + \delta \beta_k(t)) + [H_0, \delta \beta_k(t)] + [H_0 + \delta H(t) + F(t), \beta_k]. \quad (\text{A.4})$$

Laskemalla nyt yhtälön (A.4) vasemman puolen aikaderivaatan saadaan

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \delta \beta_k(t)}{\partial t} &= i \frac{\partial}{\partial t} \eta \sum_{\mu} \beta_{\mu}^{\dagger} \left\{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \right\} \\ &= \eta \omega \sum_{\mu} \beta_{\mu}^{\dagger} \left\{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

ja sijoittamalla yhtälöstä (A.5) saatu vasen puoli yhtälöön (A.4) saadaan

$$\begin{aligned} \eta \omega \sum_{\mu} \beta_{\mu}^{\dagger} \left\{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \right\} \\ = E_k (\beta_k + \delta \beta_k(t)) + [H_0, \delta \beta_k(t)] + [H_0 + \delta H(t) + F(t), \beta_k]. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Tarkastelemalla yhtälössä (A.6) esiintyviä termejä luvuissa 2.5.1 ja 2.5.2 esitettyine määritelmineen käy selväksi Wickin teoremaa [31] käyttämällä, että kaikkien termien odotusarvoksi HFB-tilan suhteen tulee nolla. Yhtälöstä (A.6) voi kuitenkin huomata, että kertomalla sitä vasemmalta β_l :llä, missä l on jokin valitun kantatila-avaruuden tila, saadaan termeistä ei-nollaa olevia odotusarvoja HFB-tilan suhteen, minkä peruste käy selväksi seuraavien laskujen myötä.

Joten kerrotaan yhtälöä (A.6) vasemmalta β_l :llä ja otetaan saadusta yhtälöstä odotusarvo HFB-tilan suhteen. Näin saadaan

$$\begin{aligned} \eta \omega \sum_{\mu} \langle \Phi | \beta_l \beta_{\mu}^{\dagger} | \Phi \rangle \left\{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \right\} \\ = \left\{ E_k \langle \Phi | \beta_l \beta_k | \Phi \rangle + E_k \langle \Phi | \beta_l \delta \beta_k(t) | \Phi \rangle + \langle \Phi | \beta_l [H_0, \delta \beta_k(t)] | \Phi \rangle \right. \\ \left. + \langle \Phi | \beta_l [H_0, \beta_k] | \Phi \rangle + \langle \Phi | \beta_l [\delta H(t), \beta_k] | \Phi \rangle + \langle \Phi | \beta_l [F(t), \beta_k] | \Phi \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

missä on nyt yhteensä seitsemän odotusarvoa, jotka voidaan laskea Wickin teoremaa käyttäen tietäen kvasihiukkasoperaattoreiden kontraktiot (15) HFB-tilan

suhteen. Merkitsemällä seuraavissa yhtälöissä vain kontraktiot, jotka eivät yhtälön (15) mukaan ole triviaalisti nollia yhtälön (A.7) vasemmasta puolesta tulee

$$\begin{aligned}
\eta\omega \sum_{\mu} \langle \Phi | \beta_l \beta_{\mu}^{\dagger} | \Phi \rangle \{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta\omega \sum_{\mu} \overline{\beta_l \beta_{\mu}^{\dagger}} \{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta\omega \sum_{\mu} \delta_{l\mu} \{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta\omega \{ X_{lk}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{lk}^*(\omega) e^{i\omega t} \}.
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Yhtälön (A.7) oikean puolen ensimmäinen termi on selvästi nolla, mutta toinen termi puolestaan määritelmää (63) $\delta\beta_k(t)$:lle käyttäen on

$$\begin{aligned}
E_k \langle \Phi | \beta_l \delta\beta_k(t) | \Phi \rangle &= \eta E_k \sum_{\mu} \langle \Phi | \beta_l \beta_{\mu}^{\dagger} | \Phi \rangle \{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta E_k \sum_{\mu} \overline{\beta_l \beta_{\mu}^{\dagger}} \{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta E_k \sum_{\mu} \delta_{l\mu} \{ X_{\mu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\mu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta E_k \{ X_{lk}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{lk}^*(\omega) e^{i\omega t} \}.
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Yhtälön (A.7) oikean puolen kolmas termi, käyttämällä määritelmää (28) H_0 :lle, saadaan muotoon

$$\begin{aligned}
&\langle \Phi | \beta_l [H_0, \delta\beta_k(t)] | \Phi \rangle \\
&= \eta \sum_{\mu\nu} E_{\mu} \langle \Phi | \beta_l [\beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\mu}, \beta_{\nu}^{\dagger}] | \Phi \rangle \{ X_{\nu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta \sum_{\mu\nu} E_{\mu} \{ \langle \Phi | \beta_l \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\mu} \beta_{\nu}^{\dagger} | \Phi \rangle - \underbrace{\langle \Phi | \beta_l \beta_{\nu}^{\dagger} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\mu} | \Phi \rangle}_{=0} \} \{ X_{\nu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta \sum_{\mu\nu} E_{\mu} \overline{\beta_l \beta_{\mu}^{\dagger}} \overline{\beta_{\mu} \beta_{\nu}^{\dagger}} \{ X_{\nu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta \sum_{\mu\nu} E_{\mu} \delta_{l\mu} \delta_{\mu\nu} \{ X_{\nu k}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu k}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\
&= \eta E_l \{ X_{lk}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{lk}^*(\omega) e^{i\omega t} \}.
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Yhtälön (A.7) oikean puolen neljäs termi on nolla, sillä

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | \beta_l [H_0, \beta_k] | \Phi \rangle &= \eta \sum_{\mu} E_{\mu} \langle \Phi | \beta_l [\beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\mu}, \beta_k] | \Phi \rangle \\
&= \eta \sum_{\mu} E_{\mu} \left\{ \underbrace{\langle \Phi | \beta_l \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\mu} \beta_k | \Phi \rangle}_{=0} - \underbrace{\langle \Phi | \beta_l \beta_k \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\mu} | \Phi \rangle}_{=0} \right\} \quad (\text{A.11}) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Yhtälön (A.7) oikean puolen viides termi, kun huomataan, että $\delta H(\omega)$:sta (61) ja sen hermiten konjugaatista $\delta H^{\dagger}(\omega)$ nollasta poikkeavia odotusarvoja selvästikin saa vain termit, joissa on kaksi kvasihiukkasluontioperaattoria, on

$$\begin{aligned}
&\langle \Phi | \beta_l [\delta H(t), \beta_k] | \Phi \rangle \\
&= \eta \langle \Phi | \beta_l [\delta H(\omega) e^{-i\omega t} + \delta H^{\dagger}(\omega) e^{i\omega t}, \beta_k] | \Phi \rangle \\
&= \frac{1}{2} \eta \left\{ \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) \langle \Phi | \beta_l [\beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger}, \beta_k] | \Phi \rangle e^{-i\omega t} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{02*}(\omega) \langle \Phi | \beta_l [\beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger}, \beta_k] | \Phi \rangle e^{i\omega t} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \eta \left\{ \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) \left(\underbrace{\langle \Phi | \beta_l \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} \beta_k | \Phi \rangle}_{=0} - \langle \Phi | \beta_l \beta_k \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} | \Phi \rangle \right) e^{-i\omega t} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{02*}(\omega) \left(\underbrace{\langle \Phi | \beta_l \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} \beta_k | \Phi \rangle}_{=0} - \langle \Phi | \beta_l \beta_k \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} | \Phi \rangle \right) e^{i\omega t} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \eta \left\{ \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) \left(-\overbrace{\beta_l \beta_k \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger}} - \overbrace{\beta_l \beta_k \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger}} \right) e^{-i\omega t} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{02*}(\omega) \left(-\overbrace{\beta_l \beta_k \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger}} - \overbrace{\beta_l \beta_k \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger}} \right) e^{i\omega t} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \eta \left\{ \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) (\delta_{l\mu} \delta_{k\nu} - \delta_{l\nu} \delta_{k\mu}) e^{-i\omega t} + \sum_{\mu\nu} \delta H_{\mu\nu}^{02*}(\omega) (\delta_{l\mu} \delta_{k\nu} - \delta_{l\nu} \delta_{k\mu}) e^{i\omega t} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \eta \left\{ \left(\delta H_{lk}^{20}(\omega) - \underbrace{\delta H_{kl}^{20}(\omega)}_{=-\delta H_{lk}^{20}(\omega)} \right) e^{-i\omega t} + \left(\delta H_{lk}^{02*}(\omega) - \underbrace{\delta H_{kl}^{02*}(\omega)}_{=-\delta H_{lk}^{02*}(\omega)} \right) e^{i\omega t} \right\} \\
&= \eta \left\{ \delta H_{lk}^{20}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta H_{lk}^{02*}(\omega) e^{i\omega t} \right\}. \quad (\text{A.12})
\end{aligned}$$

Edellä laskussa (A.12) hyödynsin toiseksi viimeisellä rivillä δH^{20} :n ja δH^{02} :n antisymmetrisyyttä, minkä näkee niiden lausekkeista (70) ja (71) tietäen, että $\delta \Delta^{(\pm)}$ on antisymmetrinen [43]. Yhtälön (A.7) oikean puolen kuudes termi, kun huomataan,

että jälleen ei nollaa olevia odotusarvoja antaa vain termit, joissa on kaksi kvasihiukkasluontiooperaattoria, on muodoltaan täysin vastaava laskun (A.12) kanssa, joten se on

$$\langle \Phi | \beta_l [F(t), \beta_k] | \Phi \rangle = \eta \{ F_{lk}^{20}(\omega) e^{-i\omega t} + F_{lk}^{02*}(\omega) e^{i\omega t} \}. \quad (\text{A.13})$$

Kokoamalla yhtälöissä (A.8)–(A.13) lasketut arvot yhtälön (A.7) termeille saadaan ajasta riippuvaksi HFB-yhtälöksi

$$\begin{aligned} & \eta \omega \{ X_{lk}(\omega) e^{-i\omega t} - Y_{lk}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\ & = \eta E_k \{ X_{lk}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{lk}^*(\omega) e^{i\omega t} \} + \eta E_l \{ X_{lk}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{lk}^*(\omega) e^{i\omega t} \} \\ & \quad + \eta \{ \delta H_{lk}^{20}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta H_{lk}^{02*}(\omega) e^{i\omega t} \} + \eta \{ F_{lk}^{20}(\omega) e^{-i\omega t} + F_{lk}^{02*}(\omega) e^{i\omega t} \}. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Yhtälön (A.14) täytyessä toteutua kaikilla ajan hetkillä t voidaan eri eksponenttifunktioita vastaavat termit kerätä kahdeksi yhtälöksi. Lisäksi supistamalla η :n ($\eta \neq 0$) pois saadaan yhtälöstä (A.14) kaksi yhtälö(ryhmää)

$$\begin{aligned} (E_k + E_l - \omega) X_{lk}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta H_{lk}^{20}(\omega) e^{-i\omega t} + F_{lk}^{20}(\omega) e^{-i\omega t} &= 0 \\ (E_k + E_l + \omega) Y_{lk}^*(\omega) e^{i\omega t} + \delta H_{lk}^{02*}(\omega) e^{i\omega t} + F_{lk}^{02*}(\omega) e^{i\omega t} &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

joista molemmista eksponenttifunktiot voidaan supistaa. Ottamalla vielä kompleksikonjugaatin alemmasta yhtälön (A.15) yhtälöstä saadaan FAM-QRPA-yhtälöt lopulliseen muotoonsa

$$\begin{aligned} (E_k + E_l - \omega) X_{lk}(\omega) + \delta H_{lk}^{20}(\omega) &= -F_{lk}^{20}(\omega) \\ (E_k + E_l + \omega) Y_{lk}(\omega) + \delta H_{lk}^{02}(\omega) &= -F_{lk}^{02}(\omega). \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Ekspansoimalla $\delta H_{lk}^{20}(\omega)$ ja $\delta H_{lk}^{02}(\omega)$ yhtälössä (A.16) saataisiin FAM-QRPA-yhtälöistä QRPA-yhtälö perinteisemmässä matriisimuodossa [43], mutta FAM-QRPA-menetelmää käytettäessä pitäydytään yhtälön (A.16) mukaisessa FAM-QRPA-muodossa.

B FAM-QRPA-tiheydet

Tässä liitteessä muodostan yhtälöiden (75)–(77) mukaiset indusoituneet FAM-QRPA-tiheydet lähteen [43] mukaisesti. Ajasta riippuvien kvasihiukkasten yhtälöiden (62) ja (63) perusteella [43] saadaan kvasihiukkasten ajasta riippuviksi aaltofunktioiden amplitudeiksi

$$\begin{aligned} U_k(t) &= \mathcal{U}_k(t)e^{-iE_k t}, \\ V_k(t) &= \mathcal{V}_k(t)e^{-iE_k t}, \end{aligned} \tag{B.17}$$

missä $\mathcal{U}_k(t)$ ja $\mathcal{V}_k(t)$ ovat

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{kl}(t) &= \left\{ U + \eta \left(V^* X^* e^{i\omega t} + V^* Y e^{-i\omega t} \right) \right\}_{kl}, \\ \mathcal{V}_{kl}(t) &= \left\{ V + \eta \left(U^* X^* e^{i\omega t} + U^* Y e^{-i\omega t} \right) \right\}_{kl}. \end{aligned} \tag{B.18}$$

Ajasta riippuvista HFB-aaltofunktioiden amplitudeista saadaan ajasta riippuvaksi tiheydeksi ($\rho = V^* V^T$) [43]

$$\begin{aligned} \rho(t) &= V^*(t)V^T(t) \\ &= \left\{ \mathcal{V}(t)e^{-iEt} \right\}^* \left\{ \mathcal{V}(t)e^{-iEt} \right\}^T \\ &= \mathcal{V}^*(t)\mathcal{V}^T(t) \\ &= \left\{ V + \eta \left(U^* X^* e^{i\omega t} + U^* Y e^{-i\omega t} \right) \right\}^* \left\{ V + \eta \left(U^* X^* e^{i\omega t} + U^* Y e^{-i\omega t} \right) \right\}^T \\ &= \left\{ V^* + \eta \left(U X e^{-i\omega t} + U Y^* e^{i\omega t} \right) \right\} \left\{ V^T + \eta \left(X^\dagger U^\dagger e^{i\omega t} + Y^T U^\dagger e^{-i\omega t} \right) \right\} \\ &= \underbrace{V^* V^T}_{\equiv \rho_0} + \eta \left\{ \left(U X V^T + V^* Y^T U^\dagger \right) e^{-i\omega t} + \left(V^* X^\dagger U^\dagger + U Y^* V^T \right) e^{i\omega t} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \end{aligned} \tag{B.19}$$

Toisaalta ajasta riippuva tiheys ekspansoituna lineaariseen termiin asti η :n suhteen on [43]

$$\rho(t) = \rho_0 + \eta \left\{ \delta\rho(\omega)e^{-i\omega t} + \delta\rho^\dagger(\omega)e^{i\omega t} \right\}, \tag{B.20}$$

joten voidaan tunnistaa

$$\delta\rho(\omega) = UXV^T + V^*Y^TU^\dagger \quad (\text{B.21})$$

ja vastaavasti sen hermiten konjugaatti. Lisäksi FAM-QRPA-menetelmässä tiheyden muutos voidaan esittää muodossa [43]

$$\delta\rho(\omega) = \frac{\rho_\eta - \rho_0}{\eta} + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (\text{B.22})$$

missä ρ_η on niin kutsuttu FAM-QRPA-tiheys – tiheys, joka on η :n mukaisesti lineaarisesti poikennut staattisen ratkaisun tiheydestä ρ_0 . Toisin kirjoitettuna yhtälöstä (B.22) saadaan FAM-QRPA-tiheydeksi

$$\begin{aligned} \rho_\eta &= \rho_0 + \eta\delta\rho(\omega) + \mathcal{O}(\eta^2) \\ &= V^*V^T + \eta(UXV^T + V^*Y^TU^\dagger). \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Vastaavasti pariliitostensoriksi saadaan ($\kappa = V^*U^T = -UV^\dagger$)

$$\begin{aligned} \kappa(t) &= V^*(t)U^T(t) \\ &= \{\mathcal{V}(t)e^{-iEt}\}^* \{\mathcal{U}(t)e^{-iEt}\}^T \\ &= \mathcal{V}^*(t)\mathcal{U}^T(t) \\ &= \left\{V + \eta(U^*X^*e^{i\omega t} + U^*Ye^{-i\omega t})\right\}^* \left\{U + \eta(V^*X^*e^{i\omega t} + V^*Ye^{-i\omega t})\right\}^T \\ &= \left\{V^* + \eta(UXe^{-i\omega t} + UY^*e^{i\omega t})\right\} \left\{U^T + \eta(X^\dagger V^\dagger e^{i\omega t} + Y^T U^\dagger e^{-i\omega t})\right\} \\ &= \underbrace{V^*U^T}_{\equiv \kappa_0} + \eta \left\{ (UXU^T + V^*Y^TV^\dagger)e^{-i\omega t} + (V^*X^\dagger V^\dagger + UY^*U^T)e^{i\omega t} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Ei-hermiittisenä (ρ :sta poiketen) κ voidaan ekspansoida η :n lineaariseen termiin asti muodossa [43]

$$\kappa(t) = \kappa_0 + \eta \left\{ \delta\kappa^{(+)}(\omega)e^{-i\omega t} + \delta\kappa^{(-)}(\omega)e^{i\omega t} \right\}, \quad (\text{B.25})$$

joten tunnistetaan

$$\begin{aligned} \delta\kappa^{(+)}(\omega) &= UXU^T + V^*Y^TV^\dagger, \\ \delta\kappa^{(-)}(\omega) &= V^*X^\dagger V^\dagger + UY^*U^T. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Tiheyttä ρ vastaten pariliitostensorin κ FAM-QRPA-muodoiksi tulee

$$\begin{aligned}\kappa_{\eta}^{(+)} &= \kappa_0 + \eta\delta\kappa^{(+)}(\omega) \\ &= V^*U^T + \eta(UXU^T + V^*Y^TV^{\dagger})\end{aligned}\tag{B.27}$$

ja

$$\begin{aligned}\kappa_{\eta}^{(-)} &= \kappa_0 + \eta\delta\kappa^{(-)}(\omega) \\ &= V^*U^T + \eta(V^*X^{\dagger}V^{\dagger} + UY^*U^T).\end{aligned}\tag{B.28}$$

Toisaalta käyttämällä pariliitostensorin FAM-QRPA-muodon muodostuksessa edellä käytetyn sijaan määrittelyä $\kappa = -UV^{\dagger}$ tai hyödyntämällä antisymmetrisyyttä saaduissa tuloksissa (B.27) ja (B.28) saataisiin $\kappa_{\eta}^{(+)}$ ja $\kappa_{\eta}^{(-)}$ lähteen [24] mukaisessa muodossa

$$\kappa_{\eta,2}^{(+)} = -UV^{\dagger} - \eta(UX^T U^T + V^*YV^{\dagger})$$

ja

$$\kappa_{\eta,2}^{(-)} = -UV^{\dagger} - \eta(V^*X^*V^{\dagger} + UY^{\dagger}U^T).$$

C Esimerkkiparametritiedostot

Alla on esimerkki tyypillisestä parametritiedostosta, jolla HFBTHO v2.00d -laskentaohjelmalla tehtyjä laskuja on ajettu.

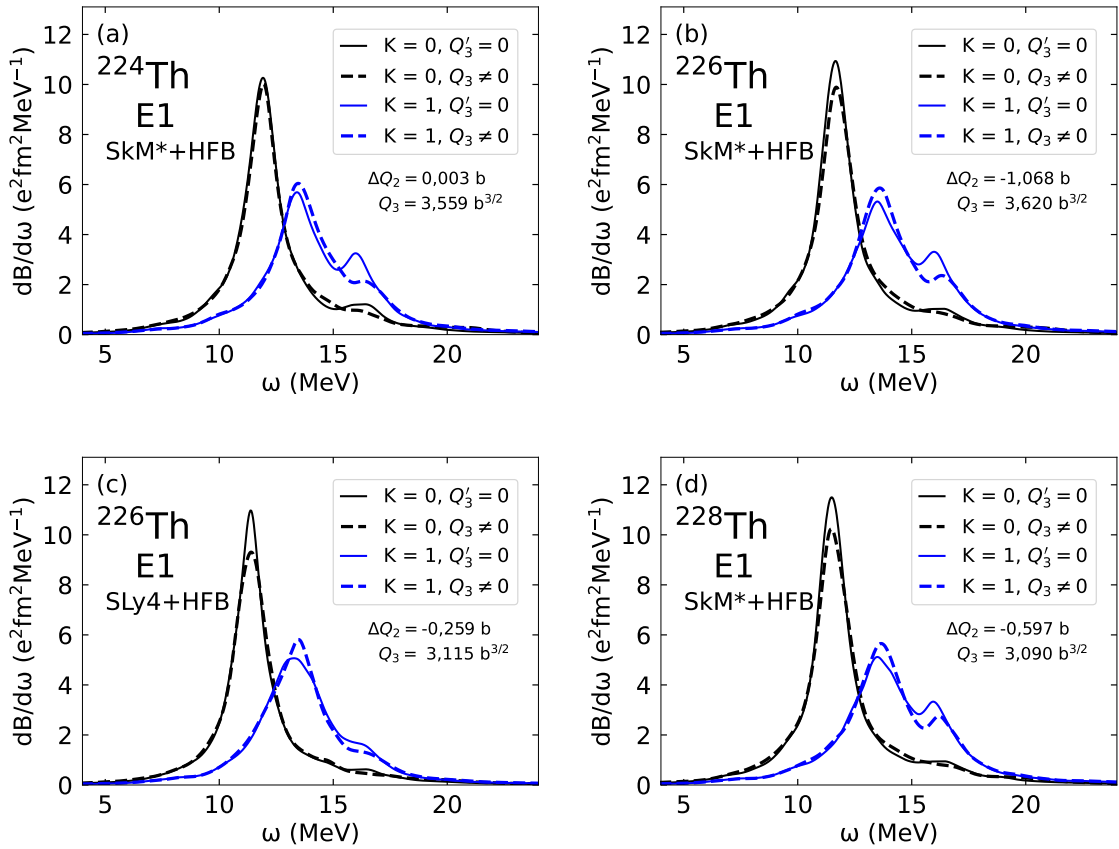
```
&HFBTHO_GENERAL
  number_of_shells = 20, oscillator_length = -1.0, basis_deformation = 0.0,
  proton_number = 90, neutron_number = 136, type_of_calculation = 1 /
&HFBTHO_ITERATIONS
  number_iterations = 400, accuracy = 1.E-7, restart_file = 1 /
&HFBTHO_FUNCTIONAL
  functional = 'SKM*', add_initial_pairing = F, type_of_coulomb = 2 /
&HFBTHO_PAIRING
  user_pairing = F, vpair_n = -300.0, vpair_p = -300.0,
  pairing_cutoff = 60.0, pairing_feature = 0.5 /
&HFBTHO_CONSTRAINTS
  lambda_values = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8,
  lambda_active = 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0,
  expectation_values = 0.0, 15.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 /
&HFBTHO_BLOCKING
  proton_blocking = 0, 0, 0, 0, 0, 0, neutron_blocking = 0, 0, 0, 0, 0 /
&HFBTHO_PROJECTION
  switch_to_THO = 0, projection_is_on = 0,
  gauge_points = 11, delta_Z = 0, delta_N = 0 /
&HFBTHO_TEMPERATURE
  set_temperature = F, temperature = 0.0 /
&HFBTHO_DEBUG
  number_Gauss = 40, number_Laguerre = 40, number_Legendre = 80,
  compatibility_HFOODD = F, number_states = 500, force_parity = F,
  print_time = 0 /
```

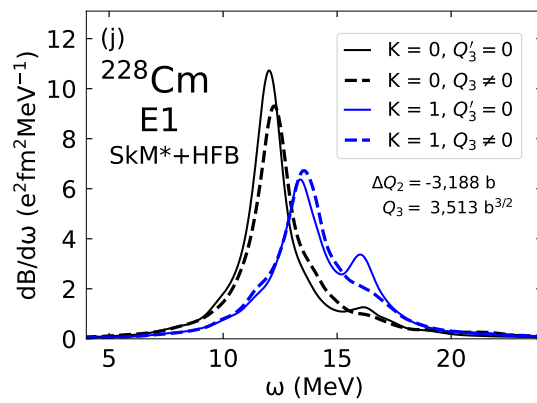
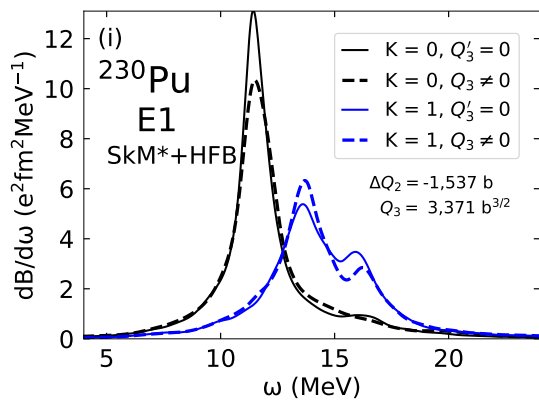
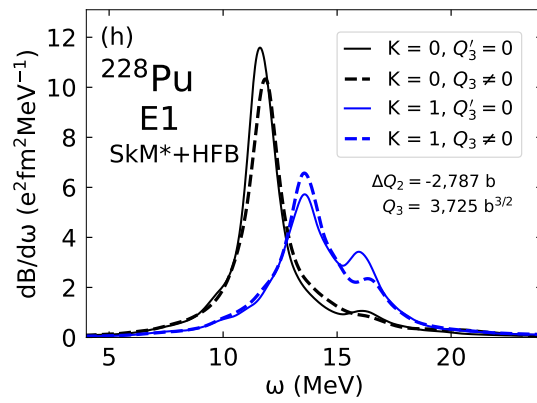
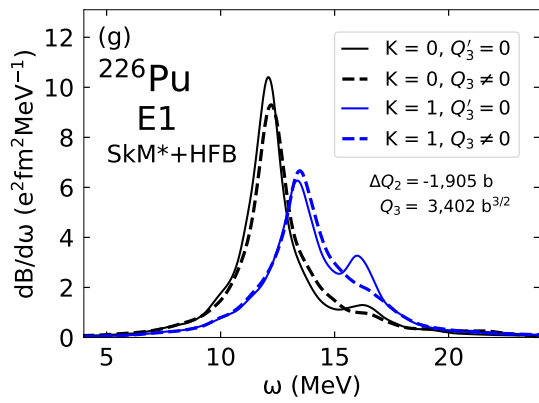
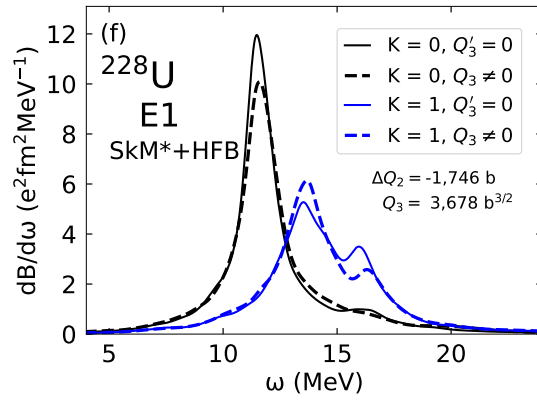
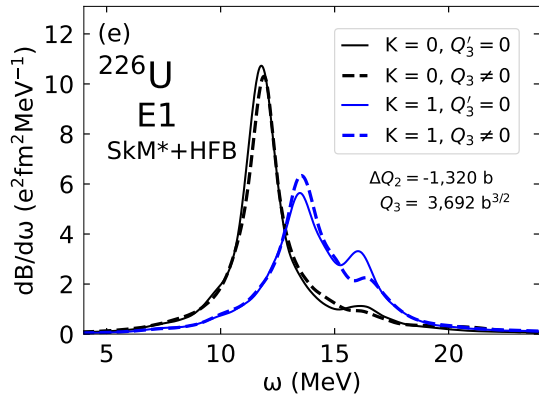
Alla on esimerkki FAM-QRPA-laskuissa käytetystä tyypillisestä parametritiedostosta, josta olen tätä esitystä varten poistanut tässä tutkielmassa tehtyjen laskujen kannalta epäolennaisiksi jääneet parametririvit.

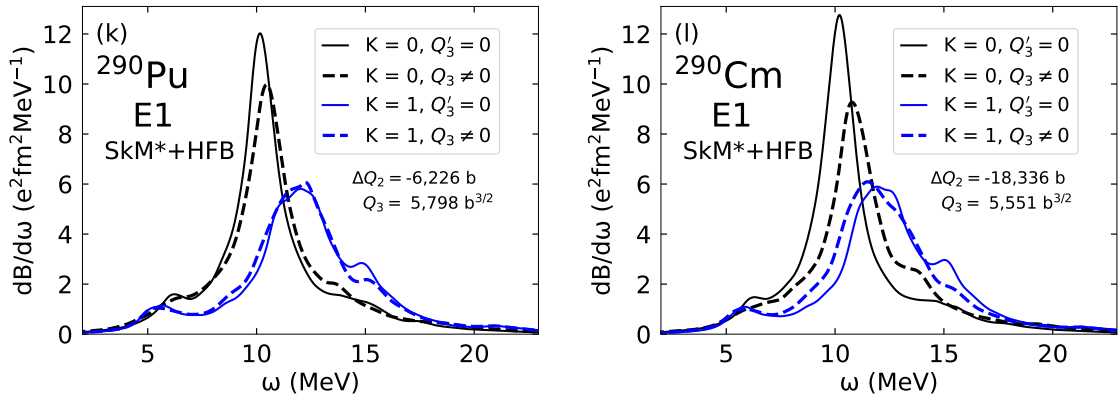
```
===== qrpa.inp =====
1,0          ! calc. path, file io (integers)
1,1,1,0     ! 0,T,L,K (integers)
0.0000004   ! qrpa_eps (stop criteria - accuracy)
200         ! max_iter_qrpa (stop criteria - interactions)
30          ! qrpa_nbroyden (inter Broyden)
0.33        ! qrpa_alphamix (mix Linear/Broyden)
1,0.4,1.3,0.0,0.0 ! time-odd cc, g0,g0',g1,g1' (integer, 4 reals)
0.0,0.5,0.3,0.0 ! line parameters (Re and Im part of the starting point, Re and Im part of the step)
128,0      ! qrpa_points, points2 (number of points to calculate, se details later)
=====
```


D Tuloskuvaajia

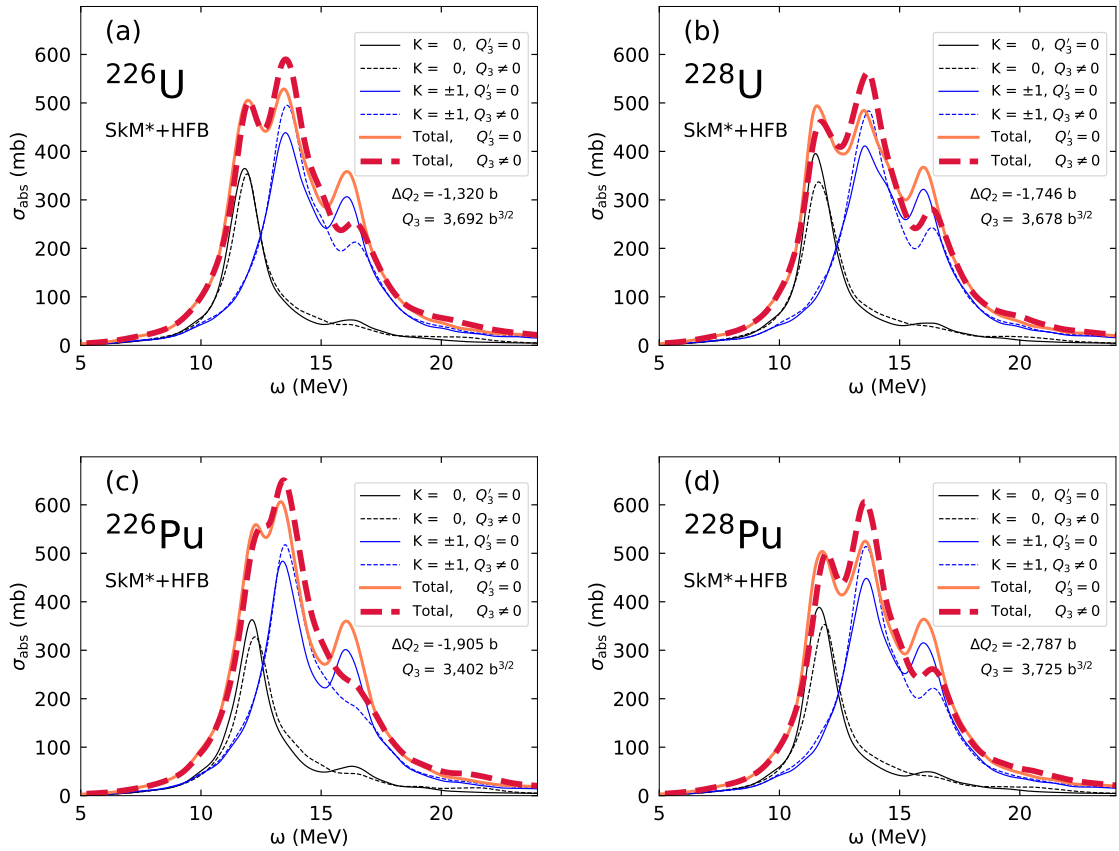
Tässä liitteessä on kaikkien niiden ytimien sähköiset dipolisiirtymävoimakkuusfunktiot ja fotoabsorbtiovaikutusalat, joita ei luvussa 4 ollut esitettyinä. Lisäksi tässä liitteessä on suuremmalla energian välillä piirretyt kaikkien niiden ytimien magneettiset dipolisiirtymävoimakkuudet, joita ei ollut osiossa 4.4 suuremmalla energiavälillä esitettyinä.

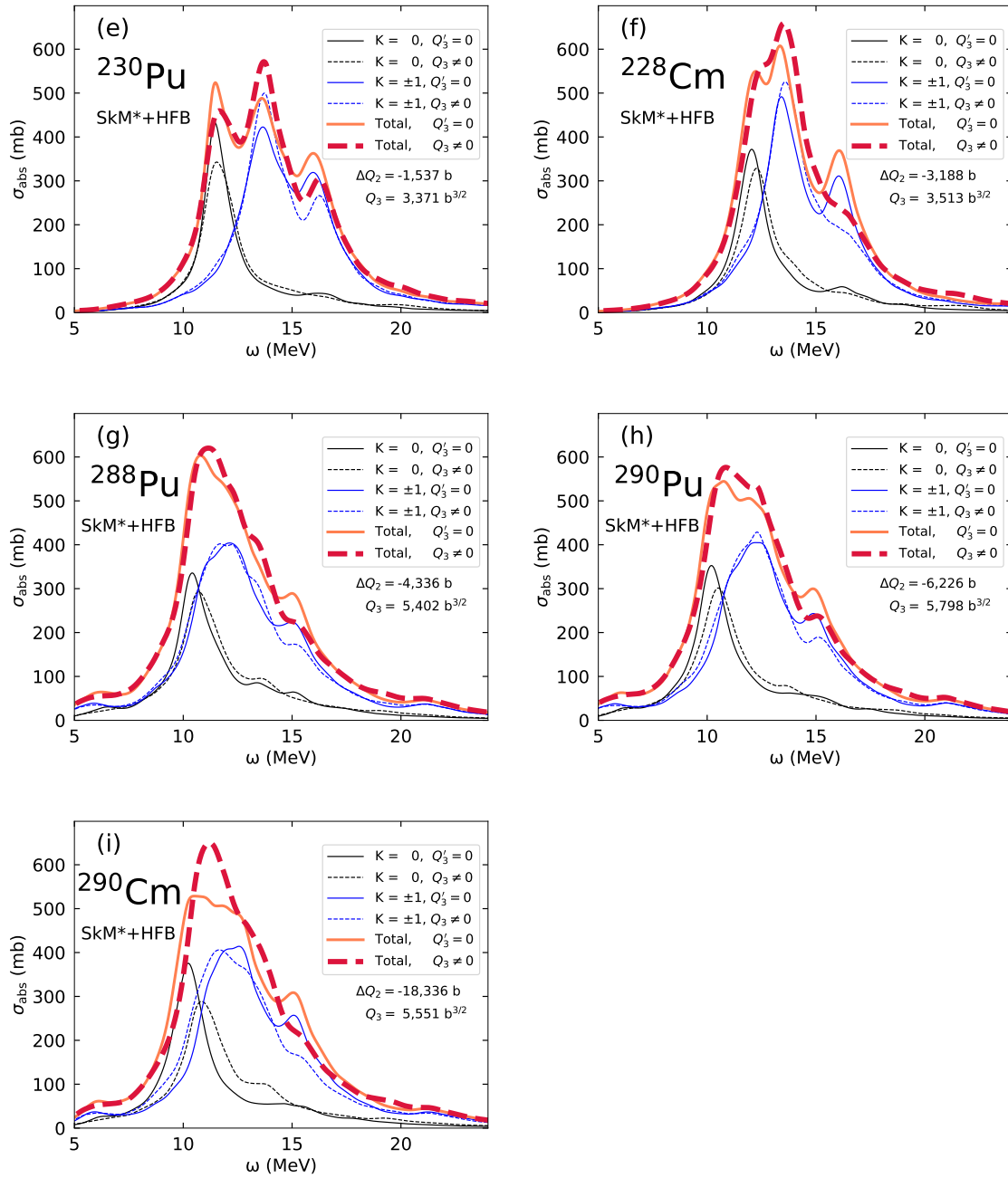




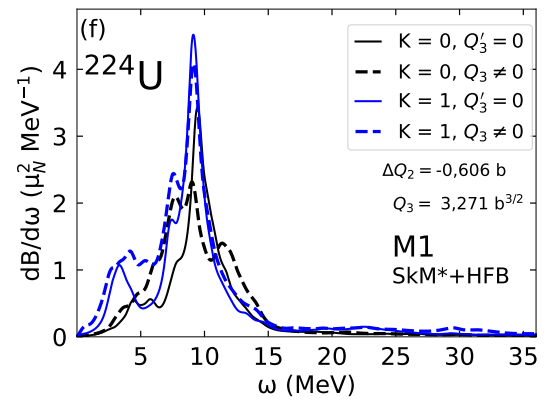
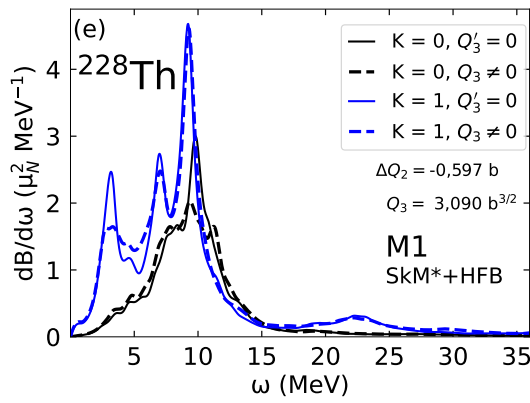
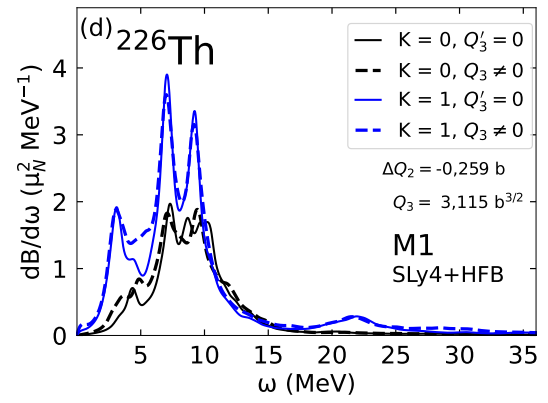
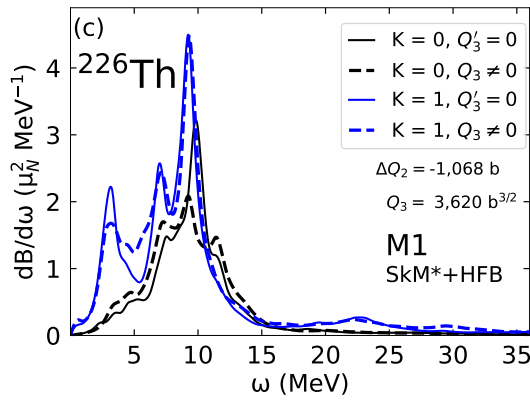
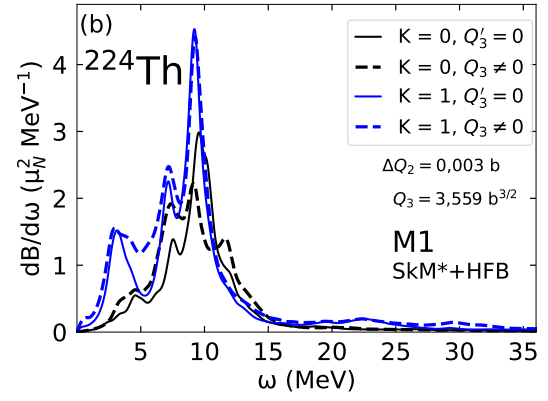
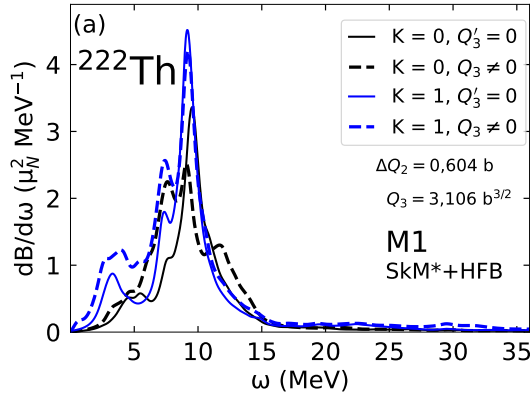


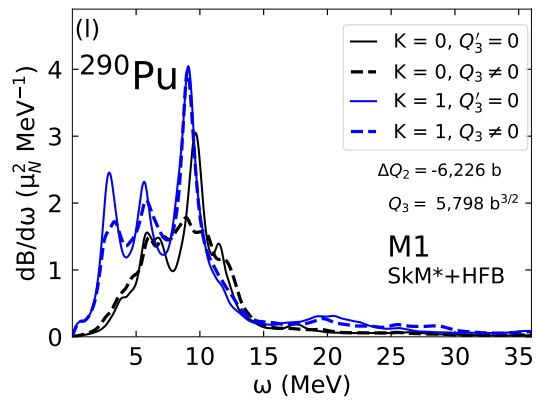
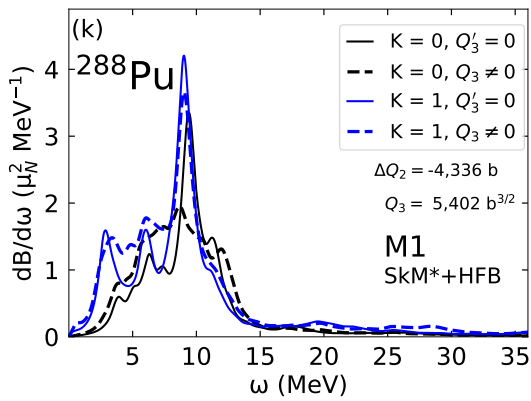
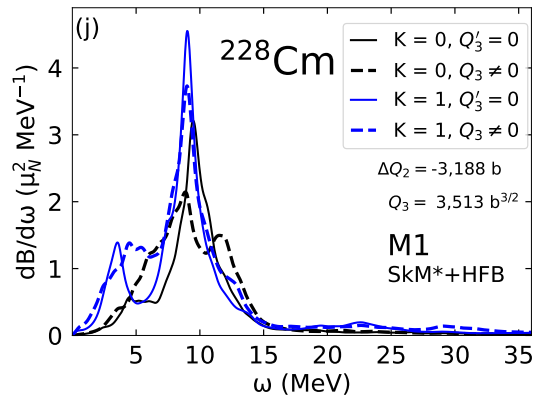
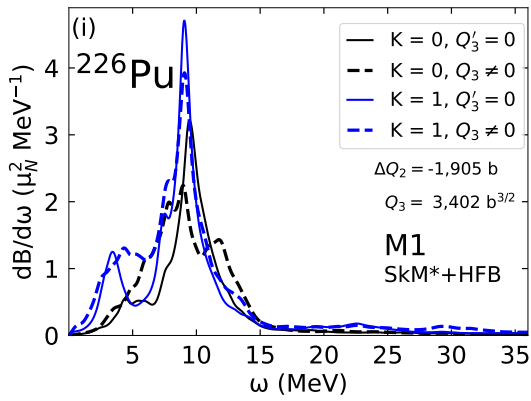
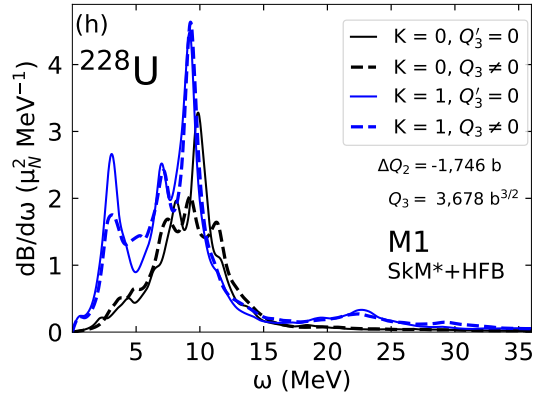
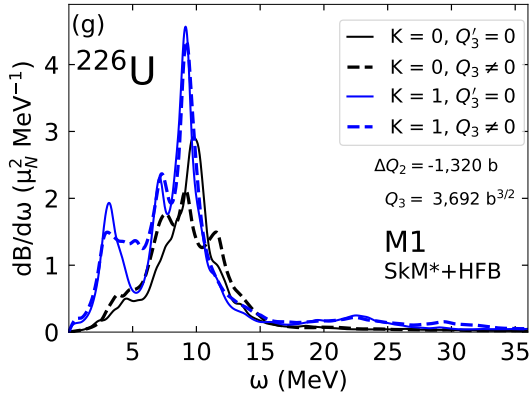
Kuva 11. Tulokset-osiassa 4.2 esittämättömät sähköiset dipolisiirtymävoimakkuusfunktioiden kuvaajat kuvan 3 mukaisin selityksin.

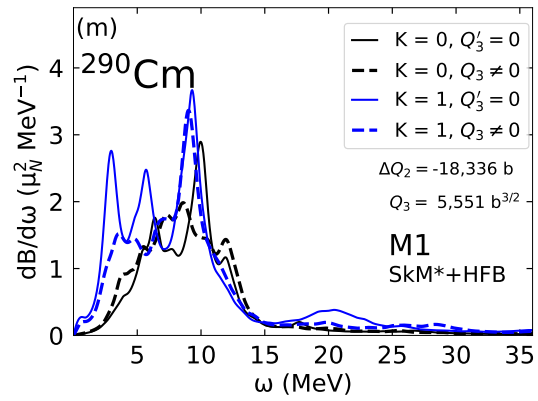




Kuva 12. Tulokset-osiossa 4.3 esittämättömät fotoabsorptiovaikutusalojen kuvaajat kuvan 5 mukaisin selityksin.







Kuva 13. Tulokset-osiossa 4.4 laajemmalla energiavälillä esittämättömät magneettiset dipolisiirtymävoimakkuuskuvajat kuvan 8 mukaisin selityksin.